

prof. dr hab. Andrzej Drzewiński
Instytut Fizyki
Uniwersytet Zielonogórski

Zielona Góra, 2 czerwca 2023 r.

**Recenzja rozprawy doktorskiej mgra Zbigniewa Wojtkowiaka
zatytułowanej „Badanie uporządkowania w obszarze faz mieszanych oraz
oraz weryfikacja nieuniwersalnego zachowania w trójwymiarowym
modelu Ashkina-Tellera”**

Niniejszą recenzję przygotowałem na prośbę Rady Naukowej Dyscyplin Nauki Fizyczne i Astronomia Wydziału Fizyki UAM. Mgr Zbigniew Wojtkowiak swoją rozprawę doktorską wykonał pod kierunkiem dra hab. Grzegorza Musiała, prof. UAM. Rozprawa – mająca formę spójnego tematycznie zbioru artykułów opublikowanych w czasopismach naukowych – dotyczy szczegółowej analizy diagramu fazowego dla trójwymiarowego modelu Ashkina-Tellera (3D AT), a w szczególności obszarów współistnienia oddziaływań ferro- i antyferromagnetycznych. Model ten stanowi dość naturalne uogólnienie modelu Isinga, gdzie – na przykład – dostrajając parametry Hamiltonianu można uzyskać przejścia fazowe pierwszego rodzaju, które mogą być dowolnie słabe. Głównym celem rozprawy było dokładne zbadanie obszaru faz mieszanych w oparciu o wielkoskalowe symulacje Monte Carlo. Zastosowanie różnych wersji symulacji, dopasowane do poszczególnych obszarów diagramu pozwoliło konkluzywnie wyjaśnić kontrowersje dotyczące jego różnych istotnych elementów. Wyniki stanowiące treść niniejszej dysertacji stanowią oryginalny wkład naukowy do fizyki statystycznej oraz teorii magnetyzmu.

Cztery publikacje stanowiące podstawę ocenianej rozprawy doktorskiej ukazały się w czasopismach naukowych o międzynarodowym zasięgu, które są wykazane na liście czasopism MEiN wraz z przypisaną im punktacją: (1) Journal of Magnetism and Magnetic Materials; IF=2,993 i 100 pkt. MEiN; (2) Physica A: Statistical Mechanics and its Applications; IF=3,544 i 70 pkt. MEiN; (3) Computational Methods in Sciences and Technology; IF= – i 20 pkt. MEiN; (4) Journal of Statistical Physics; IF=1,548 i 100 pkt. MEiN. We wszystkich pracach współautorem jest Grzegorz Musiał – promotor pracy doktorskiej, zaś do rozprawy dołączono oświadczenia określające jego wkład. Komentarz do cyklu artykułów stanowi 28 stronicowy maszynopis, gdzie autor w zwięzły sposób przedstawił cele rozprawy, zastosowane metody badań oraz wyniki i wnioski.

W **pierwszej** z prac autor prezentuje i poddaje walidacji samodzielnie przygotowany klastrowy algorytm Monte Carlo, dostosowany do analizy charakteru przejść fazowych, zarówno pierwszego rodzaju, jak i ciągłych, a także punktów trójkrytycznych, który przewyżcza ograniczenia algorytmu Metropolis (tzw. krytyczne spowolnienie). Algorytm, bazujący na idei Ulli

Wolffa, umożliwia ponadto wyznaczenie takich wielkości statystycznych jak ciepło przemiany fazowej, za pomocą histogramu rozkładu energii, niezależnie od metody opartej o kumulanty. W **drugiej** z publikacji, w oparciu o powyższe metody, autor bada – bez wątplenia – najbardziej złożony obszar diagramu fazowego modelu 3D AT, gdzie mamy do czynienia z silnym współzawodnictwem oddziaływań dwu- i cztero-spinowych, a zarazem obecnością kilku punktów trójkrytycznych. Warto podkreślić, że oprócz kumulant Bindera i Challi, autor wykorzystał także kumulanty typu Lee-Kosterlitz oraz histogram energii wewnętrznej, precyzyjnie określając niepewność otrzymanych wyników. Zgodnie z badaniami autora wzdłuż linii przejść pomiędzy punktami trójkrytycznymi A i H (oznaczenia zgodne z przyjętym nazewnictwem), gdzie wcześniejsze prace oparte o symulacje Monte Carlo dopuszczały zachowanie nieuniwersalne, w istocie mamy do czynienia z bardzo szerokim „crossoverem”, gdzie stopniowo maleje wartość ciepła przemiany. Co więcej, na linii rozdziału faz HH' mamy do czynienia z rzadkim współistnieniem przejść fazowych pierwszego rodzaju oraz ciągłego dla różnych parametrów porządku. Tematyka **trzeciej** publikacji poświęcona jest nowej implementacji metody Monte Carlo zaproponowanej w celu uniknięcia problemów związanych z interpretacją wyników dla rejonu przejścia pomiędzy tzw. obszarem faz mieszanych (jeden i tylko jeden parametr porządku związany z jedną z rodzin spinów jest niezerowy) a obszarem paramagnetycznym (wszystkie parametry porządku przyjmują wartość zero) na linii HK' diagramu fazowego modelu 3D AT, gdzie podczas obliczeń pojawiają się duże oscylacje wartości wielkości termodynamicznych. Dzięki formalnemu podziałowi układu na dwie podsieci (uporządkowaną i nieuporządkowaną) oraz przypisaniu do nich spinów (po wykonaniu kroku algorytmu Monte Carlo) w zależności od ich magnetyzacji (te o większej do jednej podsieci – z porządkiem ferromagnetycznym, a pozostałe do drugiej) otrzymane wielkości termodynamiczne zależą już stabilnie od dwuspinowej stałej sprzężenia w Hamiltonianie (druga stała sprzężenia ma wartość ustaloną). Nowe podejście pozwoliło autorowi potwierdzić ciągły charakter przemian wzdłuż linii HK' oraz lepiej wyznaczyć położenie punktów trójkrytycznych K oraz K' . W **czwartej** publikacji stanowiącej rozszerzenie poprzedniej autor poddaje szczegółowej analizie zachowanie układu w pobliżu punktów trójkrytycznych K i K' oraz punktu bifurkacyjnego K_b a także linii pomiędzy K_b a E. Rozważając ostatni przypadek autor pokazał, że podczas analizy układu z kilkoma parametrami porządku celowe jest osobne wyznaczenie ciepła przemiany związanego z różnymi stopniami swobody, a nie tylko ciepła przemiany dla całego układu. Właśnie wzdłuż linii pomiędzy K_b a E mamy do czynienia z sytuacją, kiedy brak jest obecności ciepła przemiany dla całego układu, a mimo to obserwujemy niezerowe ciepła przemiany związane z różnymi parametrami porządku: wzrostowi ciepła przemiany dla jednych stopni swobody po stronie faz mieszanych towarzyszy równy co do wartości spadek tego ciepła dla innych stopni swobody po stronie fazy antyferromagnetycznej.

Analiza przejść fazowych pierwszego rodzaju oraz przejść ciągłych stanowi jeden z podstawowych zakresów zastosowań symulacji numerycznych dotyczących zagadnień z fizyki fazy skondensowanej. W mojej opinii rozprawa mgra Zbigniewa Wojtkowiaka dotycząca właśnie tej tematyki zasługuje na wysoką ocenę pod względem merytorycznym. Po pierwsze, autor – co zostało opisane w komentarzu – właściwie zdiagnozował nieefektywność podejścia Monte Carlo bazującego na algorytmie Metropolis, a następnie skonstruował oraz przetestował algorytm klastrowy oparty na idei Ullega Wolffa. Algorytm ten równie dobrze pracuje dla ciągłych, jak i nieciągłych przejść fazowych modelu 3D AT. Autor uzupełnił swoje podejście zastosowaniem metody histogramów rozkładu energii wewnętrznej, gdzie w obszarze bliskim krytyczności, dla przejść fazowych pierwszego rodzaju, można zaobserwować charakterystyczny histogram z dwoma pikami, zaś dla ciągłego przejściem fazowym widoczny jest tylko pojedynczy pik. Można spodziewać się, że dla słabych przejść fazowych pierwszego stopnia mogą pojawić się dodatkowe problemy z identyfikacją przejścia fazowego oraz wyznaczeniem wartości ciepła przemiany (niezbędne jest przejście do granicy termodynamicznej). Podczas obrony poproszę o przybliżenie tego zagadnienia.

W tym miejscu pragnę odnieść się do informacji podanej w komentarzu, a dotyczącej użycia generatora liczb pseudolosowych dla obliczeń wykonanych w reżimie przetwarzania równoległego. Autor podaje, że w celu uniknięcia korelacji pomiędzy generowanymi liczbami dla równoległych procesów wykorzystywał podczas inicjacji pracy generatora na każdym z węzłów wartość aktualnego czasu oraz numer równoległego procesu. Bez wątplenia jest to właściwy krok, ale może także nasunąć się pytanie: na ile np. numery tych procesów są niezależne (system przydziela je według jakiegoś schematu), a tym samym czy istotnie unikamy skorelowania liczb losowych? Proszę o odpowiedź na to pytanie podczas obrony pracy doktorskiej.

Po drugie autor jako optymalną strategię postępowania podczas obliczeń numerycznych wskazał użycie algorytmu klastrowego w obszarach krytycznych, a algorytmu Metropolis poza nimi. Jak wiadomo w regionie krytycznym algorytm Metropolis jest mniej dokładny, ponieważ ruchy aktualizacyjne oparte na przewrotach pojedynczego spinu nie są już fizycznie istotne w tym regionie. Rozwiązaniem tego problemu jest odwrócenie całych grup skorelowanych spinów w jednym kroku Monte Carlo, a algorytmy odwołujące się do tej zasady nazywane są algorytmami klastrowymi. Ogólnie rzecz biorąc, takie algorytmy najpierw sprawdzają siatkę w poszukiwaniu grup podobnie zorientowanych i skorelowanych spinów, a następnie odwracają je w jednym ruchu. Ponieważ chcemy ograniczyć grupę spinów tylko do tych skorelowanych, a korelacje zależą od temperatury, rozmiar klastra musi zależeć od temperatury. W algorytmie klastrowym Wolffa spin jest dodawany do grupy z prawdopodobieństwem proporcjonalnym do odwrotności temperatury. Proszę, aby podczas obrony autor przedstawił jak został rozwiązany ten problem w przypadku jego

algorytmu.

Po trzecie autor, aby uzyskać wiarygodną ekstrapolację wyników otrzymanych dla układów o skończonych rozmiarach do granicy termodynamicznej, wspierając się zrównoleglonymi wersjami kodów numerycznych, z powodzeniem analizował układy o olbrzymich rozmiarach. W tym miejscu warto przypomnieć, że dla przejść fazowych pierwszego rodzaju długość korelacji jest skończona w obydwu fazach. Proszę, aby podczas obrony autor przybliżył, jaki jest związek tych długości korelacji z wielkościami układów analizowanych w symulacjach.

Po czwarte, nie bez racji, autor nadaje swoim symulacjom miano eksperymentów komputerowych, co wiąże się z tym, że wyliczaniu wartości wielkości termodynamicznych towarzyszy wyznaczanie ich niepewności. Procedura opiera się na obliczaniu (średnio) kilkunastu średnich cząstkowych na bazie (każda) średnio 10^7 kroków Monte Carlo, gdzie tylko – co któryś krok – daje wkład do obliczeń, co pozwala uniknąć korelacji pomiędzy losowanymi konfiguracjami układu.

Komentarz poprzedzający cykl artykułów został przygotowany dobrze z uwzględnieniem podstawowej literatury przedmotu. Z nielicznych błędów pozwolę sobie zauważyć, że wspomniany w tekście pomysłodawca tej wersji algorytmu klastrowego to Ulli Wolff, co we wstępie zostało właściwie zapisane, lecz w kilku innych imię, bądź nazwisko zostało nieco zmienione.

Podsumowując przedstawiona do oceny rozprawa doktorska stanowi oryginalne rozwiązanie problemu badawczego stanowiąc potwierdzenie tego, że autor potrafi samodzielnie prowadzić prace naukowe. W tym miejscu zasadne będzie wspomnieć, że mgr Zbigniew Wojtkowiak jest współautorem czterech innych artykułów naukowych również opublikowanych w uznanych czasopismach o zasięgu międzynarodowym.

Reasumując, stwierdzam, że rozprawa spełnia warunki zgodne z art. 13 ust. 1 Ustawy z dnia 14 marca 2003 roku o stopniach i tytułach naukowych oraz o stopniach i tytułach w zakresie sztuki (tj. Dz.U. z 2017 r. poz.1789) i wnoszę o dopuszczenie mgra Zbigniewa Wojtkowiaka do dalszych etapów postępowania.

Andrzej Dmowski