



UNIWERSYTET
JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

Institut

Fizyki Teoretycznej

Kraków, 5 listopada 2021

Prof. dr hab. Bartłomiej Dybiec
Instytut Fizyki Teoretycznej
Uniwersytet Jagielloński
bartlomiej.dybiec@uj.edu.pl

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Aleksandry Słapik „Anomalous transport in nonequilibrium systems: From negative mobility to particle separation”.

1. Podstawowe informacje o Doktorantce

Pani Aleksandra Słapik jest uczestniczką studiów doktoranckich w Instytucie Fizyki Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach. Studia doktoranckie łączyła z pracą zawodową. Wiodącym motywem badań prowadzonych przez Doktorantkę jest badanie zjawisk transportu w dynamicznych układach stochastycznych, które to badania stanowią podstawę pracy doktorskiej. Pozostałe, wcześniej opublikowane prace dotyczą transportu cholesterolu (J. Theor. Biol. 411 81 (2016)) oraz sprzężenia bozonu Higgsa i kwarku top (Eur. Phys. J. C 75 475 (2015)). Wszystkie prace doktorantki zostały zacytowane 52 razy (bez autocytowań 46) razy. Najlepiej cytowanymi pracami są prace A1 i A2 stanowiące rozprawę doktorską.

2. Ocena rozprawy doktorskiej

Rozprawa doktorska „Anomalous transport in nonequilibrium systems: From negative mobility to particle separation” ma formę wstępu do czterech artykułów A1 – A4 opublikowanych w latach 2018 – 2020 w renomowanych, recenzowanych czasopismach naukowych:

- A1 A. Słapik, J. Łuczka, and J. Spiechowicz, *Negative mobility of a Brownian particle: strong damping regime*, Commun. Nonlinear. Sci. Numer. Simul. **55**, 316 (2018).
- A2 A. Słapik, J. Łuczka, P. Hänggi, and J. Spiechowicz, *Tunable mass separation via negative mobility*, Phys. Rev. Lett. **122**, 070602 (2019).
- A3 A. Słapik, J. Łuczka, and J. Spiechowicz, *Temperature-induced tunable particle separation*, Phys. Rev. Appl. **12**, 054002 (2019).
- A4 A. Słapik, and J. Spiechowicz, *Tunable particle separation via deterministic absolute negative mobility*, Sci. Rep. **10**, 16639 (2020).

Praca doktorska składa się z 32 stronicowego wstępu szczegółowo omawiającego zastosowaną metodologię oraz uzyskane wyniki przedstawione w czte-

ul. St. Łojasiewicza 11

PL 30-348 Kraków

tel. +48(12) 664-47-26

+48(12) 664-46-77

e-mail:

sekret@th.if.uj.edu.pl



rech publikacjach A1 – A4. W przewodniku umieszczono 19 rysunków, pochodzących w większości z opublikowanych artykułów. Dodano także nowe, a część z rysunków zmodyfikowano. Wykaz literatury zawiera 74 pozycje bibliograficzne.

Artykuły A1 – A4 poświęcone są badaniu długoczasowych zachowań stochastycznych układów dynamicznych opisanych pełnym równaniem Langevina typu

$$\ddot{x} + \gamma \dot{x} = -U'(x) + a \cos(\omega t) + f + \sqrt{2\gamma D} \xi(t)$$

lub

$$m\ddot{x} + \dot{x} = -U'(x) + a \cos(\omega t) + f + \sqrt{2D} \xi(t),$$

gdzie $\xi(t)$ jest białym szumem Gaussowskim. Stosowana forma bezwymiarowego równania Langevina uzależniona jest od tego, czy głównym obiektem badań jest ujemna ruchliwość czy zastosowanie ujemnej ruchliwości jako sposobu na separację cząstek. Wszystkie publikacje stanowiące rozprawę doktorską są wieloautorskie (wspólnie z promotorem, profesorem Jakubem Spiechowiczem oraz profesorami: Jerzym Łuczka (A1 – A3) oraz Peterem Hänggim (A2)).

Metoda badawcza zastosowana do badania dynamicznych układów stochastycznych jest metodą numeryczną. Stochastyczne równania różniczkowe całkowane są metodą drugiego (słabego) rzędu typu korektor-predyktor zaimplementowaną na procesorach GPU. Dzięki temu uzyskano znaczne skrócenie czasu symulacji w porównaniu do tradycyjnych procesorów CPU. Pozwoliło to na przebadanie pełnej przestrzeni parametrów i identyfikację obszarów w których obserwowana jest ujemna ruchliwość: obszaru w którym $\langle v \rangle$ jest przeciwne do działającej (nieliniowej ze stałą składową) siły. Zastosowane rozwiązania numeryczne opisane są w czwartym rozdziale przewodnika. Omówione są także w załączonych publikacjach. Prowadzone badania są kontynuacją i rozszerzeniem prac promotora.

Równania Langevina badane są w postaci bezwymiarowej. Możliwe przejścia do jednostek bezwymiarowych są szczegółowo przedstawione w części pracy opisującej rozważany model. Niezbędne współczynniki odpowiadające równaniom (7) i (12) zebrane są w tabeli 1 i 2. Przejście do zmiennych bezwymiarowych redukuje liczbą parametrów określających badane modele. Nie mniej jednak, nadal jest ona duża. Sprawia to, że badania (symulacje) są niezwykle numerycznie kosztowne, ponieważ zweryfikowanie występowania ujemnej ruchliwości może zostać przeprowadzone wyłącznie poprzez przeszukiwanie przestrzeni parametrów. Ogólne wskazówki mówią jedynie, że wraz z wzrastającym f (stała siła deterministyczna) oraz D (współczynnik dyfuzji) szanse wystąpienia ujemnej ruchliwości maleją. Z symetrii wynika



także, że wystarczy ograniczyć się do $f > 0$. Badań nie ułatwia fakt, że nawet niewielka zmiana jednego z parametrów może być odpowiedzialna za pojawienie się lub zniknięcie poszukiwanego efektu.

Zdefiniowano (równania (13) i (14)) oraz szczegółowo opisano czym jest ujemna ruchliwość: $\langle v \rangle(f) \propto -f$. Zamieszczony rysunek 1, doskonale pokazuje główne własności układów stochastycznych – zmienność indywidualnych trajektorii, widoczną już dla niewielkich intensywności szumu. Dzięki temu lepiej uzasadniona jest konieczność uśredniania, nie tylko po realizacjach szumu (trajektoriach), ale także po innych parametrach, np. warunkach początkowych. Wytłumaczono także dlaczego ujemna ruchliwość nie łamie zasad dynamiki Newtona oraz drugiej zasady termodynamiki.

Rysunki 3 – 5 pokazują przykładowe mapy w których można zidentyfikować obszary ujemnej ruchliwości, określić wpływ parametrów na wystąpienie poszukiwanego efektu. Ważnym ich uzupełnieniem są wykresy 6 – 7 oraz tabela 3, które przedstawiają pola obszarów z ujemną ruchliwością jako część całkowitego pola w (ograniczonej) przestrzeni parametrów. W szczególności rysunek 6 pokazuje, że pole powierzchni może być niemonotoniczną funkcją masy cząstki. Dodatkowo pokazuje on, że wraz z rosnącym f (Rys. 6(a)) oraz D (Rys. 6(b)) pole powierzchni maleje. Rysunki te pojawiają się w doskonale dobranym miejscu, w miejscu w którym po analizie map 3 – 5 nasuwa się pytanie: Jak powszechny/częsty jest efekt ujemnej ruchliwości? Dodatkowo mapy uzupełniają animowane pliki gif, umieszczone online, dzięki którym można zobaczyć jak zmienia się ruchliwość przy niewielkiej zmianie parametrów.

Rozdział 3.3 dyskutuje pochodzenie zjawiska ujemnej ruchliwości wskazując na trzy możliwe scenariusze prowadzące do niego: (1) deterministyczna dynamika chaotyczna, (2) deterministyczna dynamika niechaotyczna oraz (3) fluktuacje termiczne. Odpowiednio dobrane wykresy pokazują sytuacje odpowiadające poszczególnym scenariuszom prowadzącym do ujemnej ruchliwości.

Autorka zaznacza, że w układach przetłumionych ujemna ruchliwość nie występuje. Wydaje się, że własność ta powiązana jest z faktem, że w układach przetłumionych cząstka jest w pełni scharakteryzowana poprzez swoje położenie. Kwestia ta i jej związek z ujemną ruchliwością mogłaby być szerzej przedyskutowana w przygotowanym przewodniku.

Rozdział 5 dyskutuje możliwość separacji cząstek w oparciu o zjawisko ujemnej ruchliwości. Takie metody pozwoliłyby na separację ze względu na masę lub rozmiar cząstek. Dzięki temu możliwe byłoby rozszerzenie spektrum metod pozwalających na rozdzielanie cząstek.



Praca A2 pokazuje, że w przestrzeni parametrów możliwe jest znalezienie takiej częstości ω , dla której zakres mas dla których występuje ujemna ruchliwość jest bardzo wąski. Z jednej strony pokazuje to analogiczny efekt do widocznego na rysunku 2 — niewielka zmiana parametrów radykalnie zmienia własności układu. Z drugiej strony pozwala to na zwiększenie „rozdzielczości” metod separacji cząstek. Dzięki temu ujemna ruchliwość pozwala na separację cząstek o takich samych rozmiarach, ale różniących się np. masą.

Współczynnik tłumienia powiązany jest z rozmiarem cząsteczek ($\Gamma = 6\pi\eta R$) dlatego ujemna ruchliwość może zostać wykorzystana do rozdzielania cząstek ze względu na ich rozmiar. Rysunek 16 pokazuje obiecujący przypadek, kiedy taka metoda mogłaby zadziałać. Kolejne wykresy (Rys. 17(a) – 17(b)) pokazują, potencjalnie ograniczoną przydatność mechanizmów separacji opartych o zmianę temperatury układu ze względu na ich niewielką selektywność. Jednakże, modyfikacja innych parametrów (Rys. 18) może znacząco podnieść rozdzielczość metod separacji cząstek ze względu na ich rozmiar.

Przewodnik kończą podsumowanie oraz uwagi końcowe w których przedstawiono najważniejsze wyniki oraz istniejące ograniczenia związane z zastosowaniem ujemnej ruchliwości do separacji cząstek.

Rozprawa „Anomalous transport in nonequilibrium systems: From negative mobility to particle separation” w sposób staranny, szczegółowy i czytelny prezentuje uzyskane wyniki. Język pracy jest precyzyjny, a przygotowany tekst dobrze się czyta. W istotnych miejscach Autorka odsyła czytelników do odpowiednich fragmentów oryginalnych prac. Dzięki temu łatwiejsze jest znalezienie interesujących szczegółów. Niestety pisząc rozprawę doktorską Autorce nie udało się uniknąć drobnych potknięć:

- s. 3, 3 linia od dołu, informacja na temat wspomnianego stanu stacjonarnego mogłaby być rozszerzona,
- opis przejścia do zmiennych bezwymiarowych mógłby być rozszerzony w części opisującej transformację szumu,
- w podpisie Rys. 7 jest mowa o $a \in [0, 20]$, podczas gdy Rys. 7(a) pokazuje wyniki dla $a \in [0, 25]$,
- s. 14, akapit „The third mechanism” – mam wrażenie, że jednak chodzi tutaj o drugi z mechanizmów wymienionych na stronie 12,
- informacja na temat diagramów bifurkacyjnych mogłaby zostać rozszerzona, pozwoliłoby to na lepsze zrozumienie czym są odwiedzone punkty i jak mają się one do uśredniania niezbędnego do obliczenia $\langle v \rangle$,
- pożytecznym byłoby umieszczenie pełnej informacji jak zostały wyznaczone wykładniki Lapunowa,



UNIWERSYTET
JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

Instytut

Fizyki Teoretycznej

- Rys. 15(b): podpis i opis umieszczony w tekście wydają się nie być w pełni zgodne lub kompletne,
- bibliografia nie została w pełni zestandaryzowana.

Powyższe uwagi mają charakter techniczny i nie obniżają wysokiej wartości naukowej przedstawionej rozprawy doktorskiej.

3. Podsumowanie

Lektura przygotowanej rozprawy pokazuje, że magister Aleksandra Słapik doskonale opanowała techniki badania dynamicznych układów stochastycznych. Zastosowane metody obliczeniowe pozwalają na przeprowadzenie wnikliwych analiz numerycznych. Przeprowadzone analizy są uzupełnione o szczegółową dyskusję uzyskanych wyników.

Wysoko oceniam działalność naukową Doktorantki. Tematykę prowadzonych badań uważam za interesującą. Zaskakujące i zadziwiające jest to, że w tak koncepcyjnie prostym układzie można zaobserwować tak ogromne bogactwo zachowań. Uważam, iż przedstawiona rozprawa doktorska spełnia z wyraźnym nadstatkiem wszelkie wymagania ustawowe oraz zwyczajowe i uzasadnia dopuszczenie magister Aleksandry Słapik do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Bartłomiej Dybiec

Bartłomiej Dybiec