

Kraków, 30 sierpnia 2021



UNIWERSYTET
JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

Institut

Fizyki Teoretycznej

Prof. dr hab. Bartłomiej Dybiec
Instytut Fizyki Teoretycznej
Uniwersytet Jagielloński
bartek@th.if.uj.edu.pl

Recenzja rozprawy doktorskiej mgra inżyniera Michała Łepka „Zjawiska koagulacji w wybranych układach złożonych”.

1. Podstawowe informacje o Doktorancie

Pan Michał Łepka urodził się w roku 1991. Do I Liceum Ogólnokształcącego uczęszczał w Bydgoszczy. W 2010 roku podjął studia inżynierskie na kierunku Fizyka Techniczna ze specjalnością Fizyka Komputerowa na Wydziale Fizyki Politechniki Warszawskiej. W 2014 roku uzyskał tytuł inżyniera, a w 2015 z wyróżnieniem ukończył studia magisterskie na kierunku Fizyka Techniczna ze specjalnością Modelowanie Układów Złożonych na Wydziale Fizyki Politechniki Warszawskiej. Po ukończeniu studiów magisterskich podjął studia doktoranckie w dziedzinie fizyki układów złożonych, ze szczególnym uwzględnieniem sieci neuronowych i procesów agregacji.

Studia doktoranckie łączył z pracą w HealthUp S.A./AioCare jako Software Developer i Specjalista R&D. Był także specjalistą badawczo technicznym w Instytucie Fizyki Plazmy i Laserowej Mikrosyntezy w Warszawie (2014–2015). Odbył staż w Centrum Fizyki Teoretycznej PAN (wrzesień 2013).

Wiodącym motywem badań prowadzonych przez Doktoranta jest badanie zjawisk koagulacji metodami teoretycznymi, które to badania stanowią podstawę pracy doktorskiej. Pozostałe prace dotyczą szeroko rozumianej fizyki medycznej oraz spektroskopii laserowej.

2. Charakterystyka dorobku naukowego

Doktorant jest współautorem 12 prac naukowych spośród których 11 jest indeksowanych w WoS. Cztery prace¹ ([55, 58, 59 (zaakceptowana), 61] stanowią rozprawę doktorską, praca [28] (*Spatial evolution of Hindmarsh-Rose neural network with time delays*) cytowana jest w rozprawie, a pozostałe prace dotyczą szeroko rozumianej tematyki medycznej (4 prace) oraz spektroskopii laserowej (3 prace). Prace te powstały w latach 2014–2021. Według WoS zostały zacytowane 43 razy (40 bez autocytowań). Kody programów użytych do badania zjawisk koagulacji dostępne są online [60].

¹Numeracja według rozprawy doktorskiej.

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

3. Ocena rozprawy doktorskiej

Rozprawa doktorska „Zjawiska koagulacji w wybranych układach złożonych” jest klasyczną rozprawą doktorską omawiającą uzyskane wyniki, które zostały także zaprezentowane w opublikowanych pracach [55, 58, 59, 61] dotyczących badania zjawisk agregacji. Wszystkie publikacje są wieloautorские (wspólnie z promotorem, profesorem Piotrem Fronczakiem oraz profesorem Agatą Fronczak).

Praca doktorska składa się ze streszczenia, pięciu rozdziałów (Wstęp, Podejście kombinatoryczne do układów koagulujących, Analiza i wyniki dla wybranych kerneli, Kernel iloczynowy w podejściu Marcusa-Łusznikowa z uwzględnieniem dowolnych warunków początkowych, Symulacje i zagadnienia numeryczne), podsumowania oraz dwóch dodatków (Wielomiany Bella, Metoda inwersji Lagrange’a) prezentujących ważne informacje techniczne. Całość zamyka bibliografia zawierająca 104 pozycje. Taki układ pracy pozwala na zapoznanie się z tematyką prowadzonych badań, stosowanymi metodami oraz przejrzystą prezentację uzyskanych wyników.

Metoda badawcza zastosowana do badania procesów agregacji jest metodą kombinatoryczną, a jej konstrukcja wywodzi się z fizyki statystycznej bazując na podobieństwie do zespołu mikrokanonicznego. Stąd konieczne jest zliczanie liczby możliwych mikrostanów oraz ścieżek pozwalających na ich osiągnięcie. Zagadnienie to może zostać uproszczone dzięki własnościom wielomianów Bella. Dlatego z jednej strony Autor zastosował podejście kombinatoryczne, które dla wybranych kerneli pozwala na jawne wypisanie formalnych wzorów na interesujące wielkości (np. średnia liczba klastrów danego rozmiaru $\langle n_s \rangle$). Z drugiej strony obliczenie numerycznych wartości odpowiadających znalezionym wzorom samo w sobie jest skomplikowane i numerycznie kosztowne. Alternatywne podejście, podejście numeryczne, polega na bezpośrednim badaniu indywidualnych aktów scażeń w których to forma kernela determinuje prawdopodobieństwa indywidualnych aktów scażeń. Tak uzyskane wyniki można porównać z wynikami metody kombinatorycznej wskazując na jej adekwatność do opisu procesów agregacji.

Agregacja polega na nieodwracalnym łączeniu się mniejszych klastrów w większe. Procesy koagulacji odpowiadają schematowi typu

$$(i) + (j) \xrightarrow{K(i,j)} (i+j), \quad (1)$$

gdzie $K(i, j)$ określa szybkość zachodzenia połączeń klastrów o rozmiarach i oraz j w jeden klaster o rozmiarze $i + j$. Tak powstały klaster nie może się rozpaść. Dlatego stan końcowy stanowi jeden klaster do którego należą wszystkie cząstki (mery) występujące w układzie. Wielkość $K(i, j)$ (potocznie zwana kernelem) określa szybkość zachodzenia procesu agregacji. Autor szczegółowo uzasadnia dlaczego w pracy używa terminu „kernel”. Spowodowane jest to brakiem prostego polskiego odpowiednika.

Zwykle procesy koagulacji opisuje się przy pomocy modeli kinetycznych (np. równanie Smoluchowskiego, podejścia Marcusa-Łusznikowa). Opis



Instytut

Fizyki Teoretycznej

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

zapropozowany w pracy jest schematem kombinatorycznym. Dla takiego opisu kluczowe jest znalezienie liczby możliwych podziałów N monomerów na k klastry (równanie (2.8)) oraz liczby możliwych sekwencji zdarzeń prowadząca do takich podziałów (równanie (2.10)). Równanie (2.8) wraz z równaniem (2.10) pozwala na wyznaczenie prawdopodobieństwa znalezienia układu w określonym stanie. Dzięki znajomości prawdopodobieństwa oraz liczby wewnętrznych stopni swobody wzory (2.14) i (2.15) pozwalają na (formalne) znalezienie rozkładu prawdopodobieństwa w przestrzeni stanów (równanie (2.19)). W kolejnych krokach możliwe staje się (formalne) obliczenie poszukiwanych charakterystyk układu w określonej chwili czasu: średnia liczba klastrów o określonym rozmiarze $\langle n_s \rangle$ (równanie (2.26)) oraz odchylenie standardowe średniej liczby klastrów o określonym rozmiarze (wzór (2.27) w połączeniu ze wzorami (2.35) i (2.19)). Znalezione wzory są dokładnym rozwiązaniem badanego modelu, ale nie dla każdego kernela możliwe jest efektywne zastosowanie otrzymanych formuł. Dzieje się tak dlatego, że nie zawsze – pomimo stosowania formalizmu funkcji tworzących i inwersji Lagrange’a – równanie rekurencyjne na x_g można rozwiązać. Dodatkową trudność w stosowaniu wzorów stanowi konieczność obliczania wartości wielomianów Bella. Nie mniej jednak dla wybranych kerneli znaleziono wyrażenia na średnią liczbę klastrów określonego rozmiaru i ich odchylenie standardowe.

Rozdział drugi szczegółowo omawia stosowane podejście opisane w pracy [54]. Analiza uzyskanych wyników zawarta jest w rozdziale trzecim. Wyniki uzyskane metodami kombinatorycznymi zostały porównane z innymi podejściami analitycznymi oraz z wynikami symulacji komputerowych, wskazując na szeroki zakres zgodności między modelem teoretycznym, a wynikami symulacji. W szczególności: rys. 3.1 wskazuje, że dla kernela stałego ($K = \text{const}$), multiplikatywnego ($K \propto ij$) oraz addytywnego ($K \propto i+j$) Autor uzyskuje pełną zgodność obliczeń kombinatorycznych i symulacji komputerowych, podczas gdy dokładne rozwiązanie dyskretnego równania Smoluchowskiego stanowi tylko przybliżone rozwiązanie modelu kombinatorycznego słuszne dla niewielkich czasów. Następnie przebadano uogólniony kernel elektroreologiczny $K \propto (1/i + 1/j)^\alpha$ (rys. 3.3 i 3.4). Wraz z wzrastającą wartością α zgodność pogarsza się co widać dla większych czasów. Szczególnie warte podkreślenia są wyniki prowadzące do powstania rysunku 3.5, który pokazuje, że zastosowana metoda kombinatoryczna może zostać z powodzeniem użyta do odtworzenia danych eksperymentalnych. Dla kernela kondensacyjnego ($K \propto (A+i)(A+j)$) stopień uzyskanej zgodności zależy od wartości parametru A (rys. 3.7). Przedostatni z rysunków rozdziału trzeciego (rys. 3.8) wskazuje, że dla kombinacji kernela stałego i addytywnego ($K \propto A+i+j$) uzyskano bardzo dobrą zgodność. Porównanie wyników symulacji z obliczeniami kombinatorycznymi wskazuje, że metoda kombinatoryczna może być z powodzeniem stosowana do opisu procesów koagulacji.

Rozdział piąty dyskutuje w jaki sposób można badać zjawiska agregacji przy pomocy symulacji komputerowych. Takie symulacje wymagają, aby



UNIWERSYTET
JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

Instytut

Fizyki Teoretycznej

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

możliwym aktom scalenia przypisać odpowiednie prawdopodobieństwa pozwalające na wybór klastrow, które w danym kroku czasowym połączą się. Takie przypisanie jest szczególnie nietrywialne dla kerneli $K(i, j)$ nieprzyjmujących wartości całkowitych.

Rozdział czwarty rozszerza podejścia Marcusa-Łusznikowa na dowolne warunki początkowe. Wyniki uzyskane dla dowolnych warunków początkowych są porównane z granicą monodispersyjną rozważaną w pracach Łusznikowa. Pokazano także zgodność uzyskanych wyników z przeprowadzonymi symulacjami komputerowymi.

Rozważane kernele scharakteryzowane były dodatkowymi stałymi. Odpowiedni ich dobór pozwala na przejście pomiędzy różnymi rodzajami kerneli (rys. 6.1). Autor w swoich rozważaniach sprawdził, że odpowiednie przejścia graniczne prowadzą do wzorów uzyskiwanych dla granicznych form kerneli. Ten ważny test potwierdza poprawność uzyskanych wzorów.

W model kombinatorycznym oraz odpowiadających mu symulacjach czas jest mierzony liczbą aktów scaleń, a nie w jednostkach fizycznych, np. sekundach. Dlatego czas jest rodzajem procesu zliczającego. Tej kwestii Autor poświęca sporo miejsca w swojej rozprawie i szeroko ją dyskutuje. Z podobną sytuacją mamy do czynienia w procesach subdyfuzyjnych (M. Magdziarz, A. Weron, and K. Weron, Phys. Rev. E **75**, 016708 (2007)). Analogicznie jak w modelu kombinatorycznym czas mierzony liczbą przeskoków, musi zostać „przeliczony” na czas fizyczny poprzez odpowiedni subordynator.

Rozprawa „Zjawiska koagulacji w wybranych układach złożonych” w sposób staranny, szczegółowy i czytelny prezentuje uzyskane wyniki. Język pracy jest precyzyjny, a przygotowany tekst dobrze się czyta. Niestety pisząc rozprawę doktorską Autorowi nie udało się uniknąć drobnych potknięć:

- stwierdzenie „średni rozkład wielkości klastrow” oraz podobne (ss 12, 35, 42, 63) wydają mi się nieprecyzyjne. Mam wrażenie, że Autorowi chodziło o średnią liczbę klastrow danego rozmiaru;
- rysunek 3.1 w opisie powinno pojawić się odniesienie nie tylko do kolorów (odpowiadających różnym czasom), ale także i do rodzaju punktów. Kolejne wykresy nie powielają tego mankamentu;
- omawiając rysunek 3.2 nie umieszczono oczywistej informacji o (pionowej) orientacji pola elektrycznego;
- opis rysunków 3.4, 3.5 i 3.9 jest nie do końca precyzyjny. Mam wrażenie, że w głównej części nie przedstawiają one samego odchylenia standardowego tylko: $\langle n_s \rangle$ oraz $\langle n_s \rangle \pm \sigma_s$;
- rysunki 3.4 i 3.9: w wewnętrznych panelach użyto skali logarytmiczno-liniowej, a nie logarytmicznej;
- funkcja zwikłana czy uwikłana (s. 87);
- równoważność wyników uzyskanych ze wzoru (4.26) i (4.15) została zweryfikowana numerycznie na rysunku 4.1. Czy da się pokazać analitycznie zgodność obu wzorów?
- w rozdziale 5 mogłaby się znaleźć informacja, że po każdym akcie sca-



UNIwersytet
JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

Instytut

Fizyki Teoretycznej

lenia wektory użyte do wyznaczania połączeń muszą zostać zaktualizowane;

- algorytm 1, linia 5: nie umieszczono komentarza dlaczego taka wartość λ pozwala na przeskalowanie czasu mierzonego indywidualnymi aktami scalania na czas fizyczny.

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

Założone podejście zakłada doskonałe przemieszanie klastrów. Dzięki temu połączyć mogą się dwa dowolne klastry bez względu na ich faktyczne położenie fizyczne. W rzeczywistej sytuacji łączące się klastry muszą ze sobą sąsiadować. Dlatego, ze względu na brak struktury przestrzennej, pojawia się pytanie: Czy próbowano badać jakie są konsekwencje założonego doskonałego (pełnego) mieszania?

Autor trafnie komentuje dlaczego podejście Smoluchowskiego do agregacji jest podejściem przybliżonym, nie pisze jednak na czym ono dokładnie polega. W mojej ocenie umieszczenie takiego opisu domknęłoby pracę pokazując w pełni najpopularniejsze sposoby opisu agregacji: równanie Smoluchowskiego, metodę Marcusa-Łusznikowa oraz schemat kombinatoryczny.

4. Podsumowanie

Lektura przygotowanej rozprawy pokazuje, że magister inżynier Michał Łeppek doskonale opanował i rozwinął techniki badania układów koagulujących. Zastosowane metody obliczeniowe pozwalają na przeprowadzenie wnikliwych analiz numerycznych oraz obliczeń teoretycznych. Przeprowadzone analizy są uzupełnione o szczegółową dyskusję uzyskanych wyników. Umiejętności opanowane przez Doktoranta w połączeniu z jego zrozumieniem zjawisk fizycznych i intuicją pozwalają na prowadzenie dalszych owocnych badań w dziedzinie fizyki matematycznej (teoretycznej).

Wysoko oceniam działalność naukową Doktoranta. Tematykę prowadzonych badań uważam za interesującą. Uważam, iż przedstawiona rozprawa doktorska spełnia z wyraźnym naddatkiem wszelkie wymagania ustawowe oraz zwyczajowe i uzasadnia dopuszczenie magistra inżyniera Michała Łepka do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Bartłomiej Dybiec

Bartłomiej Dybiec

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