

Struktura i symetrie sieci złożonych

dr inż. Małgorzata J. Krawczyk

Spis treści

I	Autoreferat	1
A	Imię i Nazwisko	1
B	Posiadane dyplomy, stopnie naukowe	1
C	Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych	1
D	Wskazanie osiągnięcia naukowego stanowiącego podstawę postępowania habilitacyjnego	2
D.1	Tytuł osiągnięcia naukowego	2
D.2	Publikacje wchodzące w skład osiągnięcia naukowego	2
E	Omówienie celu naukowego ww. prac i osiągniętych wyników wraz z omówieniem ich ewentualnego wykorzystania	3
E.1	Wprowadzenie	3
E.1.1	Znajdowanie społeczności w sieciach	3
E.1.2	Symetrie sieci	4
E.2	Szczegółowe omówienie prac (a-h) będących podstawą wniosku o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego	7
E.3	Podsumowanie	23
F	Omówienie pozostałych osiągnięć naukowo - badawczych	25
F.1	Przed uzyskaniem stopnia doktora	25
F.2	Po uzyskaniu stopnia doktora	26
II	Wykaz opublikowanych prac naukowych lub twórczych prac zawodowych oraz informacja o osiągnięciach dydaktycznych, współpracy naukowej i popularyzacji nauki	34
G	Publikacje wchodzące w skład osiągnięcia naukowego	34
H	Wykaz innych (nie wchodzących w skład osiągnięcia wymienionego w pkt D) opublikowanych prac naukowych oraz wskaźniki dokonań naukowych	35

H.1	Publikacje naukowe w czasopismach znajdujących się w bazie Journal Citation Reports (JCR)	35
H.2	Wynalazki oraz wzory użytkowe i przemysłowe, które uzyskały ochronę i zostały wystawione na międzynarodowych lub krajowych wystawach lub targach	39
H.3	Monografie, publikacje naukowe w czasopismach międzynarodowych lub krajowych innych niż znajdujące się w bazie JCR	39
H.4	Opracowania zbiorowe, katalogi zbiorów, dokumentacja prac badawczych, ekspertyz, utworów i dzieł artystycznych	40
H.5	Sumaryczny impact factor według listy Journal Citation Reports (JCR), zgodnie z rokiem opublikowania:	40
H.6	Liczba cytowań publikacji według bazy Web of Science (WoS): . . .	40
H.7	Indeks Hirscha według bazy Web of Science (WoS):	40
H.8	Kierowanie międzynarodowymi i krajowymi projektami badawczymi oraz udział w takich projektach	40
H.9	Międzynarodowe i krajowe nagrody za działalność naukową albo artystyczną	40
H.10	Wygłoszenie referatów na międzynarodowych i krajowych konferencjach tematycznych	41
I	Dorobek dydaktyczny i popularyzatorski oraz informacja o współpracy międzynarodowej habilitanta	42
I.1	Uczestnictwo w programach europejskich oraz innych programach międzynarodowych i krajowych	42
I.2	Aktywny udział w międzynarodowych i krajowych konferencjach naukowych	42
I.3	Udział w komitetach organizacyjnych międzynarodowych i krajowych konferencji naukowych	44
I.4	Otrzymane nagrody i wyróżnienia inne niż wymienione w pkt H.9 .	44
I.5	Udział w konsorcjach i sieciach badawczych	44
I.6	Kierowanie projektami realizowanymi we współpracy z naukowcami z innych ośrodków polskich i zagranicznych oraz we współpracy z przedsiębiorcami, innymi niż wymienione w pkt H.8	45
I.7	Udział w komitetach redakcyjnych i radach naukowych czasopism .	45
I.8	Członkostwo w międzynarodowych i krajowych organizacjach oraz towarzystwach naukowych	45
I.9	Osiągnięcia dydaktyczne i w zakresie popularyzacji nauki lub sztuki	45
I.10	Opieka naukowa nad studentami i lekarzami w toku specjalizacji . .	46
I.11	Opieka naukowa nad doktorantami w charakterze opiekuna naukowego lub promotora pomocniczego	46

I.12	Stáže w zagranicznych i krajowych ośrodkach naukowych lub akademickich	46
I.13	Wykonane ekspertyzy lub inne opracowania na zamówienie	46
I.14	Udział w zespołach eksperckich i konkursowych	47
I.15	Recenzowanie projektów międzynarodowych i krajowych	47
I.16	Recenzowanie publikacji w czasopismach międzynarodowych i krajowych	47
I.17	Inne osiągnięcia, nie wymienione w pkt I.1-I.16	47

I Autoreferat

A Imię i Nazwisko

Małgorzata Krawczyk

B Posiadane dyplomy, stopnie naukowe

Stopień naukowy doktora nauk fizycznych w zakresie fizyki, specjalność: fizyka ciała stałego nadany 27 października 2003 roku uchwałą Rady Wydziału Fizyki i Techniki Jądrowej Akademii Górniczo-Hutniczej

Tytuł magistra inżyniera fizyki technicznej, specjalność: fizyka medyczna, uzyskany 22 czerwca 1999 na Wydziale Fizyki i Techniki Jądrowej Akademii Górniczo-Hutniczej

C Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych

- od 1.10.2005 adiunkt na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH
- 1.10.2003 - 30.09.2005 asystent na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH (do 2004 pod nazwą Wydział Fizyki i Techniki Jądrowej)
- 1.10.1999-30.09.2003 studia doktoranckie na Wydziale Fizyki i Techniki Jądrowej AGH

D Wskazanie osiągnięcia naukowego stanowiącego podstawę postępowania habilitacyjnego

D.1 Tytuł osiągnięcia naukowego

Jako osiągnięcie naukowe w rozumieniu art. 16 ust. 2 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. nr 65, poz. 595 ze zm.) przedstawiam cykl publikacji pod wspólnym tytułem:

Struktura i symetrie sieci złożonych

D.2 Publikacje wchodzące w skład osiągnięcia naukowego

- a. Krawczyk M.J., "Differential equations as a tool for community identification", *Physical Review E* 77 (2008) 065701(R), IF: 2.508
- b. Krawczyk M.J., "Application of the differential equations method for identifying communities in sparse networks", *Computer Physics Communications* 181 (2010) 1702, IF: 2.3
- c. Krawczyk M.J., "Topology of the space of periodic ground states in the anti-ferromagnetic Ising and Potts models in selected spatial structures", *Physics Letters A* 374 (2010) 2510, IF: 1.963
- d. Krawczyk M.J., "Symmetry induced compression of discrete phase space", *Physica A* 390 (2011) 2181, IF: 1.373
- e. Krawczyk M.J., "Static and dynamic properties of discrete systems with compressed state space; A polymer chain as an example", *The European Physical Journal B* 86 (2013) 246, IF: 1.463
- f. Krawczyk M.J., "Symmetry-driven compression of the set of states of a Hubbard ring", *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 349 (2014) 63, IF: 2.002
- g. Krawczyk M.J., "New aspects of symmetry of elementary cellular automata", *Chaos, Solitons and Fractals* 78 (2015) 86, IF: 1.448
- h. Krawczyk M.J., "Communities and classes in symmetric fractals", *International Journal of Modern Physics C* 26 (2015) 1550025, IF: 1.125

Całkowity *impact factor* ww. prac wynosi: 14.182

E Omówienie celu naukowego ww. prac i osiągniętych wyników wraz z omówieniem ich ewentualnego wykorzystania

E.1 Wprowadzenie

W swojej pracy naukowej zajmuję się zagadnieniami związanymi z badaniem struktury i własności sieci złożonych. W początkowym okresie moich badań zajmowałam się problemem znajdowania społeczności (ang. *communities*) w sieciach, a w późniejszym skoncentrowałam się na analizie symetrii sieci.

E.1.1 Znajdowanie społeczności w sieciach

Zagadnienie znajdowania społeczności w sieciach znajduje zastosowanie w wielu dziedzinach, takich jak np. biologia, socjologia czy ekonomia, gdzie istnienie społeczności odzwierciedla rzeczywistą strukturę sieci. Poprawne wskazanie społeczności nie jest zagadnieniem trywialnym, ze względu na brak formalnej definicji, zaszumienie danych rzeczywistych oraz złożoność obliczeniową. Przyjęto, że przez społeczność rozumiany jest zbiór węzłów, które są silniej powiązane pomiędzy sobą niż z pozostałymi węzłami sieci [1,2]. Zaproponowana przez nas [3–5] metoda znajdowania społeczności opiera się na ewolucji elementów macierzy połączeń zgodnie z równaniem:

$$\frac{dA_{ij}}{dt} = G(A_{ij}) \sum_{k \neq i, j} (A_{ik}A_{kj} - \beta) \quad (1)$$

gdzie: A_{ij} jest elementem macierzy połączeń, $G(x) = \Theta(x)\Theta(1-x)$ funkcją gwarantującą, że wartość elementu macierzy połączeń mieści się w zadanym zakresie $[0, 1]$ a β jest parametrem stanowiącym granicę statystycznej istotności wartości iloczynu dwóch wag wiązań pomiędzy węzłami.

Zaproponowany formalizm znajdowania społeczności wywodzi się z koncepcji zastosowania równań różniczkowych do analizy równowagi Heidera zaprezentowanej w pracy [6]. Pokazano tam, że ewolucja macierzy połączeń, w której wagi wiązań mogą być dodatnie lub ujemne, prowadzi w stanie ustalonym do podziału na dwie grupy. W pracy [7] pokazano, że zaproponowana metoda analizy układów społecznych dla dowolnych warunków początkowych prowadzi do jednoznacznego podziału, co nie zawsze było możliwe dla wcześniej stosowanych modeli. Jednak specyfiką zagadnienia Heidera było, że ścieżka poprzez kolejne dwa wiązania między społecznościami wzmacniała połączenie wewnątrz społeczności. W równaniach (1) ten efekt nie jest obecny, co pozwala otrzymać więcej niż dwie społeczności. Zastosowanie równania (1) do macierzy połączeń skutkuje zmianą wartości wag poszczególnych wiązań w czasie. Wartości części z nich będą malały a innych będą

rosły, umożliwiając tym samym wyodrębnienie statystycznie istotnych wiązań spośród wszystkich wiązań w sieci. W rezultacie podczas ewolucji macierzy połączeń sukcesywnie otrzymywane są różne podziały węzłów na społeczności. Zerowanie wartości części wiązań powoduje, że otrzymujemy grupy węzłów powiązanych pomiędzy sobą przy braku wiązań pomiędzy różnymi grupami. Pozostaje oczywiście pytanie, który z otrzymanych podziałów odpowiada rzeczywistej strukturze analizowanej sieci. Odpowiedź na to pytanie uzyskujemy poprzez obliczenie dla każdego otrzymanego podziału wartości modularności (ang. *modularity*) [1, 8], która to wielkość zdefiniowana jest wzorem:

$$Q = \frac{1}{m} \sum_{ij} \left[w_{ij} - \frac{k_i k_j}{m} \right] \delta(c_i, c_j)$$

gdzie: w_{ij} jest wagą połączenia pomiędzy węzłami i i j , przy czym $w_{ij} \in [0, 1]$, $k_i = \sum_j w_{ij}$ jest ważonym stopniem węzła, $m = \sum_{ij} w_{ij}$ oraz

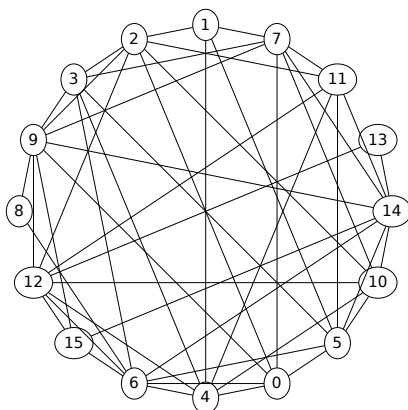
$$\delta(c_i, c_j) = \begin{cases} 1, & \text{jeżeli } i \text{ i } j \text{ należą do tej samej społeczności,} \\ 0 & \text{w przeciwnym przypadku.} \end{cases}$$

Wartość modularności jest bliska zeru dla macierzy przypadkowych i przyjmuje wartości istotnie różne od zera w przypadku sieci o strukturze innej niż losowa. Biorąc to pod uwagę akceptujemy ten spośród podziałów otrzymanych w czasie ewolucji macierzy połączeń, dla którego wartość modularności jest maksymalna. Należy pamiętać o tym, że wartość modularności musi odnosić się do analizowanej sieci, dlatego też jest ona obliczana dla oryginalnej macierzy połączeń i aktualnego podziału sieci. Otrzymany podział odzwierciedla strukturę społeczności występującą w danej sieci. Warto w tym miejscu wspomnieć, że zależność modularności od kolejno otrzymywanych podziałów nie jest monotoniczna.

E.1.2 Symetrie sieci

Problemem, który pojawia się często podczas badań sieci złożonych jest ich duży rozmiar, który powoduje trudności obliczeniowe związane zarówno z pamięcią komputerów, jak i czasem obliczeń. Dlatego też, w kolejnym etapie badań skoncentrowałam się na analizie symetrii sieci, która umożliwia wskazanie węzłów podobnych pod względem ich topologicznych otoczeń w sieci, pozwalając na reprezentację układu poprzez klasy węzłów [11–17]. Klasa węzła określona jest poprzez jego stopień (wchodzący i wychodzący) oraz poprzez klasy sąsiadów danego węzła. Przez stopień węzła rozumiana jest liczba innych węzłów w sieci, z którymi powiązany jest dany węzeł, przy czym w przypadku grafu skierowanego rozróżniany jest stopień pochodzący od wiązań wchodzących do danego węzła oraz z niego

wychodzących. Jeżeli analizowany graf jest grafem ważonym, przy określeniu klas węzłów konieczne jest dodatkowo uwzględnienie wag poszczególnych wiązań. Nieco podobny formalizm zaproponowany został w [18], gdzie jednak równoważność węzłów może dotyczyć różnych relacji węzłów pomiędzy sobą, a nie symetrii sieci. Algorytm wyznaczania klas przebiega następująco: w pierwszym kroku tworzymy dla każdego węzła listy jego najbliższych sąsiadów. W ogólnym przypadku tworzymy dwie listy: listę sąsiadów dla wiązań wchodzących oraz listę sąsiadów dla wiązań wychodzących. W przypadku, gdy graf jest nieskierowany listy te są tożsame. Jeżeli graf jest grafem ważonym, listy te oprócz numerów węzłów zawierają także wagi poszczególnych wiązań. Węzły oznaczamy różnymi symbolami w zależności od długości list i wag w poszczególnych listach. Następnie numery w listach sąsiadów zastępowane są przypisanymi właśnie symbolami. Jeżeli symbole w listach sąsiedztwa węzłów oznaczonych takim samym symbolem nie są jednakowe, wprowadzamy ich dalsze rozróżnienie. Postępujemy tak, aż do momentu uzyskania zgodności list sąsiedztwa dla wszystkich węzłów oznaczonych danym symbolem. Na końcu, każdemu węzłowi przypisana jest określona klasa. Podsumowując, klasa zdefiniowana jest jako zbiór węzłów, które mają taką samą liczbę sąsiadów, którzy należą do tych samych klas.



Rysunek 1: Przykładowy graf nieskierowany i nieważony.

A oto przykład zastosowania tej procedury. Dla grafu nieskierowanego i nieważonego przedstawionego na Rys.1, procedura wyznaczania klas węzłów zaprezentowana jest w Tab.1. Dla każdego węzła określamy jego stopień k , a następnie węzłom o takim samym stopniu przypisujemy taki sam symbol (trzecia kolumna w Tab.1). Kolejno tworzymy listę sąsiadów każdego z węzłów, gdzie w miejsce numeru węzła wstawiamy przypisany mu symbol (czwarta kolumna w Tab.1). Po pierwszym kroku wyznaczenia klas widać, że listy sąsiadów dla węzłów oznaczo-

nym danym symbolem są jednakowe z wyjątkiem węzłów oznaczonych symbolem B . W jednym przypadku sąsiedzi węzła oznaczonego symbolem B są oznaczeni symbolem D (drugi wiersz w Tab.1), a w drugim (ostatni wiersz) - symbolem E . Pociąga to za sobą konieczność dalszego rozróżnienia węzłów oznaczonych symbolem B . W Tab.1 jest to teraz widoczne w DRUGIEJ ITERACJI, gdzie do każdego symbolu dodano cyfrę: do symbolu B dodano dwie różne cyfry w celu ich rozróżnienia, dla pozostałych jedną. W analizowanym przypadku jest to już wystarczające dla uzyskania informacji o klasach węzłów w zadanej sieci. Stwierdzamy, że oryginalny układ składający się z 16 węzłów można zredukować do układu 6 klas. Szczegółowe omówienie algorytmu dla poszczególnych możliwych przypadków zamieszczone zostało w pracy [17].

<i>nr</i>	<i>k</i>	<i>klasa</i>	PIERWSZA ITERACJA						DRUGA ITERACJA										
			<i>klasy węzłów sąsiednich</i>						<i>klasa</i>	<i>klasy węzłów sąsiednich</i>									
0	6	C	D	D	D	D	E	E	C1	D1	D1	D1	D1	E1	E1				
1	4	B	D	D	D	D			B1	D1	D1	D1	D1						
2	7	D	B	C	C	C	C	E	E	D1	B1	C1	C1	C1	C1	E1	E1		
3	6	C	D	D	D	D	E	E	C1	D1	D1	D1	D1	E1	E1				
4	7	D	B	C	C	C	C	E	E	D1	B1	C1	C1	C1	C1	E1	E1		
5	7	D	B	C	C	C	C	E	E	D1	B1	C1	C1	C1	C1	E1	E1		
6	8	E	A	B	C	C	D	D	E	E	E1	A1	B2	C1	C1	D1	D1	E1	E1
7	7	D	B	C	C	C	C	E	E	D1	B1	C1	C1	C1	C1	E1	E1		
8	2	A	E	E						A1	E1	E1							
9	8	E	A	B	C	C	D	D	E	E	E1	A1	B2	C1	C1	D1	D1	E1	E1
10	6	C	D	D	D	D	E	E		C1	D1	D1	D1	D1	E1	E1			
11	6	C	D	D	D	D	E	E		C1	D1	D1	D1	D1	E1	E1			
12	8	E	A	B	C	C	D	D	E	E	E1	A1	B2	C1	C1	D1	D1	E1	E1
13	2	A	E	E						A1	E1	E1							
14	8	E	A	B	C	C	D	D	E	E	E1	A1	B2	C1	C1	D1	D1	E1	E1
15	4	B	E	E	E	E				B2	E1	E1	E1	E1					

Tablica 1: Kroki procedury identyfikacji klas dla przykładowego nieskierowanego i nieważonego grafu przedstawionego na Rys.1, gdzie nr jest numerem węzła a k jego stopniem.

Chociaż wyznaczając klasy bezpośrednio uwzględniamy tylko najbliższych sąsiadów każdego z węzłów, zaproponowana metoda prowadzi do uwzględnienia także ich dalszego otoczenia. Wynika to z faktu, że klasa węzła zależy od jego najbliższych sąsiadów, których klasy z kolei zależą od ich najbliższych sąsiadów, itd. Istnienie klas węzłów jest wyrazem symetrii analizowanego układu. Zastosowana procedura identyfikacji klas węzłów umożliwia redukcję rozmiaru analizowanych układów, dzięki konstrukcji sieci klas.

W swoich pracach pokazałam zastosowanie metody znajdowania klas dla sieci stanów różnych układów dyskretnych. Były to analiza przestrzeni stanów układów klasycznych, takich jak sieć spinów [11, 12], rondo [12] czy możliwe konformacje łańcucha polimerowego umieszczonego w ośrodku żelowym [13] oraz układu kwantowego jakim jest pierścień Hubbarda [14]. We wszystkich tych przypadkach konieczne jest określenie przestrzeni dozwolonych stanów układu, który ma być analizowany. Stany te możemy następnie potraktować jako węzły sieci. Istnienie

wiązania pomiędzy poszczególnymi węzłami odzwierciedla możliwość transformacji układu z jednego stanu do drugiego w pewnym procesie elementarnym. Układy takie są znane jako struktury Kripkego [19]. W otrzymanej sieci możemy poszukiwać klas węzłów. Metoda została także wykorzystana do przeprowadzenia klasyfikacji elementarnych automatów komórkowych [15] oraz analizy samopodobnych, symetrycznych fraktali [16].

Pokazano również, że w stanach stacjonarnych prawdopodobieństwa stanów wchodzących w skład danej klasy są jednakowe, co oznacza, że prawdopodobieństwo danej klasy równe jest iloczynowi prawdopodobieństwa stanu wchodzącego w jej skład i liczby tworzących ją stanów. Równość ta umożliwia analizę pewnych własności układu na zredukowanym grafie klas w miejsce analizy większego grafu stanów. Możliwość zmniejszenia rozmiaru analizowanego układu jest istotnym uproszczeniem w przypadku analizy układów rzeczywistych. Metoda może zostać zastosowana dla dowolnej sieci.

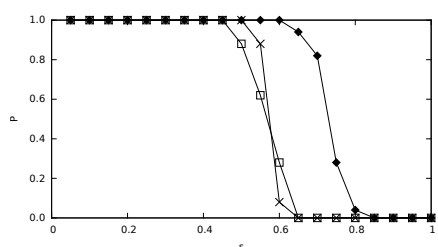
E.2 Szczegółowe omówienie prac (a-h) będących podstawą wniosku o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego

- a. Krawczyk M.J., "Differential equations as a tool for community identification", *Physical Review E* 77 (2008) 065701(R)

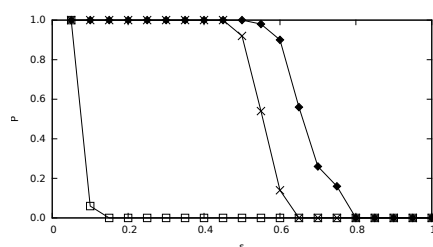
Cechą wszystkich istniejących algorytmów znajdowania społeczności w sieciach jest to, że ich zastosowanie do dowolnej sieci zwróci wynik w postaci podziału sieci na społeczności. Z drugiej strony stosując te algorytmy do sieci odzwierciedlających relacje pomiędzy elementami dowolnej sieci rzeczywistej zwykle brakuje podstaw do stwierdzenia, że otrzymany wynik jest wynikiem poprawnym. Stąd celowym jest testowanie algorytmów na sieciach sztucznie generowanych, których rzeczywistą strukturę znamy.

W pracy zastosowano metodę znajdowania społeczności w sieciach opartą na równaniach różniczkowych (1), do sztucznie wygenerowanych sieci o znanej strukturze społeczności. Sieci testowe generowane były w następujący sposób: początkowo sieć składała się z określonej liczby w pełni połączonych społeczności o jednakowych bądź różnych rozmiarach, przy czym społeczności były wzajemnie rozłączone. Macierz połączeń dla takiej sieci jest macierzą symetryczną, a wartość elementu macierzowego A_{ij} wynosi 1, jeżeli węzły i i j są ze sobą połączone, w przeciwnym wypadku wynosi 0. Następnie do tak otrzymanej macierzy dodawano szum, tzn. każdy element macierzowy równy 1 pomniejszono o liczbę losową z zakresu $[0, \epsilon]$ a każdy element

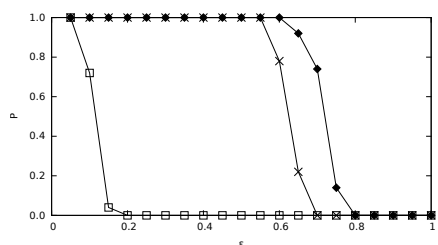
macierzy równy 0 powiększono o wartość losową z tego samego zakresu. Pytaniem, na które chciałam odpowiedzieć było przy jakiej wartości szumu ϵ zaproponowany przez nas algorytm potrafi odtworzyć w sposób prawidłowy oryginalną strukturę zadanej sieci. Działanie metody zostało porównane z często stosowaną metodą zaproponowaną przez Newmana [9]. Wynikiem jest zależność procentu prawidłowo odtworzonych sieci od amplitudy szumu. Otrzymane wyniki pokazują, że zaproponowana przez nas metoda pozwala na odtworzenie struktury sieci w szerokim zakresie wartości szumu. Metoda daje wyniki zbliżone do uzyskiwanych z użyciem algorytmu Newmana, a nawet lepsze w przypadku społeczności znacznie różniących się rozmiarem. Wyniki, uśrednione dla 50 realizacji tego samego podziału sieci, pokazano na Rys.2.



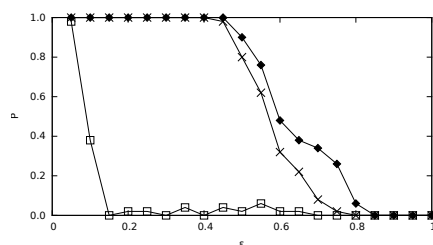
(a) $N = 110$, społeczności o rozmiarach 50, 48 i 12 węzłów



(b) $N = 130$, społeczności o rozmiarach 22, 34, 11, 10 i 53 węzłów



(c) $N = 130$, społeczności o rozmiarach 19, 60, 45 i 6 węzłów



(d) $N = 110$, społeczności o rozmiarach 18, 22, 30, 38 i 2 węzłów

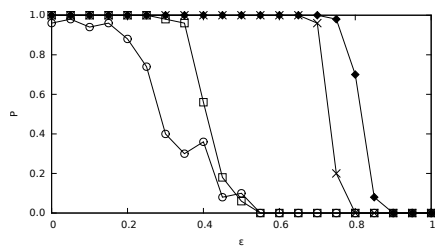
Rysunek 2: Wyniki dla społeczności o różnych rozmiarach, uśrednione dla 50 różnych realizacji. Oznaczenia symboli: \square - algorytm Newmana, \times - Równ. 1 dla $\beta = 0.25$, \blacklozenge - Równ. 1 dla $\beta = 0.4$ [4].

- b. Krawczyk M.J., "Application of the differential equations method for identifying communities in sparse networks", *Computer Physics Communications* 181 (2010) 1702

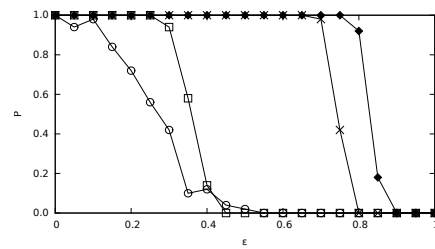
Praca ta stanowi kontynuację wcześniej omawianej pracy [4]. O ile wcześniej badałam sieci w pełni połączone, o tyle w niniejszej pracy analizowałam grafy, w których część wiązań jest usunięta. Jest to istotne ponieważ większość sieci rzeczywistych nie jest w pełni połączona. Badane sieci generowane były w sposób analogiczny do omawianego wcześniej z tym, że po utworzeniu sieci składającej się z określonej liczby społeczności w pełni połączonych część wiązań była usuwana z zadaniem prawdopodobieństwem p_z . Podobnie jak wcześniej do otrzymanych sieci dodawany był szum. W pracy porównałam wyniki otrzymywane z użyciem zaproponowanej przez nas metody znajdowania społeczności [3] z dwoma innymi algorytmami: algorytmem Newmana [9] polegającym na sukcesywnym łączeniu węzłów w społeczności oraz algorytmem zaproponowanym w pracy [10], w którym sukcesywnie dzieli się zbiór wszystkich węzłów na społeczności dokonując każdorazowo podziału już istniejących społeczności na dwie części. Podobnie jak we wcześniej omawianej pracy dla przypadku w pełni połączonych klastrów, także w przypadku sieci analizowanych w tej pracy, otrzymane wyniki są tak samo dobre lub lepsze od wyników uzyskiwanych z innych algorytmów. Wyniki, uśrednione dla 50 realizacji tego samego podziału sieci, pokazano na Rys.3.

- c. Krawczyk M.J., "Topology of the space of periodic ground states in the anti-ferromagnetic Ising and Potts models in selected spatial structures", *Physics Letters A* 374, (2010) 2510

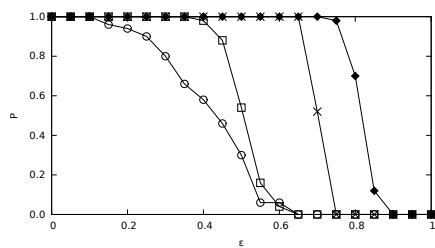
Praca poświęcona jest analizie topologii przestrzeni stanów podstawowych wybranych układów spinów z oddziaływaniem antyferromagnetycznym w modelach Isinga [20] i Potts'a [21] (dla trzech możliwych orientacji spinu) z periodycznymi warunkami brzegowymi. Badanymi układami były tutaj siatka trójkątna, sieć Archimedes'a $(3, 12^2)$ oraz sieć kubiczna Lavesa C15. Istotnym ograniczeniem, jeżeli chodzi o wielkość badanych układów jest fakt, że liczba możliwych konfiguracji spinów dla układu o rozmiarze N rośnie jak 2^N w modelu Isinga oraz jak 3^N w modelu Potts'a (dla przyjętych trzech możliwych orientacji spinu). W każdym z przypadków możliwe konfiguracje spinów traktowane są jako węzły grafu. Definiujemy tu także proces elementarny, jakim jest zmiana orientacji jednego spinu, który przeprowadza jeden stan układu w inny. Krawędziami analizowanego grafu są zatem przejścia jednospinowe pomiędzy stanami. Badanymi wielkościami były energia układu i krotność stanów podstawowych. Obliczenia wymagały określenia możliwości przejść pomiędzy stanami podstawowymi. Dla stanów podstawowych



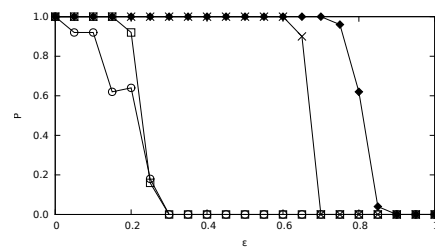
(a) społeczności o rozmiarach 165, 93 i 42 węzłów, $pz = 1/3$



(b) społeczności o rozmiarach 175, 75 i 50 węzłów, $pz = 1/3$



(c) społeczności o rozmiarach 148, 117 i 35 węzłów, $pz = 1/4$



(d) społeczności o rozmiarach 191, 74 i 35 węzłów, $pz = 1/4$

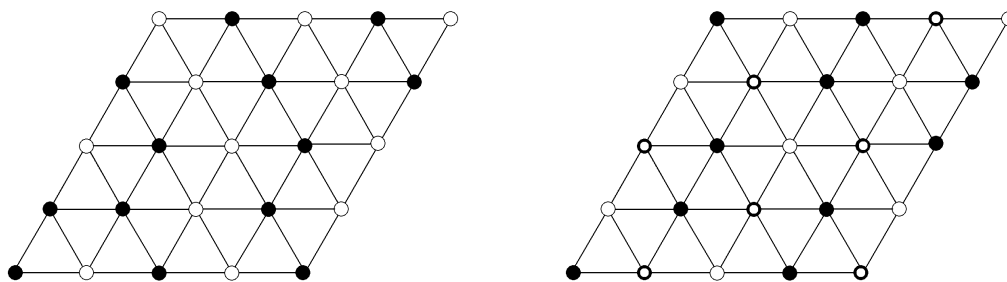
Rysunek 3: Wyniki dla sieci o rozmiarze $N = 300$ węzłów i społeczności o różnych rozmiarach, uśrednione dla 50 różnych realizacji. Oznaczenia symboli: \circ - metoda Duch i Arenas, \square - algorytm Newmana, \times - Równ. 1 dla $\beta = 0.25$, \blacklozenge - Równ. 1 dla $\beta = 0.4$ [5].

wych wyznaczone zostały także ich klasy (zdefiniowane przeze mnie pojęcie pozwalające na pokazanie równoważności stanów, omawiane w części E.1.2).

Dla sieci Archimedesesa badałam układ składający się z jednej komórki elementarnej. Dla układu tego w przypadku zastosowania modelu Isinga możliwych jest 2^6 różnych konfiguracji spinów. Energia stanu podstawowego układu wynosi -5 (w jednostkach energii wymiany) i jest osiągnięta dla sześciu konfiguracji. W przypadku sieci trójkątnej badałam układy składające się z 16 i 25 węzłów. Ich energia stanu podstawowego wynosi odpowiednio -16 (90 stanów) i -25 (3630 stanów). W układzie tym każdy węzeł ma sześciu najbliższych sąsiadów i jedna trzecia wiązań jest sfrustrowana. Otrzymany wynik pokazuje, że na każdy trójkąt przypada jedno sfrustrowane wiązanie, chociaż konfiguracja spinów prowadząca do stanu podstawowego nie jest trywialna. Przykładowa konfiguracja spinów prowadząca do stanu podstawowego przedstawiona jest na Rys.4a. W przypadku sieci Lavesa stan podstawowy o energii -16 realizowany jest przez 90 spośród 2^{16} możliwych stanów układu.

Zastosowanie modelu Potts'a z trzema możliwymi orientacjami spinu w połączeniu z trzema najbliższymi sąsiadami dla sieci Archimedesesa prowadzi do zerowej energii stanu podstawowego (brak frustracji). Energia ta jest osiągnięta w przypadku 12 konfiguracji spinów. W przypadku sieci trójkątnej wartość energii stanu podstawowego zależy od wielkości układu. I tak, jeżeli liniowy wymiar sieci jest wielokrotnością trójki, w układzie nie będzie wiązań sfrustrowanych i energia stanu podstawowego wyniesie zero, w innych natomiast przypadkach energia ta będzie wyższa. Dla układu składającego się z 9 spinów zgodnie z oczekiwaniem energia stanu podstawowego wynosi zero i jest realizowana przez 6 konfiguracji spinów, dla $N = 16$ i 25 energia ta wynosi odpowiednio 6 (288 stanów) i 7 (450 stanów). Podobnie jak w przypadku modelu Isinga, konfiguracja spinów prowadząca do stanu podstawowego nie jest trywialna (Rys.4b). Dla ostatniej z analizowanych sieci, czyli struktury Lavesa, stan podstawowy o energii $N/2 = 8$ realizowany jest przez 90936 spośród 3^{16} możliwych konfiguracji spinów. W tych stanach jedno na każdych sześć wiązań jest sfrustrowane, co daje $N/2$ sfrustrowanych wiązań w jednej komórce elementarnej.

Jednospinowe przejścia pomiędzy stanami podstawowymi, czyli takie, które nie prowadzą do wzrostu energii układu, możliwe są dla przypadku sieci trójkątnej w modelu Isinga oraz sieci Lavesa w modelu Potts'a. W pierwszym przypadku wszystkie stany podstawowe dzielą się na trzy podzbiory, wewnątrz których zmiana orientacji jednego spinu przeprowadza dany stan



(a) Model Isinga (dwie możliwe orientacje spinu)

(b) Model Potts'a (trzy możliwe orientacje spinu)

Rysunek 4: Przykładowa konfiguracja spinów dla stanu podstawowego dla sieci trójkątnej o rozmiarze $N = 25$ [11].

w inny stan należący do tego samego podzbioru. Wewnątrz każdego z tych podzbiorów występują stany, które są swoimi lustrzanymi odbiciami. Otrzymany wynik wskazuje na istnienie całki ruchu, różnej dla każdego z trzech podzbiorów. Są one także manifestacją trójkrotnej symetrii układu związanej z symetrią sieci trójkątnej. Zagadnienie to jest dalej dyskutowane w pracy [12].

W przypadku sieci Lavesa jednospinowe przejścia z zachowaniem energii układu możliwe są pomiędzy wszystkimi stanami podstawowymi; graf jest połączony.

Jeżeli możliwe są przejścia pomiędzy stanami, naturalnym wydaje się pytanie ile stanów podstawowych można osiągnąć na skutek zmiany orientacji jednego spinu z poszczególnych konfiguracji realizujących stan podstawowy. W języku sieci pytamy tutaj o stopień poszczególnych węzłów. Ponieważ naszym celem jest wyłonienie stanów wykazujących jednakowe własności topologiczne, oprócz liczby możliwych przejść istotne będą także własności najbliższych sąsiadów poszczególnych węzłów. Wyznaczenia klas dokonano dla dwóch układów, w których możliwe są jednospinowe przejścia pomiędzy stanami podstawowymi (nie prowadzące do wzrostu energii układu). Dla sieci trójkątnej o rozmiarze $N = 25$ w modelu Isinga stan podstawowy realizowany jest przez 3630 różnych konfiguracji spinów. Dla przypadku tego otrzymano 12 klas. Dla sieci Lavesa w modelu Potts'a stan podstawowy realizowany jest przez 90936 konfiguracji, które redukują się do 28 klas. Jak widać w obu przypadkach - a zwłaszcza w drugim - redukcja rozmiaru układu

jest bardzo duża. Jest to wyrazem bardzo silnej symetrii analizowanych sieci.

- d. Krawczyk M.J., "Symmetry induced compression of discrete phase space", Physica A 390 (2011) 2181

Praca ta stanowi usystematyzowanie wprowadzonej we wcześniejszej pracy [11] koncepcji klas stanów. Klasy takie można wskazać w dowolnym układzie, który charakteryzuje się skończoną liczbą dyskretnych stanów i dla którego można zdefiniować elementarny proces przeprowadzający jeden stan układu w inny. Jeżeli dodatkowo układ wykazuje symetrię topologiczną, zidentyfikowanie klas stanów umożliwia zredukowanie rozmiaru układu i zaprezentowanie go w równoważnej postaci jako grafu klas, gdzie każdy węzeł reprezentuje klasę stanów w miejsce oryginalnego grafu stanów. W ogólnym przypadku oba grafy są ważne. Dla obu reprezentacji układu, tj. za pomocą grafu stanów oraz grafu klas, można skonstruować macierz przejścia [25]. Po normalizacji do jedynki każdej kolumny macierzy przejścia, jej poszczególne elementy wyrażają prawdopodobieństwa poszczególnych przejść pomiędzy stanami, bądź klasami stanów. Obliczenie pary własnej, dla której wartość własna wynosi 1 dla macierzy przejścia grafu stanów pozwala na wyznaczenie prawdopodobieństw poszczególnych stanów w stanie stacjonarnym. W omawianej pracy pokazałam, że dla poprawnie wyznaczonych klas stanów zachodzi równość: $p_{state}N_s = p_{class}$, gdzie p_{state} - składowa znormalizowanego głównego wektora własnego określająca prawdopodobieństwo danego stanu, N_s - liczba stanów tworzących daną klasę oraz p_{class} - składowa znormalizowanego głównego wektora własnego określająca prawdopodobieństwo danej klasy. Równość wspomnianych prawdopodobieństw pozwala na prowadzenie analizy badanego układu na grafie klas zamiast na oryginalnym grafie stanów. Ze względu na fakt, że może być on dużo mniejszy jest to bardzo korzystne w przypadku dużych układów. Wykorzystanie tej własności przedstawione jest w pracy [13].

W pracy analizowałam dwa różne układy: trójkątną sieć spinów w modelu Isinga i Potts'a oraz prosty układ runda z trzema drogami dojazdowymi i trzema drogami wyjazdowymi.

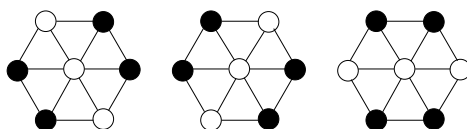
Trójkątna sieć spinów

We wcześniej omawianej pracy [11] pokazałam, że w przypadku modelu Isinga dla sieci trójkątnej o rozmiarze $N = 25$, istnieją trzy podzbiory stanów podstawowych, wewnątrz których możliwe są przejścia pomiędzy stanami w wyniku zmiany orientacji jednego spinu. W aktualnie omawianej pracy pokazałam natomiast, że w każdym z tych podzbiorów wyróżniona jest jedna z osi układu. Pokazuje to obliczenie funkcji korelacji spinów z ich

najbliższymi sąsiadami względem każdej z osi dla wszystkich stanów podstawowych. Funkcja ta dana jest wzorem: $w_i = \langle \sigma_{-1i}\sigma_0 + \sigma_0\sigma_{1i} \rangle$, gdzie σ_0 oznacza spin danego węzła, a σ_{1i} i σ_{-1i} spiny węzłów sąsiednich wzdłuż jednej z trzech osi i układu. Otrzymane wartości są jednakowe dla wszystkich stanów podstawowych i wynoszą $-0.6, 0.2, -0.6$, różnica pomiędzy trzema zbiorami stanów objawia się różną kolejnością wartości, co oznacza wyróżnienie jednej z osi.

Trójrotna symetria układu zauważalna jest także w strukturze klas stanów podstawowych. Manifestuje się to zauważalną różnicą gęstości charakterystycznych motywów ułożenia spinów opisanych w [22]. Widoczne jest to w ilości motywów pokazanych na Rys.5, które zorientowane mogą być wzdłuż jednej z trzech osi układu.

Zwiększenie wielkości siatki trójkątnej do $N = 36$ powoduje utratę symetrii trójrotnej. W tym przypadku około 7% stanów podstawowych stanowią stany izolowane. Dla pozostałych stanów natomiast możliwe są przejścia pomiędzy nimi w procesach jednospinowych.

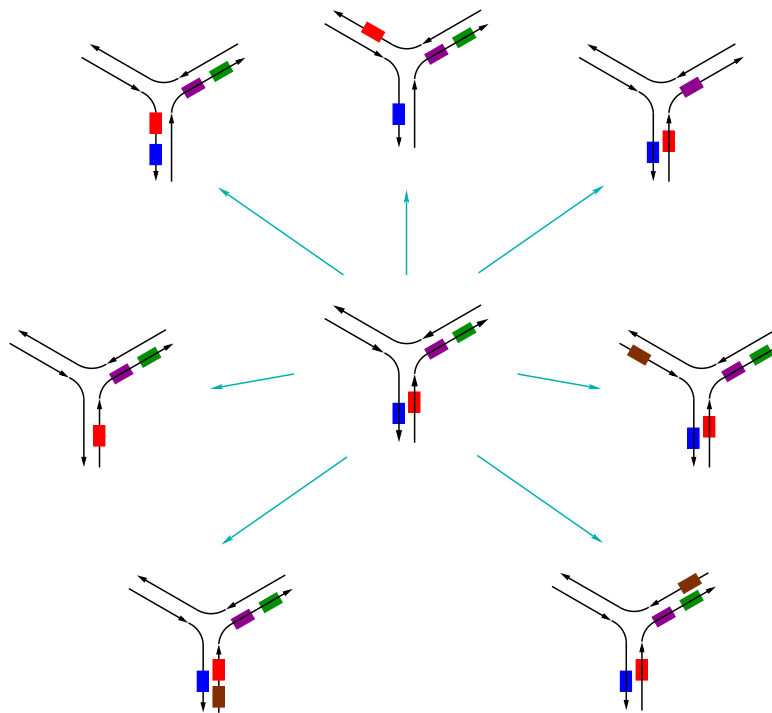


Rysunek 5: Motywy zorientowane wzdłuż jednej z osi układu [12].

Rondo

Jak wspomniano, drugim z analizowanych układów było rondo o trzech drogach dojazdowych i trzech drogach wyjazdowych. Dla prostoty przyjęto, że na każdej z dróg mogą znajdować się maksymalnie dwa pojazdy. Przejścia pomiędzy poszczególnymi stanami, rozumianymi jako możliwe konfiguracje zapełnienia dróg, związane są z przemieszczeniem jednego pojazdu z drogi dojazdowej na drogę wyjazdową (pod warunkiem, że nie jest ona już zajęta przez dwa pojazdy), pojawieniem się pojazdu na niecałkowicie zapełnionej drodze dojazdowej lub opuszczeniem układu przez pojazd znajdujący się na drodze wyjazdowej. Przykładowe możliwe przejścia pokazano na Rys.6 (rysunek niepublikowany).

W pracy pokazano, że możliwa jest znaczna redukcja rozmiaru układu poprzez wyznaczenie klas stanów. Początkowa liczba $3^6 = 729$ możliwych stanów układu zredukowana jest do 55 klas. Dla układu tego wyznaczono także społeczności, korzystając z metody równań różniczkowych (omawianej wcześniej). Jak pokazano stany charakteryzujące się występowaniem



Rysunek 6: Możliwe przejścia dla przykładowego stanu obsadzenia dróg (niepublikowana ilustracja do pracy [12]).

dróg całkowicie zapełnionych oraz dróg pustych tworzą odrębne społeczności. W strukturze społeczności widoczna jest symetria pomiędzy stanami z drogami zapełnionymi i pustymi.

- e. Krawczyk M.J., "Static and dynamic properties of discrete systems with compressed state space; A polymer chain as an example", The European Physical Journal B 86 (2013) 246

W pracy analizowano przestrzeń stanów utworzoną przez możliwe konformacje kołowej cząsteczki polimerowej w modelu reptonowym [23, 24]. Stany układu są tutaj reprezentowane przez węzły sieci, w której wiązania wyznaczone są przez zmianę położenia jednego reptonu, z zachowaniem ciągłości cząsteczki. Rozważano przypadek cząsteczki swobodnej, cząsteczki poruszającej się w ośrodku o regularnej strukturze oraz pod wpływem zewnętrznego pola elektrycznego. Ten ostatni przypadek jest istotnie różny, ponieważ w przypadku gdy energia pola zewnętrznego przewyższa energię termiczną część konformacji będzie efektywnie pełnić funkcję pułapek. O ile dla przypadku bez pola prawdopodobieństwa poszczególnych przejść są jednakowe, o tyle w obecności pola zależą one od stosunku energii pola zewnętrznego do energii termicznej ε oraz kąta pomiędzy kierunkiem pola i kierunkiem przesunięcia reptonu. Rozkład stacjonarny prawdopodobieństw poszczególnych stanów można wyznaczyć jako wartości asymptotyczne, dla dostatecznie długiego czasu, z równań fundamentalnych [25]:

$$\frac{dM_i(t)}{dt} = \sum_{j \in S_i} M_j(t) w_{j \rightarrow i}(\varepsilon) - \sum_{j \in S_i} M_i(t) w_{i \rightarrow j}(\varepsilon) \quad (2)$$

gdzie sumowanie przebiega po sąsiadach węzła i z prawdopodobieństwem w przejścia pomiędzy danymi węzłami obliczonym dla danej wartości pola. Równania te umożliwiają także wyznaczenie czasów osiągnięcia przez cząsteczkę konformacji stanowiącej pułapkę oraz czasu uwalniania z niej. W obliczeniach uogólniono metodę *exact enumeration* [26] dla przypadku układów ważonych z jakim mamy do czynienia w omawianej pracy.

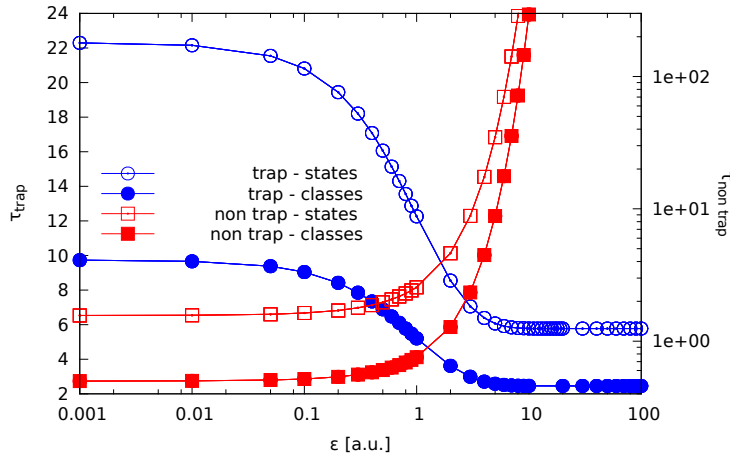
Metoda *exact enumeration* pozwala na wyznaczenie prawdopodobieństw poszczególnych stanów układu w funkcji czasu. Odbywa się to poprzez ewolucję rekordu o długości odpowiadającej liczbie stanów, w którym w chwili początkowej wartości prawdopodobieństw dla stanów pułapkowych ustawione są na 0 a pozostałych stanów na 1. Następnie przeprowadza się ewolucję wartości prawdopodobieństw dla stanów nie będących stanami pułapkowymi, przy czym w każdym kroku wartość przypisana danemu stanowi jest równo dzielona pomiędzy wszystkich jego sąsiadów. Oznacza to, że nowa wartość dla każdego ze stanów otrzymywana jest jako suma ułamków prawdopo-

bieństw otrzymywanych od stanów, które prowadzą do danego stanu. Procedura ta nie jest odpowiednia do bezpośredniego zastosowania w naszym przypadku, gdyż jej istotnym założeniem jest równość wag wszystkich przejść. W naszym przypadku wagi te są różne, dlatego też przy obliczaniu nowej wartości prawdopodobieństwa stanów zastosowałam układ równań fundamentalnych (2). Zmodyfikowana metoda uwzględniła różne wagi oraz różne skale czasowe poszczególnych przejść.

W przypadku słabych pól prawdopodobieństwa poszczególnych stanów nie różnią się od siebie w sposób istotny. Sytuacja ulega oczywiście zmianie dla przypadku silnych pól, gdzie prawdopodobieństwa poszczególnych stanów są różne. W szczególności dla przypadku, w którym konformacje pułapkowe są możliwe, po pewnym czasie całe prawdopodobieństwo koncentruje się w tych właśnie stanach. Zarówno dla grafu stanów, jak i dla grafu klas wyznaczono także numerycznie czasy dochodzenia i uwalniania (o ile jest to możliwe ze względu na wartość pola zewnętrznego) z konformacji pułapkowych, korzystając ze zmodyfikowanej wersji metody *exact enumeration* i układu równań fundamentalnych. Wynik pokazano na Rys.7. W przypadku pól słabych $\varepsilon \leq 0.1$ oraz dla pól silnych $\varepsilon > 5$ czas dochodzenia do konformacji pułapkowej zmienia się nieznacznie z natężeniem pola. Zgodnie z oczekiwaniem w przypadku słabych pól jest on długi ze względu na możliwość ruchów termicznych. Pomędzy stałymi zakresami czas szybko maleje. Czas ucieczki z konformacji pułapkowych jest bardzo krótki dla $\varepsilon < 1$, a dla większych wartości pola krzywa silnie rośnie. Otrzymano jakościową zgodność pomiędzy wynikami uzyskanymi dla grafu stanów i grafu klas. Obserwowana różnica wynika ze zmiany rozmiaru sieci.

Innym zagadnieniem analizowanym w pracy jest zależność liczby klas stanów od obecności ośrodka i zewnętrznego pola. W każdym przypadku otrzymana liczba klas jest mniejsza od liczby stanów układu, chociaż ze względu na częściowe łamanie symetrii w obecności pola, w tym przypadku redukcja rozmiaru układu jest mniejsza niż dla przypadku bez pola.

Charakter ruchu cząsteczki polimerowej w ośrodku porowatym pod wpływem pola zewnętrznego zależy od długości cząsteczki, gęstości ośrodka oraz wartości pola. Korzystając z zaproponowanej w pracy metody można oszacować istotne parametry ruchu cząsteczki, jakimi są prędkość oraz współczynnik dyfuzji. Otrzymana krzywa zależności prędkości od pola jest różna w zależności od kierunku pola. W przypadku kiedy możliwe są konformacje pułapkowe prędkość rośnie dla $\varepsilon \leq 2$ a następnie maleje jak $\exp(-\alpha\varepsilon)$ z $\alpha \approx 0.5$. W przypadku braku pułapek prędkość początkowo rośnie do $\varepsilon \leq 5$ a następnie się wysyca. Z kolei dla $\varepsilon < 0.1$ wartość współczynnika dyfuzji



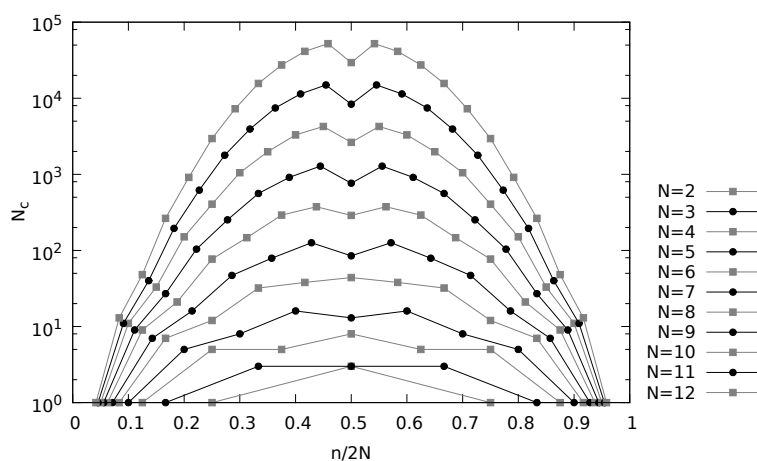
Rysunek 7: Czas dochodzenia do stanu pułapkowego τ_{trap} (lewa oś pionowa) oraz czas uwalniania ze stanu pułapkowego $\tau_{non\ trap}$ (prawa oś pionowa) w funkcji ε . Symbole puste odnoszą się do sieci stanów, natomiast pełne do sieci klas [13].

jest bardzo mała i w przybliżeniu stała, następnie rośnie liniowo do wartości $\varepsilon \approx 3$, gdzie osiąga wartość maksymalną. Dalej, do $\varepsilon = 10$ krzywa maleje i osiąga wartość 0, która utrzymuje się dla wyższych pól. Otrzymany wynik jest spójny z zależnością dla prędkości w przypadku występowania konformacji pułapkowych: zarówno prędkość, jak i współczynnik dyfuzji maleją do zera w tym samym zakresie pola.

- f. Krawczyk M.J., "Symmetry-driven compression of the set of states of a Hubbard ring", *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 349 (2014) 63

W pracy tej metoda określania klas stanów zastosowana została do układu kwantowego, jakim jest pierścień Hubbarda, czyli jednowymiarowy cykliczny łańcuch atomów. W analizowanym modelu jednego pasma w tzw. granicy atomowej, każdy atom może zawierać maksymalnie dwa elektrony, co wynika z zakazu Pauliego. Dla pierścienia o danej długości można wyznaczyć przestrzeń stanów, która jest utworzona przez wszystkie możliwe konfiguracje obsadzeń atomów tworzących analizowany pierścień. Stany te można następnie potraktować jako węzły sieci, w której krawędzie wyznaczone są przez procesy przeskoku elektronu pomiędzy sąsiednimi atomami oraz zmianę orientacji spinu. Należy w tym miejscu pamiętać, że częstość przeskoku jest większa niż częstość zmiany orientacji [29], co w naszym modelu przekłada się na różne wagi poszczególnych wiązań sieci. Otrzymana sieć jest symetryczna: jeżeli określony proces przeprowadza stan A w stan B , to proces odwrotny

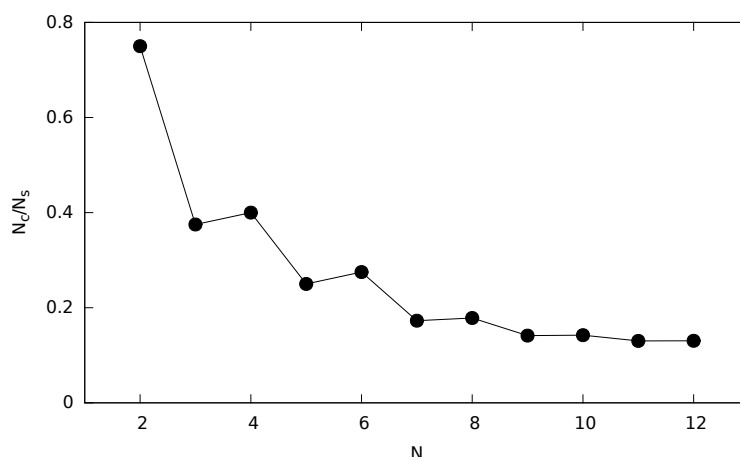
przeprowadza stan B w stan A , a amplitudy przejść w obu kierunkach są jednakowe. Wyznaczając liczbę klas analizowałam cztery przypadki: pełną przestrzeń stanów, pełną przestrzeń stanów z wyłączeniem stanów stanowiących odbicia lustrzane innych stanów oraz przestrzeń stanów zawierającą jedynie konfiguracje realizujące stan podstawowy, czyli nie zawierające atomów obsadzonych przez dwa elektrony, w tym wypadku także z uwzględnieniem odbić lustrzanych oraz je eliminując. W każdym z analizowanych przypadków otrzymany graf jest nieskierowany i ważony, co należy uwzględnić przy wyznaczaniu klas. Otrzymane wyniki odzwierciedlają symetrię ze względu na stopień zapełnienia pasma. Na Rys.8 zaprezentowano liczbę klas w funkcji stopnia zapełnienia pasma, natomiast na Rys.9 redukcję rozmiaru układu dla pełnej przestrzeni stanów. Dla dużych układów liczba klas wydaje się nie przekraczać 15 procent liczby stanów.



Rysunek 8: Liczba klas N_c w funkcji stopnia zapełnienia pasma $n/2N$, gdzie n - liczba elektronów i N - liczba atomów [14].

- g. Krawczyk M.J., "New aspects of symmetry of elementary cellular automata", Chaos, Solitons and Fractals 78 (2015) 86

W pracy dokonałam klasyfikacji elementarnych automatów komórkowych [27], z wykorzystaniem analizy klas. Analizowaną przestrzeń stanów stanowił zbiór możliwych konfiguracji układu, którego każda komórka może znajdować się w jednym z dwóch dozwolonych stanów $(0, 1)$, przy czym przyjęto okresowe warunki brzegowe. Możliwe stany traktowane są jako węzły sieci. Przejścia pomiędzy poszczególnymi stanami wynikają z danej reguły automatu. Ponieważ analizowany automat jest deterministyczny, każdy stan



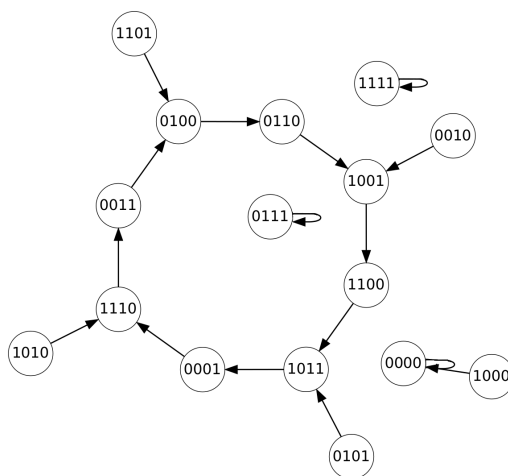
Rysunek 9: Redukcja rozmiaru układy N_c/N_s w funkcji długości łańcucha dla przypadku pasma wypełnionego do połowy [14].

przechodzi tylko w jeden inny stan. Poszczególne stany mogą być jednak osiąmane z więcej niż jednego stanu. Takie zachowanie oznacza, że przy wyznaczaniu klas stanów konieczne jest uwzględnienie zarówno listy sąsiadów wchodzących, jak i - w tym wypadku jednoelementowej - listy sąsiadów wychodzących. Przykład otrzymanej przestrzeni stanów dla automatu nr 86 o długości 4 przedstawiony jest na Rys.10.

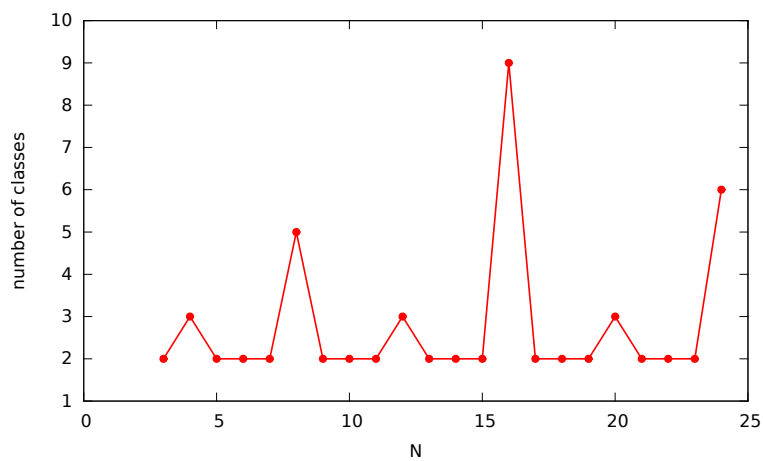
Dla 232 spośród 256 automatów wyznaczona liczba klas rośnie eksponencjalnie z rozmiarem układu. Wzrost ten jest jednak wolniejszy niż wzrost liczby stanów i rośnie nie szybciej niż 1.7^N , podczas gdy liczba stanów rośnie jak 2^N , gdzie N jest długością automatu. Największa liczba klas występuje dla chaotycznego automatu nr 30 (i trzech równoważnych wg klasyfikacji Wolframa [28]), druga co do wielkości - dla automatu nr 110 (i trzech równoważnych wg klasyfikacji Wolframa [28]), który jest kompletny w sensie Turinga. Redukcja rozmiaru przestrzeni stanów jest różna dla różnych automatów i zmienia się od jednego do nawet czterech rzędów wielkości.

Dla pozostałych 24 automatów obserwowany jest inny, nietrywialny charakter zależności liczby klas od rozmiaru układu. Np. dla automatów nr 90 i 165 ma ona przebieg jak na Rys.11.

Otrzymane wyniki pokazują, że zależność liczby klas od długości dla automatów klasyfikowanych przez Wolframa jako równoważne [28] jest taka sama. Co więcej biorąc pod uwagę tę zależność jako kryterium klasyfikacji



Rysunek 10: Graf stanów otrzymany dla automatu nr 86 o długości $N = 4$ [15].

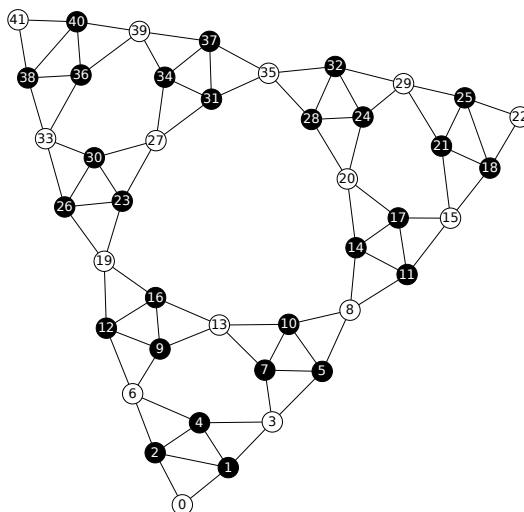


Rysunek 11: Liczba klas w funkcji długości automatu dla automatów nr 90 i 165 [15].

stwierdzamy, że liczba grup symetrii wynosi 80, czyli o 8 mniej niż wynika z klasyfikacji Wolframa [28]. Wynik ten sugeruje istnienie symetrii reguł automatów innej niż dotychczas opisywane. Pozostaje jednak pytanie o jej określenie i potwierdzenie w większych układach.

- h. Krawczyk M.J., "Communities and classes in symmetric fractals", International Journal of Modern Physics C 26 (2015) 1550025

Praca ta z jednej strony stanowi kontynuację cyklu prac dotyczących analizy układów wykazujący symetrię, z drugiej strony natomiast stanowi nawiązanie do wcześniejszych prac dotyczących znajdowania społeczności w sieciach. Układami badanymi w pracy były symetryczne i samopodobne fraktale, których przykłady stanowią trójkąt Sierpińskiego oraz krzywa Kocha. W omawianej pracy pokazałam, że zastosowanie zaproponowanej przeze mnie wcześniej metody równań różniczkowych znajdowania społeczności pozwala na wskazanie węzłów, dla których przynależność do społeczności nie jest jednoznacznie określona. Mamy tu do czynienia z efektem znanym jako *overlapping*. Pojęcie to oznacza, że węzeł może należeć do więcej niż jednej społeczności. Na Rys.12 pokazano społeczności znalezione dla grafu otrzymanego z trójkąta Sierpińskiego o rozmiarze $N = 42$.



Rysunek 12: Graf dla trójkąta Sierpińskiego z zaznaczeniem społeczności dla $N = 42$. W tym przypadku otrzymano 9 społeczności po 3 węzły każda (węzły czarne) oraz 15 społeczności po 1 węzeł każda (węzły białe) [16].

W tym przypadku otrzymano 9 społeczności po 3 węzły każda (węzły czarne

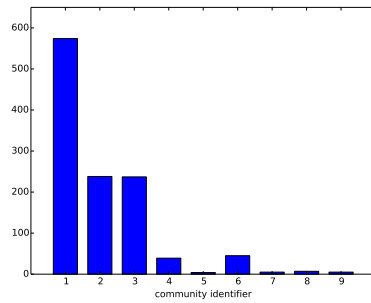
na rysunku) oraz 15 społeczności po 1 węzle każda (węzły białe na rysunku). Część węzłów izolowanych jest właśnie węzłami, dla których możliwy jest *overlapping*. Procedura, która jednoznacznie przyporządkowuje węzły społecznościom w przypadku symetrii, musi pozostawić takie węzły jako osobne społeczności. Jeżeli jednak zastosujemy procedurę znajdowania społeczności dla macierzy nieznacznie zaburzonej, możliwe będzie wskazanie społeczności, do których należy dany węzeł. Zaburzenie macierzy polega na dodaniu szumu, przez odjęcie małej wartości od jedynek i dodanie małej wartości do zer w elementach macierzowych. Po przeprowadzeniu wielu powtórzeń procedury znajdowania społeczności można sporządzić histogramy częstości połączenia poszczególnych węzłów początkowo klasyfikowanych jako izolowane ze społecznościami o rozmiarze innym niż jeden. Histogramy takie, dla trójkąta Sierpińskiego ($N = 42$), przedstawiono na Rys.13. Widoczne dwa najwyższe piki na Rys.13b-13d świadczą o jednakowo silnej przynależności odpowiednich węzłów do dwóch społeczności. Przykładowo dla węzła nr 3 (Rys.13b) dwa piki o prawie jednakowych wysokościach odpowiadają społecznościom (1, 2, 4) i (5, 7, 10) na Rys.12.

Co więcej otrzymane histogramy odzwierciedlają strukturę społeczności całej sieci, tzn. na podstawie wysokości poszczególnych słupków jesteśmy w stanie pokazać, w jaki sposób poszczególne społeczności są ze sobą połączone. Ważnym wynikiem jest także to, że jeżeli dla jakichś węzłów otrzymano analogiczne histogramy, to należą one do tej samej klasy.

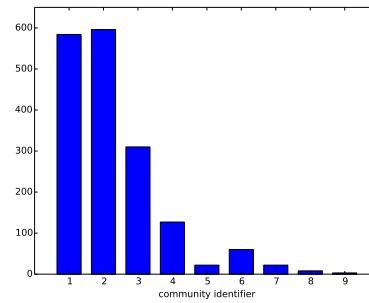
E.3 Podsumowanie

Zaproponowana metoda znajdowania społeczności w sieciach [4,5] może być zastosowana do dowolnego grafu, tj. sieci ważonych i nieważonych oraz skierowanych i nieskierowanych. Jak pokazałam na przykładzie sieci modelowych jej zastosowanie pozwala na prawidłowe wyznaczenie społeczności także w przypadku, gdy różnią się one znacznie wielkościami, co często stanowi problem przy ich wyznaczaniu innymi metodami [30]. Metoda radzi sobie także dobrze z danymi zaszumionymi. Pozwala ona także na wyznaczenie węzłów, dla których obserwuje się *overlapping*, czyli sytuację, w której węzeł należy do więcej niż jednej społeczności. Dla węzłów takich, po nieznacznym zaszumieniu macierzy połączeń, można sporządzić histogramy odzwierciedlające strukturę ich połączeń ze społecznościami występującymi dla danej sieci [16].

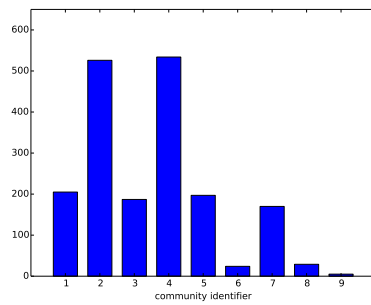
Redukcja rozmiaru sieci za pomocą wyznaczenia klas stanów możliwa jest dla dowolnej sieci charakteryzującej się symetrią topologiczną, tj. co najmniej dwa węzły muszą mieć taką samą strukturę otoczenia. Klasa węzła wyznaczona jest



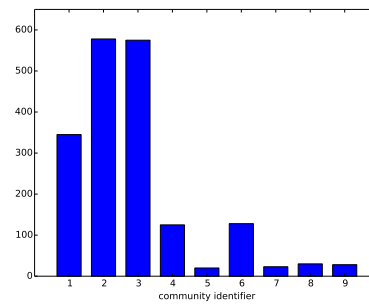
(a) Węzeł numer 0. Analogiczne histogramy otrzymano dla węzłów 22 i 41.



(b) Węzeł numer 3. Analogiczne histogramy otrzymano dla węzłów 6, 15, 29, 33 i 39.



(c) Węzeł numer 8. Analogiczne histogramy otrzymano dla węzłów 19 i 35.



(d) Węzeł numer 13. Analogiczne histogramy otrzymano dla węzłów 20 i 27.

Rysunek 13: Histogramy częstości połączenia danego węzła ze społecznościami oryginalnymi o rozmiarze różnym niż 0 dla trójkąta Sierpińskiego o $N = 42$ [16].

przez liczbę jego sąsiadów oraz wagi połączeń z nimi. Mówimy, że węzły należą do tej samej klasy, jeżeli mają taką samą liczbę sąsiadów, którzy należą do tych samych klas. Inaczej mówiąc oznacza to, że listy sąsiadów węzłów należących do tych samych klas muszą być jednakowe. Spełnienie tego warunku jest równoznaczne z uwzględnieniem nie tylko najbliższych sąsiadów danego węzła, ale także sąsiadów tych sąsiadów, itd. Podobnie jak oryginalnie analizowany układ reprezentujemy w postaci grafu, także otrzymane klasy stanów można zaprezentować w postaci grafu.

Zaproponowana metoda wyznaczania klas stanów została użyta do grafów reprezentujących przestrzeń stanów zadanych układów klasycznych, takich jak układ spinów [11, 12], rondo [12] czy konformacje cząsteczki polimerowej [13] oraz układu kwantowego, którego przykładem jest model Hubbarda [14].

Dla wszystkich tych układów ewolucję układu w czasie można przedstawić w postaci błędzenia przypadkowego w przestrzeni stanów. W stanie stacjonarnym prawdopodobieństwa wszystkich stanów tworzących określoną klasę są jednakowe, co umożliwia analizę określonych własności układu w jego równoważnej reprezentacji za pomocą klas. Istnienie klas, jak pokazano, wynika bezpośrednio z symetrii układu. Ich wyznaczenie możliwe jest dla dowolnych wartości parametrów opisujących procesy zachodzące w układzie. Struktura klas nie ulegnie zmianie, jeżeli parametry te przyjmą inne możliwe wartości. Przykładowo, struktura sieci klas dla cząsteczki polimerowej, dyskutowana w pracy [13], jest taka sama w szerokim zakresie natężenia pola elektrycznego.

W swoich pracach pokazałam, że metoda znajdowania klas może być użyteczna także dla innych grafów. Za jej pomocą dokonałam klasyfikacji elementarnych automatów komórkowych [15] oraz redukcji sieci reprezentujących symetryczne fraktale [16]. W pracy [17], nie omawianej w tym opracowaniu, ta sama procedura została także zastosowana do sieci Boole'a. Metoda może stanowić użyteczne narzędzie pozwalające na analizę układu w jego równoważnej postaci w reprezentacji klas, która dla układów wykazujących symetrię topologiczną będzie miała mniejszy rozmiar.

F Omówienie pozostałych osiągnięć naukowo - badawczych

F.1 Przed uzyskaniem stopnia doktora

W czasie studiów doktoranckich, pod kierunkiem prof. dr. hab. Krzysztofa Kułakowskiego, zajmowałam się zagadnieniem wędrówki łańcuchów polimerowych w żelu agarozowym pod wpływem silnych pól. W ramach pracy doktorskiej wykonałam szereg pomiarów prędkości i współczynnika dyfuzji łańcuchów DNA w za-

leżności od natężenia pola zewnętrznego. Wyniki pomiarów znalazły się w pracach [31–34]. Na różnych etapach badań przeprowadziliśmy eksperymenty obejmujące szeroki zakres długości łańcuchów DNA oraz natężeń zewnętrznego pola elektrycznego. Pozwoliły one na wyznaczenie zależności prędkości oraz współczynnika dyfuzji od tych parametrów.

Wyniki eksperymentalne stanowiły punkt odniesienia dla opracowanego modelu geometracji elektroforezy żelowej w silnych polach [31–33, 35]. W pracy [31] wprowadziliśmy koncepcję średniej drogi swobodnej łańcucha polimerowego pomiędzy kolejnymi zahaczeniami na włóknach żelu, w którym cząsteczka się porusza. Wielkość ta posłużyła do korekty wyrażen na prędkość i współczynnik dyfuzji w przypadku silnych pól, który opisywany jest przez model geometracji wprowadzony w pracy [36].

Praca [35] stanowiła rozwinięcie wcześniejszej pracy z uwzględnieniem możliwości podwójnego zahaczenia cząsteczki na włóknie żelu.

W pracy [32] wprowadziliśmy z kolei układ równań różniczkowych opisujących prawdopodobieństwo wielokrotnego zahaczenia łańcucha na włóknach żelu.

Obliczenia analityczne wprowadzone w dwóch wspomnianych pracach zostały zebrane i użyte do interpretacji wyników eksperymentalnych w pracy [33].

Przeprowadziliśmy także symulacje komputerowe zaproponowanego przez nas modelu elektroforezy żelowej oraz innych modeli, zgodnie z którymi odbywa się wędrówka łańcuchów polimerowych w innych zakresach długości łańcuchów i natężeń pola elektrycznego. Otrzymane wyniki przedstawione zostały w pracach [34, 37–40]. Na szczególną uwagę zasługują tu prace [38] i [39], które poświęcone były przedstawieniu opracowanego przez nas automatu komórkowego umożliwiającego symulację procesu elektroforezy w silnych polach. W przypadku pierwszej z nich był to automat jednowymiarowy, w drugiej natomiast – automat dwuwymiarowy. Przeprowadzone symulacje pozwoliły na jakościowe odtworzenie wyników eksperymentalnych.

Część prac omawianych w tym podrozdziale [33, 34, 39, 40] ukazała się po uzyskaniu przeze mnie tytułu doktora, stanowi jednak integralną część badań wykonywanych przed jego uzyskaniem.

F.2 Po uzyskaniu stopnia doktora

Po uzyskaniu stopnia doktora zajmowałam się jeszcze przez pewien czas tematyką związaną z biologią. W tym czasie powstały prace dotyczące modelowania formowania sieci polimerowej [41, 42] oraz PCR-u [43]. W przypadku sieci polimerowych skonstruowaliśmy diagram fazowy obrazujący rozkład wielkości porów w funkcji

parametrów modelu, tj. długości i liczby łańcuchów. Otrzymany rozkład zgodny jest z teorią perkolacji [44]. Jeżeli natomiast chodzi o pracę dotyczącą reakcji łańcuchowej polimerazy (PCR) [43] przeprowadziłam symulację, zgodnie z zaproponowanym przez nas modelem, odtwarzające wyniki eksperymentalne [45] wydajności badanego procesu.

Zainteresowania biologią znalazły także wyraz we współpracy w ramach grantu zamawianego Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego (2006-2009) „Zastosowanie współczesnej genomiki funkcjonalnej i bioinformatyki do charakteryzacji i tworzenia modeli procesów biologicznych o istotnym znaczeniu w medycynie i rolnictwie”. Wynikiem tej współpracy jest praca [46] dotycząca badań nad ekspresją genów istotnych w stanach depresyjnych w specyficznych obszarach mózgu pod wpływem wybranych antydepresantów.

Kolejnym zagadnieniem, którym się zajmowałam było badanie własności sieci Archimedesa $(3, 12^2)$ z Isingowskim wiązaniem antyferromagnetycznym [47]. Obliczenia dotyczyły zależności temperaturowych podatności magnetycznej i ciepła właściwego. Zidentyfikowano również kilka periodycznych stanów podstawowych o niezerowej gęstości frustracji. Wyniki pozwoliły stwierdzić, że nieporządek topologiczny czy też nieporządek wiązań nie jest koniecznym warunkiem występowania fazy szkła spinowego.

W późniejszym czasie, pracując w zespole prof. dr. hab. Krzysztofa Kułakowskiego, prowadziłam symulacje wybranych procesów społecznych. Wśród badanych zagadnień można wyróżnić modelowanie układów komunikacyjnych [48–50], zachowań społecznych [51–55] czy analizę struktury sieci społecznej [56]. Część z tych prac wykonana została w ramach grantu SOCIONICAL (2009-2013) – Complex Socio-Technical System in Ambient Intelligence realizowanego w ramach FP7. W pracy [48] badaliśmy korelacje czasowo-przestrzenne ruchu na obwodnicy Madrytu. Pokazaliśmy, że są one najmniejsze w godzinach wieczornych (między 18 a 20) i związane są z dużymi zmianami prędkości uczestników ruchu. Obszar ten stanowi granicę pomiędzy różnymi reżimami ruchu.

Praca [49] dotyczyła z kolei modelowania ruchu z wykorzystaniem automatu komórkowego. Pokazaliśmy w niej istnienie przejścia fazowego w przestrzeni parametrów modelu pomiędzy fazą ruchu płynnego i układu nieprzejezdnego. W pracy zastosowana została także metoda wyznaczania klas stanów [11–17] do zmniejszenia rozmiaru analizowanego układu.

Trzecia z prac związanych z modelowaniem układów komunikacyjnych [50] dotyczyła korelacji występujących pomiędzy uczestnikami tłumu. Pokazaliśmy w niej, że istnienie lokalnego porządku świadczy o występowaniu zachowań kolektywnych. Innymi słowy w fazie uporządkowanej ruchu dochodzi do wzrostu uporządkowania

krótkozasięgowego, podczas gdy w fazie nieuporządkowanej korelacje przestrzenne są mniejsze i poszczególne osoby poruszają się z różnymi prędkościami.

Praca [51] dotyczyła optymalnej strategii zachowania osób w sytuacji zagrożenia. Jako możliwe wzorce zachowania przyjęliśmy zachowanie egoistyczne, pasywne bądź współpracę z innymi osobami. Pokazaliśmy, że społeczności wyłaniają się w sytuacji, gdy poszczególne osoby komunikują się ze sobą podejmując wspólne działania. Pokazaliśmy także, że dynamika komunikacji zależy od poziomu tolerancji poszczególnych osób. Z kolei w pracy [52] wykonaliśmy analizę podziału na społeczności dzieci w różnym wieku należących do tej samej klasy w szkole oraz nauczycieli na podstawie danych eksperymentalnych zebranych w szkołach w Meksyku. Otrzymane wyniki pokazują jak podział ten zmienia się wraz z wiekiem pod względem płci osób należących do tej samej grupy.

Innym podjętym przez nas zagadnieniem, dyskutowanym w pracy [53], jest typowy czas oczekiwania w kolejce, jeżeli na jej początku mogą się pojawić osoby spoza kolejki. Przeprowadzone badania dotyczyły kolejki osób oraz kolejki samochodów. Otrzymane wyniki pokazują, że rozkład czasów oczekiwania jest bezskalowy, co w szczególności oznacza występowanie bardzo długich czasów oczekiwania.

Kolejna praca z tego cyklu [54] poświęcona była zagadnieniu rozpowszechniania opinii w modelu Axelroda [57] z modyfikacją dotyczącą sposobu wyznaczania prawdopodobieństwa akceptowania bądź odrzucania danej mody na podstawie liczby sąsiadów o zgodnych poglądach. Modyfikacja ta doprowadziła do zaniku fazy uporządkowanej obserwowanej we wcześniejszych pracach, np. [58].

W pracy [55] przeprowadziliśmy analizę tzw. efektu Simmla [59–61], czyli upodobnienia klas niższych do elit oraz dążenia tej drugiej do oryginalności, na podstawie analizy popularności imion w USA. Pokazaliśmy, że popularność cechy (imienia) pojawiająca się w węźle sieci o wysokim stopniu (odpowiadającym elicie) przyczynia się do chwilowego wzrostu jej popularności w innych węzłach, po czym cecha ta stopniowo zanika.

Nasze badania układów społecznych, jak wspomniano, dotyczyły także struktury sieci społecznych. W pracy [56] pokazaliśmy, że graf społeczny portalu LiveJournal jest bezskalowy, sklasteryzowany i asortatywny. Cechy te powodują, że jest on podobny do grafu krawędziowego [62, 63] skonstruowanego dla sieci bezskalowej. Zależność współczynnika klasteryzacji od stopnia wierzchołka dla obu tych sieci wykazuje ten sam charakter, co sugeruje, że grafy krawędziowe skonstruowane na sieciach bezskalowych stanowią poprawną reprezentację rzeczywistych układów społecznych.

Prace wchodzące w skład osiągnięcia zaznaczono tłustym drukiem.

Literatura

- [1] Newman M.E.J., "Modularity and community structure in networks", Proceedings of the National Academy of Sciences USA 103 (2006) 8577
- [2] Fortunato S., Barthelemy M., "Resolution limit in community detection", Proceedings of the National Academy of Sciences USA 104 (2007) 3641
- [3] Krawczyk M.J., Kułakowski K., e-print: "Communities in networks - a continuous approach", arXiv:0709.0923
- [4] **Krawczyk M.J., "Differential equations as a tool for community identification", Physical Review E 77 (2008) 065701(R)**
- [5] **Krawczyk M.J., "Application of the differential equations method for identifying communities in sparse networks", Computer Physics Communications 181 (2010) 1702**
- [6] Kułakowski K., Gawroński P., Gronek P., "The Heider balance: A continuous approach", International Journal of Modern Physics C 15(2005) 707
- [7] Marvel S.A., Kleinberg J., Kleinberg R.D., Strogatz S.H., "Continuous-time model of structural balance", Proceedings of the National Academy of Sciences USA 108 (2011) 1771
- [8] Newman M.E.J., "Analysis of weighted networks", Physical Review E 70 (2004) 056131
- [9] Newman M.E.J., Girvan M., "Finding and evaluating community structure in networks", Physical Review E 69 (2004) 026113
- [10] Duch J., Arenas A., "Community detection in complex networks using extremal optimization", Physical Review E 72 (2005) 027104
- [11] **Krawczyk M.J., "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**
- [12] **Krawczyk M.J., "Symmetry induced compression of discrete phase space", Physica A 390 (2011) 2181**
- [13] **Krawczyk M.J., "Static and dynamic properties of discrete systems with compressed state space; A polymer chain as an example", The European Physical Journal B 86 (2013) 246**

-
- [14] **Krawczyk M.J., "Symmetry-driven compression of the set of states of a Hubbard ring", *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 349 (2014) 63**
- [15] **Krawczyk M.J., "New aspects of symmetry of elementary cellular automata", *Chaos, Solitons and Fractals* 78 (2015) 86**
- [16] **Krawczyk M.J., "Communities and classes in symmetric fractals", *International Journal of Modern Physics C*, 26 (2015) 1550025**
- [17] Krawczyk M.J., "Classes of states of discrete systems", *International Journal of Modern Physics C*, (2015) w druku; arXiv:1405.3919
- [18] Borgatti S.P., Everett M.G., "The class of all regular equivalences: Algebraic structure and computation", *Social Networks* 11 (1989) 65
- [19] Kripke, S., Semantical considerations on modal logic, *Acta Philosophica Fennica* 16, 83 (1963)
- [20] Ising E., "Beitrag zur theorie des ferromagnetismus", *Zeitschrift fur Physics* 31 (1925) 253
- [21] Wu F.Y., "The Potts model", *Reviews of Modern Physics* 54 (1982) 235
- [22] Shimomura Y., Miyahara S., Furukawa N., "Novel ground states in an antiferromagnetic double-exchange model on a triangular lattice", *Science and Technology of Advanced Materials* 7 (2006) 26
- [23] de Gennes P.G., "Scaling Concepts in Polymer Physics", Cornell University Press, New York, 1996
- [24] Newman M.E.J., Barkema G.T., "Monte Carlo Methods in Statistical Physics", Clarendon Press, Oxford, 1999
- [25] van Kampen N.G., "Stochastic Processes in Physics and Chemistry", Elsevier Science Publisher B.V., Amsterdam, 1981
- [26] Havlin S., Weiss G.H., Kiefer J.E., Dishon M., "Exact enumeration of random walks with traps", *Journal of Physics A* 17 (1984) L347
- [27] Wolfram S. "A New Kind of Science", Wolfram Media, 2002
- [28] Wolfram S., "Theory and Applications of Cellular Automata", World Scientific Publishing Co. Ltd., 1986

- [29] Khaetskii A.V., Nazarov Y.V., "Spin relaxation in semiconductor quantum dots", *Physical Review B* 61 (2000) 12639
- [30] Fortunato S. and Barthelemy M., "Resolution limit in community detection", *Proceedings of the National Academy of Sciences U.S.A.* 104 (2007) 3641
- [31] Krawczyk M.J., Dulak J., Kułakowski K., "Mean free path and peak dispersion in the geometration motion in gel electrophoresis", *Electrophoresis* 23 (2002) 182
- [32] Paściak P., Krawczyk M.J., Kopeć M., Dulak J., Kułakowski K., "Gel electrophoresis at high fields", *Acta Physica Polonica B* 34 (2003) 3533
- [33] Krawczyk M.J., Dulak J., Paściak P., Kułakowski K., "Diffusion constant in gel electrophoresis at high fields", *Electrophoresis* 25 (2004) 789
- [34] Krawczyk M.J., Paściak P., Dydejczyk A., Kułakowski K., Dulak J., "Gel electrophoresis of DNA - new measurements and the repton model at high fields", *Acta Physica Polonica B* 36 (2005) 1653
- [35] Krawczyk M.J., Kułakowski K., "How geometration reduces the velocity of DNA in gel electrophoresis", *Theory in Biosciences* 121 (2002) 231
- [36] Popelka S., Kabátek Z., Viovy J.-L., Gas B., *Journal of Chromatography A* 838 (1999) 45
- [37] Paściak P., Krawczyk M.J., Kułakowski K., "Velocity distribution in the Duke-Rubinstein model", *International Journal of Modern Physics C* 13 (2002) 829
- [38] Krawczyk M.J., Kułakowski K., Maksymowicz A.Z., "New cellular automaton designed to simulate geometration in gel electrophoresis", *Computer Physics Communications* 147 (2002) 354
- [39] Krawczyk M.J., Kułakowski K., "High field electrophoresis - computer simulations", *Computer Physics Communications* 163 (2004) 172
- [40] Paściak P., Krawczyk M.J., Gudowska-Nowak E., Kułakowski K., "Diffusion of DNA molecules in gel at high electric fields", *Journal of Biological Physics* 31 (2005) 365
- [41] Krawczyk M.J., Kułakowski K., "Pores in a two-dimensional network of DNA strands - computer simulation", *Lecture Notes in Computer Science* 42 (2006) 3889

- [42] Krawczyk M.J., Kułakowski K., "Formation of DNA networks - computer simulations", *Acta Physica Polonica B* 38 (2007) 1813
- [43] Krawczyk M.J., Kułakowski K., "Off-lattice simulation of the solid phase DNA amplification", *Computer Physics Communications* 170(2) (2005) 131
- [44] Stauffer D., A. Aharony, "Introduction to Percolation Theory", 2nd Ed., Taylor and Francis, London 1994
- [45] Adessi C., Matton G., Ayala G., Turcatti G., Mermoud J.-J., Mayer P., Kawashima E., "Solid phase DNA amplification: characterization of primer attachment and amplification mechanisms", *Nucleic Acids Research* 28 (2002) e87
- [46] Gąska M., Kuśmider M., Solich J., Faron-Górecka A., Krawczyk M.J., Kułakowski K., Dziedzicka-Wasylewska M., "Analysis of region-specific changes in gene expression upon treatment with citalopram and desipramine reveals temporal dynamics in response to antidepressant drugs at the transcriptome level", *Psychopharmacology* 223 (2012) 281
- [47] Krawczyk M.J., Malarz K., Kawecka-Magiera B., Maksymowicz A.Z., Kułakowski K., "Spin glass properties of an Ising antiferromagnet on the Archimedean (3,122) lattice", *Physical Review B* 72 (2005) 24445
- [48] Krawczyk M.J., Beltran Ruiz C., Kułakowski K., "Situations in traffic - how quickly they change", *Central European Journal of Physics* 9 (2011) 1452
- [49] Krawczyk M.J., Kułakowski K., "Coarse-grained cellular automaton for traffic systems", *International Journal of Modern Physics C* 24 (2013) 1350011
- [50] Gawroński P., Malarz K., Krawczyk M.J., Malinowski J., Kupczak A., Sikora W., Kułakowski K., Wąs J., Kantelhardt J., "Strategies in crowd and crowd structure", *Acta Physica Polonica A* 123 (2013) 522
- [51] Krawczyk M.J., Malarz K., Korff R., Kułakowski K., "Communication and trust in the bounded confidence model", *Lecture Notes in Artificial Intelligence* 6421 (2010) 90
- [52] Krawczyk M.J., del Castillo-Mussot M., Hernández-Ramírez E., Naumis G.G. and Kułakowski K., "Heider balance, asymmetric ties, and gender segregation", *Physica A* (2015) *w druku*
- [53] Krawczyk M.J., Gronek P., Nawojczyk M. and Kułakowski K., "If Others Jump to the Queue Front, How Long I Will Wait?", *Acta Physica Polonica A* 127 (2015) 95

-
- [54] Krawczyk M.J., Kułakowski K., "On a combinatorial aspect of fashion", Acta Physica Polonica A 123 (2013) 560
- [55] Krawczyk M.J., Dydejczyk A., Kułakowski K., "The Simmel effect and babies' names", Physica A 395 (2014) 384
- [56] Krawczyk M.J., Muchnik L., Mańka-Krasoń A., Kułakowski K., "Line graphs as social networks", Physica A 390 (2011) 2611
- [57] Axelrod R., "The Evolution of Cooperation", Basic Books, New York 1984
- [58] Radillo-Díaz A., Pérez L.A., del Castillo-Mussot M., "Axelrod models of social influence with cultural repulsion", Physical Review E 80 (2009) 066107
- [59] Simmel G., "Fashion", International Quarterly 10 (1904) 130
- [60] Pedone R., Conte R., "The Simmel effect: imitation and avoidance in social hierarchies", Lecture Notes in Artificial Intelligence 1979 (2000) 149
- [61] Pedone R., Conte R., "Dynamics of status symbols and social complexity", Social Science Computer Review 19 (2001) 249
- [62] Whitney H., "Congruent graphs and the connectivity of graphs", American Journal of Mathematics 54 (1932) 150
- [63] Evans T.S., Lambiotte R., "Line graphs, link partitions and overlapping communities", Physical Review E 80 (2009) 016105

Małgorzata Krawczyk

II Wykaz opublikowanych prac naukowych lub twórczych prac zawodowych oraz informacja o osiągnięciach dydaktycznych, współpracy naukowej i popularyzacji nauki

G Publikacje wchodzące w skład osiągnięcia naukowego

Jestem jedynym autorem wszystkich poniższych prac.

1. Krawczyk M.J., "Differential equations as a tool for community identification", *Physical Review E* 77 (2008) 065701(R)
2. Krawczyk M.J., "Application of the differential equations method for identifying communities in sparse networks", *Computer Physics Communications* 181 (2010) 1702
3. Krawczyk M.J., "Topology of the space of periodic ground states in the anti-ferromagnetic Ising and Potts models in selected spatial structures", *Physics Letters A* 374, (2010) 2510
4. Krawczyk M.J., "Symmetry induced compression of discrete phase space", *Physica A* 390 (2011) 2181
5. Krawczyk M.J., "Static and dynamic properties of discrete systems with compressed state space; A polymer chain as an example", *The European Physical Journal B* 86 (2013) 246
6. Krawczyk M.J., "Symmetry-driven compression of the set of states of a Hubbard ring", *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 349 (2014) 63
7. Krawczyk M.J., "New aspects of symmetry of elementary cellular automata", *Chaos, Solitons and Fractals* 78 (2015) 86
8. Krawczyk M.J., "Communities and classes in symmetric fractals", *International Journal of Modern Physics C* 26 (2015) 1550025

H Wykaz innych (nie wchodzących w skład osiągnięcia wymienionego w pkt D) opublikowanych prac naukowych oraz wskaźniki dokonań naukowych

H.1 Publikacje naukowe w czasopismach znajdujących się w bazie Journal Citation Reports (JCR)

- Krawczyk M.J., del Castillo-Mussot M., Hernández-Ramírez E., Naumis G.G. and Kułakowski K., "Heider balance, asymmetric ties, and gender segregation", *Physica A* (2015) *w druku*, IF: 1.732
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na przeprowadzeniu obliczeń dotyczących podziału grup społecznych (klas w szkole w Meksyku) pod względem płci. Mój udział procentowy szacuję na 30%.
- Gawroński P., Krawczyk M.J. and Kułakowski K., "Emerging communities in networks - a flow of ties", *Acta Physica Polonica B* 46 (2015) 911, IF: 1.00
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu symulacji dotyczących wyznaczania społeczności. Mój udział procentowy szacuję na 30%.
- Krawczyk M.J., Gronek P., Nawojczyk M. and Kułakowski K., "If Others Jump to the Queue Front, How Long I Will Wait?", *Acta Physica Polonica A* 127 (2015) 95, IF: 0.604
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu programu i przeprowadzeniu symulacji dla modelu szacującego czas oczekiwania w kolejce w sytuacji gdy na jej początku pojawiają się osoby spoza kolejki. Mój udział procentowy szacuję na 60%.
- Krawczyk M.J., "Classes of states of discrete systems", *International Journal of Modern Physics C* (2015), *w druku*, IF: 1.125
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na zebraniu i usystematyzowaniu materiału dotyczącego wyznaczania klas węzłów w sieciach wykazujących symetrię, prezentowanego we wcześniejszych publikacjach. Ponadto w pracy pokazałam zastosowanie metody dla sieci Boole'a. Jestem autorką tekstu publikacji. Mój udział procentowy wynosi 100%.
- Malarz K., Krawczyk M.J., Kułakowski K., "Influence of long-range interactions on strategy selection in crowd", *Acta Physica Polonica B Proceedings Supplement* 7 (2014) 371, IF: brak
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na udziale w dyskusji wyników. Mój udział procentowy szacuję na 10%.

- Krawczyk M.J., Malinowski J., Kułakowski K., "Size dependence of the largest distance between random points", *Acta Physica Polonica B Proceedings Supplement 7* (2014) 331, IF: brak
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na przeprowadzeniu symulacji dla przyjętego modelu. Mój udział procentowy szacuję na 70%.
- Krawczyk M.J., Dydejczyk A., Kułakowski K., "The Simmel effect and babies' names", *Physica A* 395 (2014) 384, IF: 1.722
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu symulacji dla zaproponowanego modelu. Mój udział procentowy szacuję na 60%.
- Krawczyk M.J., Kułakowski K., "Coarse-grained cellular automaton for traffic systems", *International Journal of Modern Physics C* 24 (2013) 1350011, IF: 1.125
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu mapy rzeczywistego miasta oraz przeprowadzeniu symulacji numerycznych. Brałam także udział w tworzeniu tekstu pracy. Mój udział procentowy szacuję na 70%.
- Krawczyk M.J., Kułakowski K., "On a combinatorial aspect of fashion", *Acta Physica Polonica A* 123 (2013) 560, IF: 0.531
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu programu i przeprowadzeniu symulacji dla zaproponowanego modelu. Mój udział procentowy szacuję na 70%.
- Gawroński P., Malarz K., Krawczyk M.J., Malinowski J., Kupczak A., Sikora W., Kułakowski K., Wąs J., Kantelhardt J., "Strategies in crowd and crowd structure", *Acta Physica Polonica A* 123 (2013) 522, IF: 0.531
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na zbadaniu charakteru przejścia fazowego za pomocą analizy multifraktalnej. Mój udział procentowy szacuję na 10%.
- Gąska M., Kuśmider M., Solich J., Faron-Górecka A., Krawczyk M.J., Kułakowski K., Dziedzicka-Wasylewska M., "Analysis of region-specific changes in gene expression upon treatment with citalopram and desipramine reveals temporal dynamics in response to antidepressant drugs at the transcriptome level", *Psychopharmacology* 223 (2012) 281, IF: 4.077
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na przeprowadzeniu analizy statystycznej otrzymanych wyników eksperymentalnych. Mój udział procentowy szacuję na 10%.
- Krawczyk M.J., Beltran Ruiz C., Kułakowski K., "Situations in traffic - how quickly they change", *Central European Journal of Physics* 9 (2011) 1452, IF: 0.909

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu danych eksperymentalnych. Brałam także udział w tworzeniu tekstu pracy. Mój udział procentowy szacuję na 60%.

- Krawczyk M.J., Muchnik L., Mańka-Krasoń A., Kułakowski K., "Line graphs as social networks", *Physica A* 390 (2011) 2611, IF: 1.373
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na przeprowadzeniu analizy własności modelowej sieci w celu porównania z własnościami sieci rzeczywistej. Mój udział procentowy szacuję na 30%.
- Krawczyk M.J., Malarz K., Korff R., Kułakowski K., "Communication and trust in the bounded confidence model", *Lecture Notes in Artificial Intelligence* 6421 (2010) 90, IF: brak
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na analizie występowania społeczności w zależności od wartości parametru modelu oraz brałam udział w dyskusji otrzymanych wyników. Mój udział procentowy szacuję na 30%.
- Krawczyk M.J., "Communities in Social Networks", *IEEE Conference Proceeding ICBAKE 2009*, IF: brak
Celem pracy było porównanie otrzymywanej struktury społeczności (*ang. communities*) dla wybranych sieci społecznych, z wykorzystaniem dwóch różnych metod znajdowania społeczności. W pracy pokazano także, iż pomimo jednakowego charakteru rozkładu stopni wierzchołków we wszystkich analizowanych sieciach, rozkład funkcji pełnionych przez wierzchołki sieci jest różny. Mój udział procentowy wynosi 100%.
- Krawczyk M.J., Kułakowski K., "Formation of DNA networks - computer simulations", *Acta Physica Polonica B* 38 (2007) 1813, IF: 0.664
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu programu i przeprowadzeniu symulacji tworzenia sieci DNA. Brałam także udział w opracowaniu wyników. Mój udział procentowy szacuję na 70%.
- Krawczyk M.J., Kułakowski K., "Pores in a two-dimensional network of DNA strands - computer simulation", *Lecture Notes in Computer Science* 42 (2006) 3889, IF: brak
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu programu i przeprowadzeniu symulacji tworzenia sieci DNA. Brałam także udział w opracowaniu wyników. Mój udział procentowy szacuję na 70%.
- Paściak P., Krawczyk M.J., Gudowska-Nowak E., Kułakowski K., "Diffusion of DNA molecules in gel at high electric fields", *Journal of Biological Physics* 31 (2005) 365, IF: 1.371

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na przeprowadzeniu symulacji ruchu w stałym polu. Mój udział procentowy szacuję na 20%.

- Krawczyk M.J., Kułakowski K., "Off-lattice simulation of the solid phase DNA amplification", *Computer Physics Communications* 170(2) (2005) 131, IF: 1.644

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na przeprowadzeniu symulacji wydajności powielania DNA. Mój udział procentowy szacuję na 70%.

- Krawczyk M.J., Malarz K., Kawecka-Magiera B., Maksymowicz A.Z., Kułakowski K., "Spin glass properties of an Ising antiferromagnet on the Archimedean (3,122) lattice", *Physical Review B* 72 (2005) 24445, IF: 3.185

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na przeprowadzeniu obliczeń ciepła właściwego i podatności dla badanego układu. Mój udział procentowy szacuję na 30%.

- Krawczyk M.J., Paściak P., Dydejczyk A., Kułakowski K., Dulak J., "Gel electrophoresis of DNA - new measurements and the repton model at high fields", *Acta Physica Polonica B* 36 (2005) 1653, IF: 0.807

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na zaplanowaniu, wykonaniu oraz opracowaniu wyników eksperymentu. Mój udział procentowy szacuję na 30%.

- Krawczyk M.J., Kułakowski K., "High field electrophoresis - computer simulations", *Computer Physics Communications* 163 (2004) 172, IF: 1.515

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu programu oraz przeprowadzeniu symulacji. Brałam także udział w interpretacji wyników. Mój udział procentowy szacuję na 70%.

- Krawczyk M.J., Dulak J., Paściak P., Kułakowski K., "Diffusion constant in gel electrophoresis at high fields", *Electrophoresis* 25 (2004) 789, IF: 3.743

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na uczestnictwie w planowaniu, wykonaniu oraz opracowaniu eksperymentu. Mój udział procentowy szacuję na 40%.

- Paściak P., Krawczyk M.J., Kopeć M., Dulak J., Kułakowski K., "Gel electrophoresis at high fields", *Acta Physica Polonica B* 34 (2003) 3533, IF: 0.752

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na przeprowadzeniu eksperymentu oraz opracowaniu jego wyników. Mój udział procentowy szacuję na 40%.

- Krawczyk M.J., Kułakowski K., Maksymowicz A.Z., "New cellular automaton designed to simulate geometration in gel electrophoresis", *Computer Physics Communications* 147 (2002) 354, IF: 1.204

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na przeprowadzeniu symulacji numerycznych dla zaproponowanego automatu komórkowego oraz udziale w dyskusji otrzymanych wyników. Mój udział procentowy szacuję na 60%.

- Krawczyk M.J., Kułakowski K., "How geometration reduces the velocity of DNA in gel electrophoresis", *Theory in Biosciences* 121 (2002) 231, IF: 0.705
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na przeprowadzeniu obliczeń numerycznych czasów poszczególnych etapów ześlizgiwania cząsteczki polimerowej z przeszkód. Mój udział procentowy szacuję na 70%.
- Paściak P., Krawczyk M.J., Kułakowski K., "Velocity distribution in the Duke-Rubinstein model", *International Journal of Modern Physics C* 13 (2002) 829, IF: 0.784
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na udziale w interpretacji wyników. Mój udział procentowy szacuję na 20%.
- Krawczyk M.J., Dulak J., Kułakowski K., "Mean free path and peak dispersion in the geometration motion in gel electrophoresis", *Electrophoresis* 23 (2002) 182, IF: 4.325
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na analizie i opracowaniu wyników eksperymentalnych. Mój udział procentowy szacuję na 60%.

H.2 Wynalazki oraz wzory użytkowe i przemysłowe, które uzyskały ochronę i zostały wystawione na międzynarodowych lub krajowych wystawach lub targach

brak

H.3 Monografie, publikacje naukowe w czasopismach międzynarodowych lub krajowych innych niż znajdujące się w bazie JCR

- Kułakowski K., Krawczyk M.J., Gawroński P., "Hate - no choice. Agent simulations", ed. by C. T. Lockhardt, Nova Sci. Publ., NY 2010, pp. 137-158
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wyznaczeniu społeczności dla badanego układu. Mój udział procentowy szacuję na 30%.
- Krawczyk M.J., Kułakowski K., "Communities in networks - a continuous approach", arXiv:0709.0923v5
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na przeprowadzeniu symulacji

znajdowania społeczności w sieciach modelowych. Mój udział procentowy szacuję na 80%.

H.4 Opracowania zbiorowe, katalogi zbiorów, dokumentacja prac badawczych, ekspertyz, utworów i dzieł artystycznych

brak

H.5 Sumaryczny impact factor według listy Journal Citation Reports (JCR), zgodnie z rokiem opublikowania:

49.61 (14.182+35.428)

H.6 Liczba cytowań publikacji według bazy Web of Science (WoS):

43

H.7 Indeks Hirscha według bazy Web of Science (WoS):

6

H.8 Kierowanie międzynarodowymi i krajowymi projektami badawczymi oraz udział w takich projektach

- grant SOCIONICAL (2009-2013) – Complex Socio-Technical System in Ambient Intelligence realizowany w ramach FP7
- grant zamawiany Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego (2006-2009) „Zastosowanie współczesnej genomiki funkcjonalnej i bioinformatyki do charakteryzacji i tworzenia modeli procesów biologicznych o istotnym znaczeniu w medycynie i rolnictwie”

H.9 Międzynarodowe i krajowe nagrody za działalność naukową albo artystyczną

- Nagroda Rektora indywidualna II stopnia za osiągnięcia naukowe za rok 2009

- Nagroda Rektora indywidualna III stopnia za osiągnięcia naukowe za rok 2011
- Nagroda Rektora zespołowa I stopnia za osiągnięcia naukowe za rok 2006
- Nagroda Rektora zespołowa II stopnia za osiągnięcia naukowe za rok 2008
- Nagroda Rektora zespołowa II stopnia za osiągnięcia naukowe za rok 2007
- Nagroda Rektora zespołowa II stopnia za osiągnięcia naukowe za rok 2005
- Nagroda Rektora zespołowa III stopnia za osiągnięcia naukowe za rok 2014
- Nagroda Rektora zespołowa III stopnia za osiągnięcia naukowe za rok 2012

H.10 Wygłoszenie referatów na międzynarodowych i krajowych konferencjach tematycznych

Planowane:

- "Statistics on babies' names reflects the traditional regions in the United States", 19th International Academic Conference, September 16-19, 2015, Florence, Italy
- "Społeczności i klasy węzłów w sieciach samopodobnych", Minisymposium Fizyki Statystycznej, September 8th, 2015, Cracow, Poland

Wygłoszone:

- "New aspects of symmetry of elementary cellular automata", Summer Solstice, June 27-29, 2013, Warsaw, Poland
- "On some consequences of symmetry in discrete systems with a circular polymer as an example", Summer Solstice, June 6-10, 2011, Turku, Finland
- "Communities in five networks: a meta-analysis", SunBelt XXX, June 29 - July 4, 2010, Riva del Garda, Italy
- "Looking for communities in networks: two algorithms, three kinds of noise", European Conference on Complex Systems ECCS'09, September 21-25, 2009, Warwick, UK
- "Communities in social networks", ICBAKE 2009, June 25-28, 2009, Cieszyn, Poland
- "Communities in networks", Frontiers in modern physics and its applications, May 28-29, 2009, Cracow, Poland

I Dorobek dydaktyczny i popularyzatorski oraz informacja o współpracy międzynarodowej habilitanta

I.1 Uczestnictwo w programach europejskich oraz innych programach międzynarodowych i krajowych

Patrz pkt H.8

I.2 Aktywny udział w międzynarodowych i krajowych konferencjach naukowych

Wykłady - patrz pkt H.10.

Plakaty prezentowane na konferencjach międzynarodowych:

- Krawczyk M.J., "Communities and classes in symmetric fractals", European Conference on Complex Systems ECCS'14, September 22 – 26, 2014, Lucca, Italy
- Krawczyk M.J., "Communities and classes in symmetric fractals", International Conference in Statistical Physics, July 7 – 11, 2014, Rhodes, Greece
- Krawczyk M.J., "Local symmetries and compression of discrete systems", European Conference on Complex Systems ECCS'13, September 16 – 20, 2014, Barcelona, Spain
- Krawczyk M.J., "Symmetry-driven reduction of the number of states in discrete systems", European Conference on Complex Systems ECCS'12, September 3 – 7, 2012, Brussels, Belgium
- Krawczyk M.J., Kułakowski K., "Culture dissemination with repulsion", European Conference on Complex Systems ECCS'12, September 3 – 7, 2012, Brussels, Belgium
- Krawczyk M.J., Kułakowski K., "How symmetry reduces the size of state space", European Conference on Complex Systems ECCS'11, September 12–16, 2011, Vienna, Austria
- Krawczyk M.J., Kułakowski K., "Networks of ground states of frustrated systems", European Conference on Complex Systems ECCS'10, September 13 – 17, 2010, Lisbon, Portugal
- Krawczyk M.J., Kułakowski K., "Looking for communities in networks: two algorithms, three kinds of noise", European Conference on Complex Systems ECCS'09, September 21 – 25, 2009, Warwick, UK

- Krawczyk M.J., "Identification of communities in social networks", The 2009 International Conference on Advances in Social Networks Analysis and Mining, July 20 – 22, 2009, Athens, Greece
- Krawczyk M.J., Dziejzicka-Wasylewska M., Kuśmider M. and Kułakowski K., "Differential equations method for clustering gene expression time-courses", Computational Biology and Bioinformatics, September 22 – 26, 2008, Cagliari, Italy
- Krawczyk M.J., "Subnetworks in genetic networks", International Conference in Statistical Physics, July 14 – 18, 2008, Kolympari, Greece
- Krawczyk M.J., International workshop on "Detection and visualization of communities in large complex networks", March 13 – 14, 2008, Louvain-la-Neuve, Belgium
- Krawczyk M.J., Kuśmider M., Dziejzicka-Wasylewska M., Kułakowski K., "Corregulation of selected genes in the rat hippocampus and cerebral cortex", German Conference on Bioinformatics, September 26 – 28, 2007, Potsdam, Germany
- Krawczyk M.J., Summer School on Socio-Econo-Physics, September 12 – 15, 2007, Windberg, Germany
- Krawczyk M.J., Kuśmider M., Dziejzicka-Wasylewska M., Kułakowski K., "Modularity of clustering of a gene expression network", Systems Biology: Global Regulation of Gene Expression, Cold Spring Harbor Laboratory, March 29 - April 1, 2007, New York, USA
- Krawczyk M.J., Kułakowski K., "Pores in a two-dimensional network of DNA strands - computer simulation", ICCS 2006 : "Advancing Science through Computation", May 28 – 31, 2006, Reading, UK
- Krawczyk M.J., Paściak P., Kułakowski K., Dulak J., Dydejczyk A., "Gel electrophoresis of DNA - new measurements and the particle model", 17th Marian Smoluchowski Symposium on Statistical Physics, September 4 – 9, 2004, Zakopane, Poland
- Krawczyk M.J., Paściak P., Dulak J., Kopeć M., Kułakowski K., "Gel electrophoresis at high fields", 15th Marian Smoluchowski Symposium on Statistical Physics: Fundamentals and Applications, September 7 – 12, 2002, Zakopane, Poland

- Krawczyk M.J., Kopeć M., Kułakowski K., "High field electrophoresis - computer simulations", 7th Granada Seminar: Modeling of complex systems, September 2 – 7, 2002, Granada, Spain
- Krawczyk M.J., Dulak J., Kułakowski K., "Mean free path and band dispersion in the geometration motion in gel electrophoresis", ICES-2001: an Electrophoretic Odyssey, June 10 – 13, 2001, Verona, Italy
- Krawczyk M.J., Kułakowski K., "How geometration reduces the velocity of DNA in gel electrophoresis", ISPPP-2000: 20th International Symposium on the Separation and Analysis of Proteins, Peptides and Polynucleotides, November 5 – 8, 2000, Ljubljana, Slovenia

I.3 Udział w komitetach organizacyjnych międzynarodowych i krajowych konferencji naukowych

- członek komitetu organizacyjnego „International Conference on Computer Information Systems and Industrial Management - CISIM 2010”, October 8 – 10, 2010, Krakow, Poland
- członek komitetu organizacyjnego „International Multi-Conference on Biometrics and Kansei Engineering - IEEE/ICBAKE 2009”, June 25 – 28, 2009, Cieszyn, Poland
- członek komitetu naukowo-organizacyjnego „2. Ogólnopolskiego sympozjum fizyka w ekonomii i naukach społecznych FENS 2006”, April 21 – 22, 2006, Krakow, Poland

I.4 Otrzymane nagrody i wyróżnienia inne niż wymienione w pkt H.9

brak

I.5 Udział w konsorcjach i sieciach badawczych

brak

I.6 Kierowanie projektami realizowanymi we współpracy z naukowcami z innych ośrodków polskich i zagranicznych oraz we współpracy z przedsiębiorcami, innymi niż wymienione w pkt H.8

brak

I.7 Udział w komitetach redakcyjnych i radach naukowych czasopism

brak

I.8 Członkostwo w międzynarodowych i krajowych organizacjach oraz towarzystwach naukowych

brak

I.9 Osiągnięcia dydaktyczne i w zakresie popularyzacji nauki lub sztuki

Prowadzone zajęcia dydaktyczne

- Język C++, wykład i laboratorium dla studentów Wydziału Fizyki i Informatyki Stosowanej (od 2013)
- Język Python, wykład i laboratorium w ramach przedmiotów obieralnych dla studentów Wydziału Fizyki i Informatyki Stosowanej (od 2005)
- Programowanie obiektowe (język Java), wykład dla studentów Wydziału Fizyki i Informatyki Stosowanej (od 2008) , laboratorium dla studentów Wydziału Fizyki i Informatyki Stosowanej (od 2005)
- Inżynierskie metody numeryczne, laboratorium dla studentów Wydziału Fizyki i Informatyki Stosowanej (od 2009)
- Metody numeryczne, laboratorium dla studentów Wydziału Fizyki i Informatyki Stosowanej (od 2007)
- Podstawy informatyki, wykład dla studentów Wydziału Fizyki i Informatyki Stosowanej (od 2004) oraz Międzywydziałowej Szkoły Energetyki (2004-2008) oraz laboratorium dla studentów Wydziału Fizyki i Informatyki Stosowanej (2003-2008) oraz Międzywydziałowej Szkoły Energetyki (2003-2008)

- Fizyka, ćwiczenia rachunkowe dla studentów Wydziału Elektrotechniki, Automatyki, Informatyki i Elektroniki (2001-2005)
- Fizyka, laboratorium dla studentów różnych wydziałów, pracownia fizyczna I i II (1999-2000)

I.10 Opieka naukowa nad studentami i lekarzami w toku specjalizacji

- Promotor prac magisterskich
 - „Multiwyszukiwarka publikacji”, 2014
 - „Graficzna analiza danych”, 2012
 - „Wizualizacja algorytmów klasteryzacji”, 2012
 - „Interaktywny program do nauki języka Java”, 2010
 - „Analiza szeregów czasowych ekspresji genów - model dynamiczny oraz wybrane algorytmy klasteryzacji”, 2009
 - „Analiza bioinformatyczna profili ekspresji genów”, 2009
- Recenzent prac magisterskich i inżynierskich na Wydziale Fizyki i Informatyki stosowanej AGH, łączna suma wykonanych recenzji: 16

I.11 Opieka naukowa nad doktorantami w charakterze opiekuna naukowego lub promotora pomocniczego

brak

I.12 Staże w zagranicznych i krajowych ośrodkach naukowych lub akademickich

- Staż w Martin-Luther-Universität, Halle, Niemcy, 5 – 12 lutego, 2012
- Staż w Zakładzie Biochemii Uniwersytetu w Wiedniu, 10–18 listopada, 2000

I.13 Wykonane ekspertyzy lub inne opracowania na zamówienie

brak

I.14 Udział w zespołach eksperckich i konkursowych

brak

I.15 Recenzowanie projektów międzynarodowych i krajowych

brak

I.16 Recenzowanie publikacji w czasopismach międzynarodowych i krajowych

- Physics Letters A, liczba recenzji: 2, 2010, 2014
- Physica A, liczba recenzji: 1, 2014
- European Physical Journal B, liczba recenzji: 1, 2013
- Modern Physics Letters B, liczba recenzji: 1, 2013

I.17 Inne osiągnięcia, nie wymienione w pkt I.1-I.16

Działalność organizacyjna na rzecz Wydziału Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH

- organizator seminarium wydziałowego (od października 2005)
- organizator seminarium Zespołu Układów Złożonych WFiIS AGH (od października 2005)
- członek komisji bibliotecznej (2013)
- członek Okręgowej Komisji Wyborczej na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej (2012)
- członek Rady Wydziału (kadencja 2012-2016)

Małgorzata Krawczyk