

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Karola Piotra Capały “Anomalous Stochastic Dynamics in the Underdamped Regime”

Rozprawa doktorska mgr Karola Piotra Capały została przygotowana pod kierunkiem promotora Prof. dr hab. Bartłomieja Dybca, Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie. Rozprawa ta stanowi zbiór sześciu artykułów naukowych, w których doktorant jest pierwszym autorem, wraz z liczącą 38 stron częścią opisową dotyczącą zagadnień rozważanych w tych pracach. Artykuły opublikowane zostały w renomowanych czasopismach naukowych w latach 2019-2021, 4 artykuły opublikowane zostały w czasopiśmie Chaos, po jednym w Physical Review E oraz Journal of Statistical Mechanics.

Autor rozprawy analizuje procesy dyfuzji generowane przez szумы Levy’ego w polach opisywanych potencjałami jedno- i wielodołkowymi, potencjały wyrażone są funkcjami potęgowymi. Procesy te opisane są równaniami Langevina i odpowiadającymi im równaniami Fokkera-Plancka-Smoluchowskiego (FPS) z pochodnymi ułamkowego rzędu. Szczegółowo badane są stany stacjonarne w procesach nieprzetłumionych („underdamped”), jak również przetłumionych („overdamped”), a także procesy ucieczki z określonych obszarów oraz szybkości przejścia przez barierę potencjału w podwójnej studni potencjału. Analizując te procesy wspomniane powyżej równania rozwiązywane są głównie przy zastosowaniu metod numerycznych, w pewnych przypadkach otrzymane zostały rozwiązania analityczne.

Część opisowa rozprawy składa się z czterech rozdziałów. W pierwszym, mającym charakter wstępu, opisane są równania Langevina oraz odpowiadające im równania FPS w reżimach nieprzetłumionym i przetłumionym. Przedstawiona jest numeryczna metoda Eulera-Maruyama generowania trajektorii z równania Langevina przy wykorzystaniu metody Chambersa-Mallowsa-Stucka generowania alfa-

stabilnych gęstości rozkładu zmiennej losowej. Wygenerowane trajektorie mogą posłużyć do wyznaczenia zależnych od czasu gęstości prawdopodobieństw dla stanu dyfundującej cząsteczki.

W rozdziale II opisane są stany stacjonarne, osiągane w granicy nieskończonego czasu. Rozważane są różne wersje potencjału opisywanego przez funkcje potęgowe. Pokazane zostało, że dla potencjału wyrażonego funkcją potęgową czwartego stopnia i dla szumu Cauchy'ego (co jest szczególnym przypadkiem szumu Levy'ego dla $\alpha=1$) rozkład prawdopodobieństwa położenia dyfundującej cząsteczki w stanie stacjonarnym ma dwa maksima przy jednym minimum potencjału. Wykazano, że dla potencjału mającego charakter pojedynczej studni możliwe jest występowanie więcej niż dwóch maksimów w funkcji gęstości prawdopodobieństwa dla procesu stacjonarnego $P(x)$ zależnej od położenia x . W rozważaniach wykorzystany został fakt, że maksima funkcji $P(x)$ są zgodne z maksimami tzw. funkcji zakrzywienia zależnej jedynie od potencjału. Pokazano, że można wyznaczyć symetryczny potencjał o zadanej multimodalności. Dobierając odpowiedni potencjał o charakterze pojedynczej studni potencjału możliwe jest nawet otrzymanie ośmiomodalnego rozkładu $P(x)$. Wyniki te zostały opublikowane w pracy (A.1) K. Capała, B. Dybiec, *Multimodal stationary states in symmetric single-well potentials driven by Cauchy noise*, J. Stat. Mech. 033206 (2019). W rozdziale tym rozważone są także przypadki liniowego i nieliniowego członu tłumienia występującego w równaniu Langevina. W przypadku liniowym zostało pokazane, że w przypadku słabego tłumienia dla potencjału wyrażonego wielomianem czwartego stopnia funkcja $P(x)$ jest jednomodalna podczas gdy dla dużego tłumienia ukazuje się jej charakter bimodalny. Dla rozkładu brzegowego zależnego tylko od prędkości funkcja $P(v)$ ma postać rozkładu Cauchy'ego. Dokonana została także jakościowa analiza procesu pojawienia się bimodalnego stanu wraz ze wzrostem współczynnika tłumienia. Rozpatrzony został również przypadek członu tłumienia nieliniowego względem prędkości. Wyniki badań dotyczących tych zagadnień zostały opublikowane w pracach (A.2) K. Capała, B. Dybiec, *Stationary states for underdamped anharmonic oscillators driven by Cauchy noise*, Chaos **29**, 093113 (2019) oraz (A.3) K. Capała, B. Dybiec, E. Gudowska-Nowak, *Nonlinear friction in underdamped anharmonic stochastic oscillators*, Chaos **30**, 073140 (2020). W pracy (A.2) badano stacjonarne stany oscylatorów anharmonicznych dla szumu Cauchy'ego dla różnych potencjałów, Pokazano, że stany stacjonarne silnie różnią się od rozkładu Boltzmanna-Gibbsa gdy w pojedynczej studni potencjału występują multimodalne stacjonarne stany zależne od tłumienia. Rozważania oparte są na numerycznych rozwiązaniach równania Langevina. Przy dużym tłumieniu w studni potencjału generowany jest multimodalny stacjonarny stan. Pokazano, że stacjonarny stan

w nieprzetłumionym procesie z taką samą liczbą modów jak w przypadku przetłumienia. Dla potencjału parabolicznego stan stacjonarny jest jednomodalny. Prawdopodobieństwo znalezienia cząsteczki w pobliżu minimum potencjału jest wynikiem działania procesów mających nieco przeciwny charakter: siły działającej na cząsteczkę, generowanej przez ujemny gradient potencjału oraz względnie silnego pobudzania ruchu cząsteczki generowanego przez szum Levy'ego. Multimodalne stany stacjonarne w pojedynczej studni potencjału występują, gdy prawdopodobieństwo znalezienia cząsteczki w pobliżu minimum potencjału jest małe. W pracy (A.3) użyte są symulacje komputerowe do badania nieprzetłumionego przypadku transportu cząsteczek w pojedynczej studni potencjału gdy tłumienie jest opisane nieliniową funkcją. Pokazano, że względnie łatwo jest otrzymać multimodalność dla rozkładu prędkości, w przeciwieństwie do podobnych obserwacji multimodalności dla rozkładu przestrzennego. Pokazano także, że dla odpowiednio dobranego nieliniowego tłumienia może pojawić się także multimodalność rozkładu przestrzennego.

W rozdz. III rozważane są problemy związane z czasem pierwszego wyjścia z pewnego obszaru a także anomalna dyfuzja cząsteczki w podwójnej studni potencjału. Odnośnie pierwszego zagadnienia rozważania skupiają się na wyznaczeniu średniego czasu pierwszego wyjścia z pewnego obszaru. W ogólności, średni czas wyjścia jest skończony dla skończonego przedziału. Jednakże w jednostronnie nieskończonym obszarze z dużym gradientem potencjału dążącego do nieskończoności średni czas też może być skończony, bowiem taki potencjał praktycznie ogranicza dostęp do „odległych” części układu. W przypadku układu nieprzetłumionego wyznaczone zostały czasy ucieczki oraz prędkość i energia ucieczki cząsteczki ze skończonego obszaru. Wyniki badań opisane w tym rozdziale zostały opublikowane w artykułach (A.4) K. Capała, B. Dybiec, *Internal Levy flights in bounded domains*, Chaos **31**, 083120 (2021), (A.5) K. Capała, B. Dybiec, E. Gudowska-Nowak, *Peculiarities of escape kinetics in the presence of athermal noises*, Chaos **30**, 013127 (2020), oraz (A.6) K. Capała, B. Dybiec, *Underdamped anomalous kinetics in double-well potentials*, Phys. Rev. E **102**, 052123 (2020). W szczególności, w pracy (A.4) zbadana została kinetyka procesu pierwszego wyjścia z ograniczonego obszaru, czyli prędkość i energia ucieczki z tego obszaru. Pokazana została ich zależność od warunków początkowych i indeksu α charakteryzującego szum Levy'ego. W pracy (A.5) wykazano, że szum Levy'ego generuje proces ucieczki przez barierę potencjału który zależy nie od jej wysokości (tak jak w przypadku szumu Gaussa), ale od szerokości bariery. W artykule (A.6) badane są przejścia przez barierę potencjału w podwójnej studni potencjału. Dla małego szumu Levy'ego współczynniki przejścia dla procesu przetłumionego zależą od szerokości

bariery. Pokazano, że dla procesu nieprzetłumionego współczynniki przejścia zależą zarówno od szerokości potencjału, jak i wysokości bariery. W rozdziale IV znajdują się wnioski końcowe, jak również krótkie rozważania dotyczące możliwości wykorzystania otrzymanych wyników oraz kierunkach dalszych badań.

Rozprawa została przygotowana bardzo starannie. Część opisowa rozprawy dobrze wprowadza czytelnika w podstawy modelowanych procesów, stanowi ona wprowadzenie do lektury dołączonych artykułów naukowych. Metodologia przeprowadzonych badań jest jasno przedstawiona. Autor rozprawy dobrze definiuje zakres prowadzonych badań, które odnoszą się do różnych aspektów dyfuzji anomalnej w studniach potencjału. Wysoko oceniam wyniki tych badań, zwłaszcza dotyczących multimodalności stanów stacjonarnych (w szczególności pokazania możliwości konstrukcji potencjału dla zadanej multimodalności), średniego czasu wyjścia z układu, a także przejścia przez barierę potencjału. W tym ostatnim przypadku szczególnie interesujące jest wykazanie, że współczynniki przejścia dla pewnych procesów zależą nie tylko od wysokości, lecz także od szerokości bariery. W mojej ocenie trudno dopatrzeć się w tej rozprawie słabych punktów. Czytając rozprawę utwierdziłem się w przekonaniu, że badania prowadzone przez doktoranta mogą być rozszerzone i zastosowane do rozwiązania innych problemów dyfuzji anomalnej (co doktorant sugeruje w rozprawie), a zaprezentowane wyniki mogą być wykorzystane w opracowaniu nowych modeli procesów opartych na dyfuzji w studni potencjału i dyfuzyjnych przejściach przez bariery potencjału. W czasie obrony chciałbym poznać pogląd doktoranta na problem jak uwzględnienie potencjałów generujących stany multimodalne zmienia model reakcji chemicznych, zwłaszcza w odniesieniu do „klasycznego” modelu Kramersa.

Podsumowując, stwierdzam, że przedstawiona do recenzji rozprawa doktorska mgr Karola Piotra Capały spełnia ustawowe wymogi stawiane rozprawom doktorskim (zgodnie z Prawem o szkolnictwie wyższym i nauce, Dz. U. z 2020 r. poz. 85 z późn. zm.) i wnioskuję o dopuszczenie doktoranta do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Wnioskuję także o wyróżnienie rozprawy doktorskiej mgr. K. Capały. W mojej ocenie doktorant prowadzi badania naukowe na wysokim poziomie, publikując swe wyniki w renomowanych czasopismach naukowych. Przedstawione wyniki badań są nowe i w części sprzeczne z intuicją, przyczyniają się one

do pogłębienia wiedzy dotyczącej procesów dyfuzji w studniach potencjału. Wyniki te mogą być wykorzystane w modelowaniu różnych procesów dyfuzji anomalnej. Nadmienię, że oprócz wymienionych powyżej sześciu artykułów naukowych (A.1)-(A.6), w których Doktorant jest pierwszym autorem, w spisie literatury umieszczonym w rozprawie można znaleźć siódmy artykuł Doktoranta opublikowany w prestiżowym czasopiśmie naukowym: K. Capała, A. Padash, A. V. Chechkin, B. Shokri, R. Metzler, and B. Dybiec, *Chaos* **30**, 123103 (2020).

Tadeusz Kontusicki