



Kraków, 25 stycznia 2016

**Recenzja rozprawy habilitacyjnej dr inż. Małgorzaty Krawczyk
p.t. *Struktura i symetrie sieci złożonych***

Przedłożona do recenzji rozprawa habilitacyjna składa się z ośmiu prac opublikowanych w renomowanych czasopismach fizycznych: Physical Review E, Computer Physics Communications, Physics Letters A, Physica A, Physical Journal B, European Physical Journal B, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, Chaos, Solitons and Fractals oraz Journal of Modern Physics C. Pani Krawczyk jest jedynym autorem tych publikacji. Publikacje są spójne tematycznie. Zostały opublikowane w latach 2008-2015. Dotyczą badań układów złożonych. Ich wspólnym mianownikiem jest analiza struktury sieci złożonych i układów statystycznych na sieciach, oraz poszukiwanie w nich symetrii i nieredukowalnych stopni swobody. Łączy je próba uproszczenia opisu poprzez wprowadzenie klas równoważności stanów układu i dokonanie kompresji przestrzeni stanów.

Sieci złożone dostarczają wygodnego języka do opisu układów złożonych. Znajdują zastosowanie w wielu dyscyplinach naukowych. W ostatnich latach są przedmiotem intensywnych badań i zainteresowań fizyków. Jednym z fundamentalnych problemów w tej dziedzinie jest zagadnienie wyszukiwania zwartych grup wierzchołków na grafie reprezentującym daną sieć złożoną. Takie zwarte grupy, w których wierzchołki są znacznie gęściej połączone między sobą niż z pozostałymi wierzchołkami, określa się często terminem – *społeczności* – zapożyczonym z socjologii. Wyszukiwanie społeczności na sieciach jest nie tylko ważnym zagadnieniem teoretycznym, ale też praktycznym. Znajduje zastosowanie w licznych problemach fizycznych, biologicznych, telekomunikacyjnych, socjologicznych, lingwistycznych i wielu innych.

Pod względem matematycznym zagadnienie identyfikacji społeczności na sieciach złożonych jest niezwykle interesujące. Poświęcono mu dużo uwagi zarówno w literaturze matematycznej jak i fizycznej. Posiada ono wiele różnych wersji i sformułowań. Inaczej rozwiązuje się je w przypadku, gdy znana jest liczba społeczności, albo ich typowy rozmiar, a inaczej, gdy zadane są jedynie ogólne ograniczenia. Metody rozwiązania opierają się zazwyczaj na wprowadzeniu skalarnych miar modularności, które pozwalają kwantyfikować jakość podziału grafu na społeczności. Za najlepszy podział uważa się taki, który maksymalizuje daną miarę. W praktyce używa się algorytmów do przeczyszczenia zbioru możliwych podziałów na społeczności i wyszukiwania wśród nich podziału maksymalizującego miarę modularności. Problem jest NP-zupełny, dlatego często stosuje się algorytmy, które dostarczają przybliżonego rozwiązania. Wiele z nich, jak na przykład metoda wyzarcia, ma swoje korzenie w problemach fizycznych. W swojej rozprawie habilitacyjnej

pani Krawczyk zaproponowała nowatorski algorytm działający w oparciu o heurystykę wywodzącą się z rozważań nad równowagą Heidera. Algorytm opisywany jest przez nieliniowe równanie ewolucji dla uogólnionej macierzy połączeń grafu reprezentującego daną sieć złożoną. Elementy tej macierzy przyjmują ciągłe wartości na przedziale $[0,1]$, odzwierciedlające siłę wiązania pomiędzy węzłami grafu. Dynamika algorytmu zadana jest przez zwyczajne równania różniczkowe pierwszego rzędu. W trakcie ewolucji niektóre elementy macierzy maleją do zera, prowadząc do wyzerowania wiązań i usunięcia połączeń pomiędzy wierzchołkami. Na podstawie mapy usuniętych i osłabionych połączeń ustala się granice pomiędzy społecznościami. Dynamika ma jeden parametr kontrolny, który jest dobierany empirycznie.

Metoda została opisana przez habilitantkę w artykule *Differential equations as a tool for community identification*, Physical Review E 77 (2008) 065701(R), wchodzącym w skład rozprawy habilitacyjnej. Działanie i wydajność algorytmu zostały przetestowane na przykładowych sieciach próbnych o znanym podziale na społeczności. W pracy wykonano studium porównawcze z innymi algorytmami stosowanymi w tym zagadnieniu. Sprawdzono stabilność rozwiązań ze względu na losowe zaburzenia elementów macierzy połączeń. Przedstawione wyniki pokazują, że algorytm pani Krawczyk posiada dużą skuteczność i odporność na stochastyczne perturbacje sieci. Algorytm został porównany do algorytmu zaproponowanego przez M.E.J. Newmana i M. Girvana w pracy *Finding and evaluating community structure in networks*, Physical Review E 69 (2004) 026113, będącego jednym z najbardziej znanych algorytmów w tej dziedzinie. Testy przeprowadzone na próbie statystycznej pokazują, że w wielu przypadkach metoda habilitantki działa lepiej niż algorytm Newmana, Girvana i jest odporniejsza na większe zaburzenia.

Wyszukiwanie społeczności na sieciach było również tematem kolejnego artykułu wchodzącego w skład rozprawy habilitacyjnej: *Application of the differential equations method for identifying communities in sparse networks*, Computer Physics Communications 181 (2010) 1702, w którym zastosowano wcześniej opisaną metodę do grafów rozrzedzonych o skończonej liczbie koordynacyjnej. Podobnie jak w przypadku grafów gęstych również i tutaj algorytm habilitantki zachowuje swoją wysoką skuteczność w odnajdywaniu społeczności na grafie. Przedstawione testy porównawcze pokazują, że statystyczna zdolność poprawnego odtwarzania społeczności jest porównywalna albo lepsza niż dla innych algorytmów, które oparte są na zachłannej optymalizacji modularności, takich jak wspomniany wcześniej algorytm M.E.J. Newmana, M. Girvana albo inny popularny algorytm J. Duchy i A. Arenasa.

Drugą ideą, którą dr Krawczyk rozwijała w swojej rozprawie habilitacyjnej, była koncepcja redukcji liczby stopni swobody sieci złożonej poprzez wyodrębnienie klas równoważności wierzchołków o identycznym otoczeniu topologicznym. Habilitantka zademonstrowała w cyklu prac, jak można ideę kompresji przestrzeni stanów stosować do uproszczenia opisu szeregu zagadnień fizycznych. Między innymi zastosowała ją do analizy przestrzeni stanów klasycznych układów spinowych i stanów konformacyjnych łańcuchów polimerowych, do klasyfikacji automatów komórkowych i analizy struktur fraktalnych oraz do redukcji

przestrzeni stanów w jednowymiarowym modelu Hubbarda.

Koncepcja kompresji przestrzeni stanów wyrosła z badań dr Krawczyk nad złożonością stanu podstawowego w antyferromagnetycznych modelach Isinga i Potts'a na siatce trójkątnej i innych niskowymiarowych siatkach, dla których sprzężenie antyferromagnetyczne wprowadza frustrację. Stan podstawowy w takich układach posiada degenerację, której stopień rośnie z rozmiarem systemu. To właśnie badania degeneracji stanu podstawowego przedstawione w artykule *Topology of the space of periodic ground states in the antiferromagnetic Ising and Potts models in selected spatial structures*, Physics Letters A 374 (2010) 2510, doprowadziły habilitantkę do koncepcji klas równoważności stanów. Przestrzeń stanów modelu Isinga można reprezentować jako N -wymiarową hiper-kostkę boole'owską. Wierzchołki tej kostki reprezentują stany układu, a krawędzie - przejścia jednospinowe. Dla q -stanowego modelu Potts'a kostkę boole'owską należy zastąpić kostką $(Z_q)^N$. Każdemu wierzchołkowi kostki można przypisać energię stanu. Wierzchołki o najniższej energii reprezentują stany podstawowe. Na podstawie listy stanów podstawowych można stworzyć graf, będący indukowanym podgrafem kostki, który zawiera jedynie wierzchołki odpowiadające tym stanom. Analizując związek pomiędzy symetrią tak otrzymanego grafu a symetrią konfiguracji spinowych, pani Krawczyk wprowadziła klasyfikację stanów podstawowych w oparciu o kształt otoczenia topologicznego wierzchołków na tym grafie. Ideę tę rozwinęła w pracy *Symmetry induced compression of discrete phase space*, Physica A 390 (2011) 2181, w której nie tylko dokładnie przeanalizowała układy spinowe i wyliczyła dla nich stopień kompresji przestrzeni stanów dzięki zastosowaniu tej metody, ale również pokazała, że można ją z powodzeniem uogólnić na szerszą klasę dyskretnych układów statystycznych poprzez rekonstrukcję sieci stanów i wyodrębnienie na niej klas równoważności wierzchołków.

Konkretne zastosowanie metody zostało przedstawione w artykule *Static and dynamic properties of discrete systems with compressed state space; A polymer chain as an example*, European Physical Journal B 86 (2013) 246, w którym habilitantka wykorzystała ją do klasyfikacji stanów konformacyjnych molekuly polimerowej w dyskretnym modelu reptonowym na regularnej siatce kwadratowej. Idea, jak poprzednio, polega na analizie sieci stanów. Krawędzie tej sieci odpowiadają w tym przypadku przemieszczeniom pojedynczych reptonów. Dla małych molekuł, składających się z kilkunastu reptonów, można przeglądać pełną listę stanów i na tej podstawie dokładnie odtworzyć sieć stanów, a następnie dokonać kompresji przestrzeni stanów. Metodę tę zastosowano w pracy nie tylko do analizy statycznych własności modelu, ale również do analizy własności dynamicznych. W szczególności przeanalizowano charakter ruchu cząsteczki, dynamikę dochodzenia do pułapkowych stanów konformacyjnych i dynamikę wychodzenia z tych stanów, dla molekuł zawieszonych w ośrodku żelowym, w zależności od długości cząsteczki, wartości zewnętrznego pola elektrycznego i własności ośrodka. Jest to ważne zagadnienie, które znajduje zastosowanie między innymi w elektroforezie.

W kolejnym artykule wchodzącym w skład rozprawy habilitacyjnej: *Symmetry-driven compression of the set of states of a Hubbard ring*, Journal of Magnetism and Magnetic

Materials, 349 (2014) 63, metoda została zastosowana do klasyfikacji stanów modelu Hubbarda na jednowymiarowym cyklicznym łańcuchu. Przez stan układu rozumie się tutaj listę obsadzeń elektronowych węzłów łańcucha zredukowaną poprzez wydzielenie symetrii translacyjnej układu. W definicji stanu rozróżnia się spiny elektronów. Sieć stanów tworzy się reprezentując stany układu przez wierzchołki sieci, a pojedyncze przejścia przez krawędzie sieci. Pojedyncze przejście polega na zmianie spinu pojedynczego elektronu w obrębie węzła, albo na przeniesieniu elektronu bez zmiany spinu na sąsiedni węzeł. W związku z tym można wyróżnić dwa typy krawędzi na sieci stanów. W artykule zostały przeanalizowane własności tak otrzymanych sieci dla małych systemów o rozmiarach - do dwunastu węzłów. Przedyskutowano efektywność kompresji stanów dzięki wprowadzeniu klas równoważności wierzchołków opartych o symetrie otoczenia topologicznego na grafie stanów i symetrii układu.

Wchodzący w skład rozprawy artykuł *New aspects of symmetry of elementary cellular automata*, Chaos, Solitons and Fractals 78 (2015) 86, dotyczy klasyfikacji jednowymiarowych dwustanowych automatów komórkowych z lokalną regułą wyboru zależną od stanu węzła i jego najbliższych sąsiadów. W najprostszej klasyfikacji można wyróżnić $256 = 2^8$ automatów, ponieważ tyle jest różnych reguł wyboru, które ośmiu stanom pochodzącym od trzech bitów przyporządkowują jeden z dwóch stanów bitu wyjściowego. Po wykorzystaniu symetrii wynikających z operacji sprzężenia i odbicia można zredukować liczbę automatów do 88 klas. W swojej pracy dr Krawczyk zaproponowała klasyfikację opartą na analizie symetrii grafu stanów. Wierzchołki grafu odpowiadają stanom, czyli sekwencjom bitów, a krawędzie - transformacjom, które przeprowadzają pomiędzy stanami zgodnie z regułami wyboru. Za pomocą lokalnych symetrii na tym grafie można zredukować liczbę stanów poprzez wprowadzenie klas równoważności. Okazuje się, że liczba stanów równoważnych, czyli stopień kompresji, zależy od rozmiaru systemu. Przyjmując zależność zredukowanej liczby stanów od wielkości automatu jako sygnaturę danego automatu, można podzielić automaty na klasy. Przeprowadzona w pracy analiza automatów na siatkach o rozmiarach do 24 wierzchołków pokazała, że jeżeli dwa różne automaty należą do jednej z 88 klas podstawowych, to posiadają też identyczne sygnatury. Istnieją jednak automaty należące do różnych klas, które mimo to mają identyczne sygnatury. W badanym zakresie jest 80 różnych sygnatur, czyli o osiem mniej niż w oryginalnej klasyfikacji. Na tej podstawie sformułowano hipotezę, że istnieją symetrie, które nie zostały uwzględnione w oryginalnej klasyfikacji automatów, a które pozwalają zredukować liczbę różnych klas.

Praca *Communities and classes in symmetric fractals*, International Journal of Modern Physics C 26 (2015) 1550025, jest kolejnym interesującym przykładem zastosowań metody klasyfikacji stanów i metody znajdowania społeczności na grafach. W pracy użyto ich do opisu struktur fraktalnych takich jak trójkąt Sierpińskiego czy krzywa Kocha.

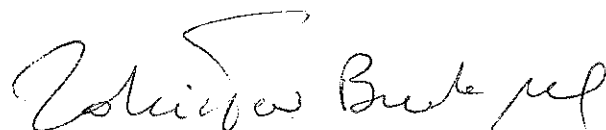
Podsumowując, uważam, że rozwinięte w rozprawie habilitacyjnej metody służące do badania układów złożonych stanowią bardzo ciekawy wkład do dziedziny. Zaproponowany algorytm do identyfikacji społeczności na grafach jest nowatorski. Jego efektywność, rozumiana jako skuteczność odnajdywania wyjściowego podziału grafu na społeczności w obec-

ności zewnętrznego zaburzenia, jest porównywalna, a w niektórych przypadkach lepsza niż efektywność innych algorytmów powszechnie używanych w tej dziedzinie. Sformułowana przez dr Krawczyk metoda kompresji przestrzeni stanów za pomocą klasyfikacji otoczeń topologicznych wierzchołków na inherentnej sieci stanów jest również bardzo oryginalna i praktyczna. Jak pokazały przeanalizowane w rozprawie liczne przykłady, znajduje ona zastosowanie w szerokim spektrum zagadnień fizycznych, rozciągającym się od analizy złożoności stanu podstawowego w sfrustrowanych układach spinowych, poprzez analizę stanów konformacyjnych w dyskretnym modelu polimerów, do klasyfikacji automatów komórkowych i struktur fraktalnych.

Rozprawa habilitacyjna, to jedynie ułamek dorobku naukowego pani dr Krawczyk, który oprócz artykułów wchodzących w skład rozprawy, obejmuje około trzydziestu prac o dużym zróżnicowaniu tematycznym: od fizyki statystycznej i teorii układów złożonych do interdyscyplinarnych zastosowań metod fizyki. Większość z nich została opublikowana po doktoracie. Prace dotyczą: polimerów, elektroforezy, dyfuzji, ekspresji genów, modeli spinowych, sieci złożonych, symulacji ruchu drogowego, sieci społecznych i modelowania zjawisk socjologicznych. Wyniki tych prac zostały opublikowane w czasopiśmie o zasięgu międzynarodowym. Habilitantka prezentowała je na licznych konferencjach międzynarodowych w postaci plakatów i referatów. Osiągnięcia naukowe dr Krawczyk były wielokrotnie wyróżniane Nagrodami Rektora AGH: dwukrotnie indywidualnymi i sześciokrotnie zespołowymi.

Warto też nadmienić, że habilitantka recenzowała artykuły dla *Physics Letters A*, *Physica A*, *European Physical Journal B*, *Modern Physics Letters B* i była członkiem komitetów organizacyjnych kilku międzynarodowych konferencji. Prowadzi aktywną działalność organizacyjną na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH, gdzie między innymi od dziesięciu lat współorganizuje seminarium wydziałowe i seminarium Zespołu Układów Złożonych. Jest doświadczonym dydaktykiem i wykładowcą. Prowadziła kilka wykładów dla studentów, między innymi z podstaw informatyki i języków programowania. Była promotorem sześciu prac magisterskich. Kilka razy miałem okazję wysłuchać jej referatów i bardzo wysoko je oceniam.

Konkludując, uważam, że rozprawa habilitacyjna oraz dorobek naukowy dr inż. Małgorzaty Krawczyk spełniają kryteria określone w ustawie *o stopniach naukowych i tytułach naukowych oraz o stopniach i tytułach w zakresie sztuki*. W związku z powyższym wnoszę o dopuszczenie pani dr inż. Małgorzaty Krawczyk do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.



Zdzisław Burda

