

SPRAWOZDANIE Z DZIAŁALNOŚCI NAUKOWO-BADAWCZEJ KATEDRY METOD KOMPUTEROWYCH UMK W ROKU 2001

I. TEMATY BADAWCZE

1. Liczba realizowanych tematów: 14
2. Liczba zakończonych tematów: 0.
3. Działalność dotyczy badań podstawowych; nie przewidujemy wdrożeń ani przekazania rezultatów do wykorzystania poza publikacjami.
4. Nie przekazano żadnych tematów do wdrożenia, prowadzimy jednak współpracę z firmą FQS Poland zainteresowaną naszymi algorytmami do data mining. Przewidujemy powstanie komercyjnego systemu opartego o opracowane przez nas algorytmy analizy i wizualizacji danych.
5. Nie zaniechano realizacji żadnego tematu.

II. CZĘŚĆ OPISOWA

II.1. Przyczyny zaniechania tematów prowadzonych i rozpoczętych w 2001 roku.

W 2001 roku nie zaniechaliśmy realizacji żadnego tematu.

II.2. Krótka charakterystyka i podsumowanie wyników uzyskanych w 2001 roku.

Problematyka badawcza KMK (od końca 2001 roku zmieniliśmy nazwę na Katedra Informatyki Stosowanej) skoncentrowana jest wokół czterech grup tematycznych.

A) Interdyscyplinarny program badawczy dotyczący metod inteligencji obliczeniowej (computational intelligence)

Metody te obejmują szeroko pojęte zagadnienia modelowania sieci neuronowych i systemów uczących się. Jest to część interdyscyplinarnego programu badawczego kierowanego przez prof. W. Ducha, finansowanego w części dotyczącej rozwoju i zastosowań algorytmów inteligencji obliczeniowej przez realizowany w 2001 roku grant KBN „Teoria i zastosowania metod inteligencji obliczeniowej”, którego głównym celem jest stworzenie narzędzi do data mining. Szczegółowy opis wielu projektów związanych z modelowaniem sieci neuronowych i innych systemów uczących się zamieściliśmy na stronie WWW pod adresem:

<http://www.phys.uni.torun.pl/kmk/projects/kmk-proj.html>

Główne zadania badawcze należące do tej grupy tematycznej to:

II.2.1. Odkrywanie wiedzy w bazach danych za pomocą metod inteligencji obliczeniowej.

Jest to obszerny temat, w którym istotną rolę gra zarówno rozwijanie nowych algorytmów, jak i gromadzenie danych oraz praktyczne zastosowania. Jest to część bardzo modnej obecnie dziedziny, określanej jako „data mining”, czyli dogłębna analiza danych lub odkrywanie wiedzy w bazach danych. W roku 2001:

- Opublikowaliśmy bardzo obszerną pracę na temat rozwijanych przez nas algorytmów; spotkała się ona z dużym uznaniem, czego wyrazem była propozycja napisania artykułu do Proceedings of IEEE, najbardziej prestiżowego pisma IEEE (współautorami mają być R. Setiono, Singapore i J. Żurada, Louisville).
- Ulepszono metody ekstrakcji reguł oparte na kryterium separowalności (SSV), prowadzące do sprawnego algorytmu typu drzewa decyzyjnego. Jest to część praca doktorskiej Krzysztofa Grąbczewskiego, która powinna zostać zakończona w 2002 roku.
- Rozwinęliśmy znacznie metody oparte na szukaniu charakterystycznych prototypów, wykorzystujące nowe miary podobieństwa. Pozwala to na wprowadzenie nowego rodzaju reguł opartych na podobieństwie do prototypów. Są to reguły bardziej ogólne niż te, które można otrzymać za pomocą reguł rozmytych. W szczególności różne funkcje odległości dają się wyrazić przez funkcje przynależności logiki rozmytej, ale niektóre z tych funkcji, np. probabilistycznie określone miary odległości, prowadzą do zupełnie nowych funkcji przynależności a inne nie dają się wcale wyrazić w języku logiki rozmytej.
- Kontynuowano współpracę z firmą FQS Poland (Fujitsu Group) zainteresowaną stworzeniem nowego systemu do dogłębnej analizy danych (data mining), opartego na naszych algorytmach. System ten jest już w pierwszej wersji na ukończeniu. Pozwoli nam to na łatwiejsze porównywanie i integrację przyszłych algorytmów, ułatwiając korzystanie z poszczególnych, rozwijanych dotychczas niezależnie programów.
- W. Duch wygłosił szereg tutoriali na najpoważniejszych konferencjach w tej dziedzinie, np. “Extraction of knowledge from data using computational intelligence methods” (2 g.) na International Joint Conference on Neural Networks, 14-19.07.2001, Washington D.C., i na International Conference on Artificial Neural Networks (ICANN), Vienna, 21-25.08.2001.
- Dokonailiśmy przeglądu systemów data mining (w ramach pracy licencjackiej).

Temat ten rozwijany jest przy współpracy z prof. M. Ishikawą z Kyushu Institute of Technology (podpisaliśmy formalną umowę o współpracy z Graduate School of Life Science and Systems Engineering, Kyushu Institute of Technology, Kitakyushu, Japonia), prof. Y. Hayashi z Meiji University, Tokyo, i prof. R. Setiono z National University of Singapore.

Publikacje:

1. Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K, A new methodology of extraction, optimization and application of crisp and fuzzy logical rules. IEEE Transactions on Neural Networks 12 (2001) 277-306
2. Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K, Grudziński K, Jankowski N, Naud N, Extraction of Knowledge from Data using Computational Intelligence Methods. In: International Conference on Artificial Neural Networks (ICANN), Vienna, 21-25.08.2001 (tutorial, 63 str).
3. Duch W, Grąbczewski K, Adamczak R, Grudziński K, Hippe Z.S. Rules for melanoma skin cancer diagnosis. Komputerowe Systemy Rozpoznawania, KOSYR, Wrocław 2001, pp. 59-68
4. Duch W, Grudziński K.
Prototype based rules - new way to understand the data.
Int. Joint Conference on Neural Networks, Washington D.C. 14-18.07. 2001, pp. 1858-1863

II.2.2. Rozwój teorii i zastosowań systemów neurorozmytych.

Kontynuowano prace nad ulepszaniem uniwersalnym systemem neurorozmytych, Feature Space Mapping (FSM). Systemy neurorozmyte uczą się tak, jak sieci neuronowe a jednocześnie mogą korzystać z reguł logiki rozmytej i klasycznej, pozwalających na sekwencyjne procesy rozumowania wraz z użyciem predefiniowanej wiedzy w modelach uczących się, podobnie jak robi się to w systemach ekspertowych. W szczególności:

- Mgr. R. Adamczak ukończył i obronił pracę doktorską, której tematem było zastosowanie modelu FSM do analizy danych doświadczalnych.
- Mgr. R. Adamczak przystosował oprogramowanie systemu FSM do wymogów opracowanego w naszej grupie pakietu programów GhostMiner, służącego do dogłębnej analizy danych.

Po zakończeniu tej pracy dr Adamczak rozpoczął w październiku 2001 pracę nad zastosowaniami metod inteligencji obliczeniowej w zagadnieniach bioinformatyki jako stażysta podoktorancki w Children's Hospital Research Foundation, Cincinnati, USA. Zamierzamy jednak nadal kontynuować problematykę systemów neurorozmytych w przyszłości.

Ostatnie publikacje związane z tematem to:

1. Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K, A new methodology of extraction, optimization and application of crisp and fuzzy logical rules. IEEE Transactions on Neural Networks 12 (2001) 277-306
2. Duch W, Grąbczewski K, Adamczak R, Grudziński K, Hippe Z.S. Rules for melanoma skin cancer diagnosis. Komputerowe Systemy Rozpoznawania, KOSYR, Wrocław 2001, pp. 59-68
3. Duch W, Adamczak R, Diercksen GHF, Constructive density estimation network based on several different separable transfer functions. 9th European Symposium on Artificial Neural Networks (ESANN), Brugge 2001. De-facto publications, pp. 107-112
4. R. Adamczak, Zastosowanie sieci neuronowych do klasyfikacji danych doświadczalnych. Praca doktorska, KMK UMK, Toruń 2001.

II.2.3. Rozwój nowych algorytmów uczenia sieci neuronowych.

Kontynuowaliśmy prace nad nowymi modelami sieci neuronowych i nowymi procedurami uczenia. W szczególności w 2001 roku:

- Zorganizowano sesję specjalną na temat sieci neuronowych wykorzystujących różnorodne funkcje transferu na konferencji ESANN w Brugii, Belgia, w kwietniu 2001.
- Rozwinięto model ontogenicznej sieci neuronowej IncNet wykorzystujący kilka różnych funkcji transferu i wykonano wstępne testy pokazujące możliwości takiego podejścia w szukaniu najprostszego opisu danych.
- Opracowano model sieci FSM optymalizującej funkcje transferu po dodaniu kolejnego neuronu i uzyskano wstępne rezultaty numeryczne.
- Opracowano ogólną idee systemów heterogenicznych, korzystających z elementów dających jakościowo różne wkłady do końcowego rozwiązania. Typowe sieci neuronowe korzystają z neuronów tego samego typu. Systemy heterogeniczne nie ograniczają się do sieci neuronowych, mogą to być drzewa decyzji lub systemy oparte na podobieństwie.
- Opracowano metodę wprowadzania poprawek a posteriori do wyników otrzymanych z sieci neuronowych (S. Skrzynecki, praca mgr).

Publikacje związane z tym tematem:

1. Duch W, Jankowski N,
Transfer functions: hidden possibilities for better neural networks.
9th European Symposium on Artificial Neural Networks (ESANN), Brugge 2001. De-facto publications, pp. 81-94
2. Duch W, Adamczak R, Diercksen GHF,
Constructive density estimation network based on several different separable transfer functions.

9th European Symposium on Artificial Neural Networks (ESANN), Brugge 2001. De-facto publications, pp. 107-112

3. Jankowski N, Duch W,
Optimal transfer function neural networks.
9th European Symposium on Artificial Neural Networks (ESANN), Brugge 2001. De-facto publications, pp. 101-106
4. S. Skrzypecki, *Optymalizacja prawdopodobieństw apriorycznych w zastosowaniu do klasyfikacji danych doświadczalnych.* KMK UMK, Toruń 6/2001

II.2.4. Zastosowanie metod inteligencji obliczeniowej do analizy danych.

Badania te są kontynuacją badań realizowanych w poprzednich latach w ramach zakończonego w 2000 roku grantu KBN badań dotyczących analizy danych medycznych.

- Otrzymaliśmy bardzo proste i dokładne wyniki dotyczące raka skóry, analizując kilkoma metodami dane otrzymane z Rzeszowa.
- Przeanalizowano otrzymane z Korei Południowej dane dotyczące diagnoz różnych odmian schizofrenii – zastosowany test nie zawierał jednak wystarczających informacji.
- Otrzymaliśmy szereg nowych danych, które są obecnie analizowane: dane dotyczące bioprzyswajalności z Japonii, dane archeologiczne z Austrii.
- Porównano diagnozy za pomocą ontogenicznych sieci neuronowych i drzew decyzji.

Projekt COST, *Knowledge Exploration in Science and Technology*, opracowany przy współpracy z prof. Diercksenem z Instytutu Astrofizyki Maxa Plancka w Garching koło Monachium został zatwierdzony w połowie 2001 roku. Chęć udziału w tym projekcie zapowiedziało 25 grup z 11 krajów Europy, procedura dołączania do projektu jest dość skomplikowana i nie wszystkie grupy zostały już oficjalnie jego uczestnikami. Dotyczy on zastosowania metod sztucznej inteligencji do odkrywania wiedzy w astronomicznych, fizycznych i chemicznych bazach danych. Liczymy na zdobycie wielu nowych danych w ramach tego projektu.

Publikacje związane z tym tematem:

1. Chojnowski A, Duch W (2000) *Analiza szeregów czasowych obrazów.* Biocybernetyka 2000, Tom 6: Sieci neuronowe (red. W. Duch, J. Korbicz, L. Rutkowski i R. Tadeusiewicz), rozdz. II.17, pp. 569-588
2. Jankowski N, Gomula J, *Simultaneous differential diagnoses basing on MMPI inventory using neural networks and decision trees methods.* In L. Bobrowski, J. Doroszewski, E. Marubini, and N. Victor, editors, *Statistics and Clinical Practice*, Warsaw, Poland, June 2000, pp. 89-95

II.2.5. Ontogeniczne sieci neuronowe

Dr N. Jankowski rozwijał dalej ontogeniczną sieć neuronową IncNet. W 2001 roku:

- Ulepszył oprogramowanie tak, że można je łatwo używać dzięki graficznemu interfejsowi, integrując je z innymi programami opracowanymi w naszej Katedrze.
- Prowadził test z heterogeniczną wersją tego modelu, nazwaną Optimal Transfer Function (OTF) network.
- Ulepszył algorytm uczenia się tej sieci.

Publikacje związane z tym tematem:

1. Jankowski N, Duch W,
Optimal transfer function neural networks.
9th European Symposium on Artificial Neural Networks (ESANN), Brugge 2001. De-facto publications, pp. 101-106

II.2.6. Alternatywne podejście do układów adaptujących się

Temat ten rozwija się coraz szerzej, w ramach współpracy dwustronnej pomiędzy Niemcami a Polską (IBMBF-KBN) oraz badań statutowych i badań własnych. Początkowo związany był głównie z metodami opartymi na podobieństwie i realizowany w ramach pracy doktorskiej przez mgr K. Grudzińskiego (praca jest na ukończeniu). Naszym celem jest integracja wielu metod inteligencji obliczeniowej, wyrażających z metod uczenia maszynowego (machine learning, ML), neuronowych metod uczenia, statystyki wielowymiarowej, i innych dziedzin. Integracji tej można dokonać w oparciu o metody oparte na podobieństwie (SBM, Similarity Based Methods).

- Rozwinięto metody meta-uczenia, polegające na automatyzacji szukania najlepszego modelu opartego na schemacie SBM i uzyskano pierwsze rezultaty numeryczne.
- Zbadano możliwości tworzenia komitetów modeli SBM i uśredniania wielu modeli w celu poprawienia ich stabilności.
- Opracowano metody selekcji i ważenia cech oraz selekcji prototypów, pozwalające na uczenie się on-line.
- Prowadzono wstępne prace nad analizą układów złożonych, opartą o idee syntezy funkcji podobieństwa obliczanej jako minimalny koszt transformacji jednej struktury w drugą. Zagadnienie to będzie tematem pracy doktorskiej mgr M. Marcza. Udało się znaleźć efektywną metodę obliczania podobieństwa i poszukiwana jest efektywna metoda optymalizacji kosztów poszczególnych transformacji z punktu widzenia rezultatów klasyfikacji obiektów złożonych.
- Rozpoczęto badania nad metodami selekcji cech opartych na teorii informacji. Metody takie konieczne są w przypadku danych zawierających bardzo wiele cech, np. danych bioinformatycznych. Programujemy (przy współpracy z dr J. Biesiadą z Pol. Gliwickiej) różne zaawansowane metody filtracji cech i będziemy porównywać ich efektywność z metodami wykorzystującymi konkretne modele klasyfikacji.

Publikacje związane z tym tematem:

1. Duch W, Grudziński K,
Ensembles of Similarity-Based Models.
Advances in Soft Computing, Physica Verlag (Springer), pp. 75-85
2. Duch W, Grudziński K.
Meta-learning: searching in the model space.
Proc. of the Int. Conf. on Neural Information Processing, Shanghai, 2001, Vol. I, pp. 235-240

II.2.7. Wizualizacja i redukcja wymiarowości danych.

A. Naud ukończył pracę doktorską na ten temat. W szczególności:

- Program do wizualizacji danych metodą MDS zawiera obecnie trzy różne funkcje stresu.
- Zastosowano sprawny kwadratowo zbieżny algorytm minimalizacji funkcji stresu.
- Program umożliwia inicjalizację konfiguracji za pomocą analizy czynników głównych jak i różne starty przypadkowe.
- Istnieje wersja interakcyjna, pozwalająca na wybieranie podobszarów i ich dalsze mapowanie.
- Wersja ta umożliwia również dodawanie dodatkowych punktów z gaussowskiego rozkładu wokół istniejących wektorów danych.
- Zbadano możliwości wizualizacji granic decyzji klasyfikatorów. Zastosowano te metody do wizualizacji różnych danych medycznych.
- Powstała wersja zintegrowana z pozostałymi programami (nie zawiera jeszcze wszystkich opcji).
- Opracowano nowe podejście do wizualizacji bardzo dużych zbiorów danych w oparciu o połączenie techniki kwantyzacji wektorowej (LVQ, Learning Vector Quantization) i mapowania względnego. Podejście to jest obecnie testowane.

Publikacje związane z tym tematem:

1. A. Naud,
Neural and statistical methods for multidimensional data visualization.
Praca doktorska, KMK UMK, Toruń 2001.

B) Metody fizyki i chemii komputerowej rozwiązywania równań opisujących własności i zachowanie się atomów i cząsteczek.

Prof. J. Wasilewski z współpracownikami prowadził badania w ramach tematu: „Struktura energetyczna małych cząsteczek”, zajmując się zastosowaniami teorii funkcjonałów gęstości (DFT – Density Functional Theory) do obliczeń struktury energetycznej i widm elektronowo-oscyłacyjnych cząsteczek. Uczestniczył też w badaniach kierowanych przez prof. K. Jankowskiego z Instytutu Fizyki UMK, dotyczących nowych metod opisu efektów korelacji elektronowej w stanach niezamknięto-powłokowych atomów i cząsteczek.

Dr J. Meller prowadził badania nad zastosowaniem metod obliczeniowych typu dynamiki molekularnej oraz metod bioinformatyki rozpoznawania struktur i funkcji białek, metod dopasowania sekwencji w biologii molekularnej i genomice. Do połowy 2001 roku dr Meller pracował w Computer Science Department, Cornell University w USA, na stażu podoktoranckim. Następnie został zatrudniony jako *assistant professor* w Children's Hospital Research Foundation, zajmując się przede wszystkim bioinformatyką.

Najważniejsze uzyskane wyniki w tej grupie tematów to:

II.2.8. Teoretyczne badania struktury energetycznej małych cząsteczek.

Prof. Wasilewski kontynuował badania stanów oscylacyjnych i efektów sprzężenia oscylacyjno-rotacyjnego w małych cząsteczkach metodami wykraczającymi poza elementarne przybliżenie harmoniczne, w szczególności metodami pseudospektralnymi (DVR – Discrete Variable Representation). Wymieniona tematyka wchodzi m. innymi w zakres pracy doktorskiej mgr S. Zelka *Zastosowanie technik wielociałowych w badaniach oscylacji molekularnych*.

- Kontynuowano badania stanów oscylacyjnych i efektów sprzężenia oscylacyjno-rotacyjnego w małych cząsteczkach metodami wykraczającymi poza elementarne przybliżenie harmoniczne, w szczególności metodami pseudospektralnymi (DVR – Discrete Variable Representation). Wymieniona tematyka wchodzi m. innymi w zakres pracy doktorskiej mgr S. Zelka *Teoria funkcjonałów gęstości i reprezentacja zmiennej dyskretnej w badaniach stanów oscylacyjnych cząsteczek*.
- W oparciu o prace grupy Lighta zbudowano zespół programów komputerowych realizujących podejście Discrete Variable Representation (DVR) do numerycznego wyznaczania poziomów oscylacyjnych cząsteczek dwu- i trój-atomowych. Przebadano stabilność numeryczną algorytmów w różnych warunkach. W roku 2001 program ten został, w ramach pracy doktorskiej mgr S. Zelka, rozbudowany o obszerną część graficzną, służącą do wizualizacji i identyfikacji stanów oscylacyjnych. Wyniki uzyskane tym programem włączone zostaną do kilku publikacji.

Publikacje związane z tym tematem:

1. S. Zelek, L. Cyrnek, J. Wasilewski: Anharmonic effects in vibrational states of SO₂ molecule, Book of Abstracts od Austrian-Czech-Polish-Slovak Symposium on Quantum Chemistry, Ustroń-Jaszowiec, 37.30.09.2001
 2. S. Zelek, L. Cyrnek, J. Wasilewski: Lower vibrational states of SO₂. Density Functional and Discrete Variable Representation Approach. – w przygotowaniu do publikacji
- Kontynuowano badania teoretyczne niższych stanów elektronowych gliksalu (C₂O₂H₂) przy zastosowaniu różnych wariantów metody funkcjonałów gęstości (DFT). Do obliczeń energii przejścia elektronowego S₀ – T₁ zastosowano, z dobrym wynikiem, modyfikowany funkcjonal hybrydowy typu B3. Do wyznaczenie powierzchni otwartopowłokowego stanu singletowego zastosowano wariant czasowo zależny teorii (TD DFT); tego typu zastosowania są w literaturze nieliczne. Obliczenia teoretyczne mają na celu interpretację wyników doświadczalnych, otrzymanych przez prof. Heldta w ramach współpracy międzynarodowej najnowszą techniką laserowo indukowanej fluorescencji” (LIF – Laser Induced Fluorescence). Wyniki te wchodzi w

(LIF – Laser Induced Fluorescence). Wyniki te wchodzą w zakres pracy doktorskiej mgr S. Zelka, część jest już opublikowana.

Publikacje związane z tym tematem:

1. S. Zelek. *Teoria funkcjonałów gęstości i reprezentacja zmiennej dyskretnej w badaniach stanów oscylacyjnych cząsteczek*. Praca doktorska, KMK UMK, Toruń 2001; obrona przewidywana jest na początku 2002 roku przed Radą Wydziału Chemii UMK.
2. S. Zelek, J. Wasilewski: Theoretical analysis of electronic-vibrational spectra of glyoxal molecule, Book of Abstracts od Austrian-Czech-Polish-Slovak Symposium on Quantum Chemistry, Ustroń-Jaszowiec, 37.30.09.2001

II.2.9. Opracowanie nowych metod opisu efektów korelacji elektronowej.

Prowadzone były badania układów modelowych w ramach nowych wersji wieloreferencyjnych metod sprzężonych klasterów (MRCC - Multi-Reference Coupled Clusters) w sformułowaniach walencyjnie-universalnym, stanowo-universalnym i stanowo-specyficznym. Badania dotyczyły wpływu bazy jedno-cząstkowej (formy orbitali molekularnych) na zbieżność rozwinięcia klasterowego dla stanów podstawowych i wzbudzonych, ze szczególnym uwzględnieniem występowania tzw. stanów obcych („intruderów”). Prof. Wasilewski jest aktywnym uczestnikiem seminarium naukowego dotyczącego teorii korelacji.

Publikacje związane z tym tematem:

K. Jankowski, K. Rubiniec, J. Wasilewski, Coupled cluster energy dependence of reference-state choice: impact of cluster operator structure. Chem. Phys. Letters **343** 365-374 (2001)

II.2.10. Symulacje komputerowe w fizyce atomowo-molekularnej.

W ramach badań własnych prof. Wasilewski z zespołem prowadził badania w następujących kierunkach:

- Prowadzono prace rozpoznawcze i studialne w następujących kierunkach: oddziaływanie tlenu molekularnego z atomami i małymi cząsteczkami; zastosowanie różnego typu funkcjonałów mieszanych w metodzie DFT; zastosowanie metod DFT do opisu stanów otwartopowłokowych; zastosowanie reprezentacji zmiennej dyskretnej (DVR - Discrete Variable Representation) do numerycznego wyznaczania poziomów oscylacyjnych małych cząsteczek; jonorodniki aromatyczne jako hipotetyczny składnik „ciemnej materii” w przestrzeni kosmicznej.
- Przeprowadzono obszerne badania budowy przestrzennej i widm oscylacyjnych krzemowych analogów etylenu. Zastosowano szereg wariantów teorii funkcjonałów gęstości i rozbudowane bazy funkcyjne (typu cc-TZP). Stwierdzono istotną zmianę budowy elektronowej $H_2Si=SiH_2$ w stosunku do $H_2C=CH_2$, wynikającą ze zmiany hybrydyzacji centrum krzemowego. Wyniki przygotowywane są do publikacji.
- Kontynuowano prace nad interpretacją widma elektronowo-oscylacyjnego pirazyny ($C_4N_2H_4$), uzyskanego metodą laserowo indukowanej fluorescencji (LIF). Zastosowano szereg wariantów teorii funkcjonałów gęstości.
- Regularnie odbywało się seminarium naukowe *Metody komputerowe w badaniach układów wieloatomowych*, prowadzone wspólnie z Zakładem Chemii Kwantowej (Wydział Chemii UMK); członkowie zespołu prof. Wasilewskiego wygłosili na nim w omawianym okresie cykl referatów dotyczący podstaw i zastosowań teorii funkcjonałów gęstości.

Publikacje związane z tym tematem:

M. Walda, *Badania kwantowo-mechaniczne struktury i oscylacyjnych widm w podczerwieni analogów krzemowych etylenu*, praca magisterska (obrona: 6. 2001)

R. Zieliński, *Teoretyczne badania widma elektronowo-oscylacyjnego pirazyny metodami funkcjonałów gęstości*, praca magisterska (obrona przewidziana 6.2002)

II.2.11. Biologia molekularna i bioinformatyka.

W ramach współpracy z grupą prof. Rona Elbera z Cornell University, gdzie dr Meller przebywał na stażu w latach 1999-2001, kontynuowano badania nad rozwojem algorytmów symulacyjnych typu dynamiki molekularnej oraz zastosowaniem tych algorytmów do symulacji białek na wielką skalę. Badania te prowadzono również korzystając z grantu UMK „Klasyczne i kwantowe modele białek hemowych” (J. Meller, główny wykonawca) przy współpracy z Instytutem Fizyki UMK.

Dr Meller rozpoczął badania w zakresie bioinformatyki już kilka lat temu. Po obronie doktoratu w naszej Katedrze dr Adamczak przyłączył się do niego od 10.2001 r. Planujemy szersze zastosowania opracowanych przez nas metod inteligencji obliczeniowej do zagadnień bioinformatycznych.

- Przy współpracy z R. Elberem z Cornell University zaproponowano i rozwinęto szereg nowatorskich metod bioinformatycznych. W szczególności opracowano nowe, efektywne i dokładne, metody rozpoznawania trzeciorzędowych struktur białkowych, nowe algorytmy porównywania sekwencji aminokwasów (problem jednowymiarowy) oraz nowe algorytmy porównywania topologii białek (problem trójwymiarowy). Nowe algorytmy zostały zaimplementowane w kolejnych wersjach pakietu obliczeniowego LOOPP, który jest również dostępną w postaci serwera sieciowego umożliwiającą automatyczną anotację sekwencji genomicznych.
- Dzięki zastosowaniu nowych metod stało się możliwe, między innymi, zidentyfikowanie podobieństwa pomiędzy nowo odkrytymi genami, kontrolującymi fenotypowe zróżnicowanie pomidorów (wielkość owoców), a ludzkimi białkami typu Ras p21, których zaburzenia funkcji prowadzą do niekontrolowanego mnożenia się komórek i w rezultacie do chorób nowotworowych. Artykuł na ten temat trafił na okładkę prestiżowego pisma *Science* a dr Meller wygłosił na ten temat referat na University of California San Francisco, oraz na Rockefeller University, New York w czasie publicznej prezentacji nowego projektu współpracy pomiędzy Cornell University, Rockefeller University i Sloan Cancer Research Center.

Publikacje związane z tym tematem:

1. Meller J, Elber R.
Linear Optimization and a Double Statistical Filter for Protein Threading Protocols.
Proteins Struct. Funct. Gen., 45: 241 - 261 (2001)
2. Meller J,
Molecular Dynamics.
Encyclopedia of Life Sciences, <http://www.els.net> (on-line), ISBN 0-333-72621-9 (print) Nature Publishing Group, 2001 Macmillan Publishers Ltd
3. Meller J, Wagner M, Elber R,
Maximum Feasibility Guideline to the Design and Analysis of Protein Folding Potentials,
Journal of Computational Chemistry, 23: 111 - 118 (2002)
4. Meller J, Elber R,
Protein Recognition by Sequence-to-Structure Fitness: Bridging Efficiency and Capacity of Threading Models.
Advances of Chemical Physics, Computational Methods for Protein Folding (rozdział), edytor R. Friesner, w druku

C) Modelowanie kognitywne (cognitive modeling).

Kognitywistyka powoli rozwija się w Polsce jako odrębna dyscyplina badawcza. Nasze prace w tym zakresie zmierzają w kierunku empirycznie uzasadnionych teorii umysłu w oparciu o modele sieci neuronowych oraz filozoficzne próby zrozumienia koncepcji umysłu i zagadnień dotyczących świadomości. Teoria powinna nie tylko być pomocną w rozwiązaniu podstawowych problemów nauk o poznaniu, lecz również prowadzić do nowych konstrukcji systemów uczących się. Zarysy takiej teorii, w postaci hipotez określających prawdopodobne związki pomiędzy zdarzeniami w mózgu i ich korelacji z percepcją,

wyższymi czynnościami poznawczymi i treścią świadomości, zostały już nakreślone w kilku pracach i wystąpieniach konferencyjnych. Matematyczne metody opisu zdarzeń mentalnych wiążą się z teorią układów złożonych w zastosowaniu do sieci neuronowych z rekurencją.

W 2001 roku realizowano tu dwa tematy:

II.2.12. Neuroinformatyka.

- Na zaproszenie prof. A. Wróbla z Instytut Biologii Eksperymentalnej PAN, prof. Duch wygłosił na 5th Congress of the Polish Neuroscience Society we wrześniu 2001, wykład *Models of topographic map's formation and comparison with experimental data*.
- Dr N. Jankowski nawiązał kontakt z prof. Johnem Taylorem z Center for Neural Networks i przebywał przez 6 tygodni na stażu podoktoranckim zajmując się modelowaniem mechanizmów uwagi i funkcji płatów czołowych. Niestety wysokie ceny mieszkań i sytuacja rodzinna uniemożliwiły mu pełne wykorzystanie 6-miesięcznego stypendium NATO i 2-letniego stypendium Marie Curie, przyznanego przez Unię Europejską na realizację tego projektu.
- Wygłoszono szereg referatów na temat prowadzonych w tej dziedzinie badań:
Duch W, Starlab Laboratory, Brussels, Belgia, 8.05.2001 (dr Erol Sahim), *Mind from brain: psychological spaces and neuroscience*.
Duch W, Komitet Fizyki PAN, Sekcja Fizyki Komputerowej, Warszawa 14.02.2001. Referat: O symulacjach dynamicznych sieci neuronowych, modelach pamięci i jej zaburzeń.
Duch W, Polskie Towarzystwo Akustyczne i Polskie Towarzystwo Fizyczne, UAM Poznań, 23.03.2001. Referat: Pamięć i jej neuronowe modele.
Duch W, Instytut Fizyki UMK, Toruń, 29.03.2001. Referat: Symulacje ludzkiej pamięci.
Duch W, Instytut Filozofii UAM, Poznań, 6-7.04.2001. Jak działa mózg? 10 godzin wykładów, nagrywanych na taśmę wideo.

II.2.13. Modelowanie kognitywne.

- Na zaproszenie doc. S. Kasickiego z Instytut Biologii Eksperymentalnej PAN, W. Duch napisał artykuł „Psychika i Świadomość” dla encyklopedii multimedialnej PWN „Człowiek”, która ukazała się w 2001 roku.
- Prof. Duch przewodniczy komitetowi naukowemu utworzonego przy współpracy z logikami, filozofami i pedagogami z UMK pisma, „Kognitywistyka i media w edukacji”. W 2001 ukazały się dwa numery (razem około 500 stron), w tym jeden całkowicie w języku angielskim. Pismo to ma na celu integrację środowiska osób interesujących się kognitywistyką w Polsce.
- Wspólnie z ekspertami z National Institute of Cancer, Heidelberg, Max Planck Institute for Astrophysics, Monachium, Computer Science Department, Univ. of Ulster (Irlandia), oraz Univ. of Tartu, Estonia, wystąpiliśmy o grant w ramach Unii Europejskiej w programie Future Emerging Technologies, na badania procesów twórczych w sztucznych systemach. Grant nie został w obecnej postaci zatwierdzony i będzie jeszcze raz składany po poprawkach. Jednakże wiele wątków kontynuowanych jest w ramach projektu COST Action 292 'Knowledge Exploration in Science and Technology', w którym bierzemy udział.
- Razem z prof. B. Siemienieckim z Inst. Pedagogiki i Prof. U. Żegleń z Inst. Filozofii UMK powołaliśmy Polskie Towarzystwo Kognitywistyczne. Zebranie założycielskie odbyło się w maju 2001 roku, trwa proces rejestracji sądowej.
- Wygłoszono szereg referatów na temat prowadzonych w tej dziedzinie badań:
Duch W, Polskie Towarzystwo Filozoficzne, UAM Poznań, 5.02.2001. Referat: Neurofilozoficzne rozwiązanie trudnego problemu świadomości.
Duch W, Inst. Filozofii i Socjologii PAN, Warszawa, 9.06.2001. Referat: Szkic teorii umysłu i neurofizjologiczne rozwiązanie trudnego problemu świadomości.
Duch W, Towarzystwo Dynamiki Informacyjnej i Układów Otwartych, Toruń, 11.06.2001. Referat: Modele umysłu i neurobiologia.
Duch W, Czwarty Festiwal Nauki, Wrocław, 22.09.2001. Referat: Jak działa mózg i skąd bierze się umysł? Wykład i dyskusja.

Ostatnie publikacje związane z tematem to:

1. Duch W, *Psychika i świadomość*. Encyklopedia Multimedialna „Człowiek”, PWN, 2001 (7 p).
2. Duch W, *Fizyka umysłu*. Postępy Fizyki, w druku.
3. Duch W (2001) *Sceptycyzm wobec sceptycyzmu (kontynuacja dyskusji o AI)*. Kognitywistyka i Media w Edukacji, w druku.
4. Duch W, *Synchronicity, Mind and Matter*. International Journal of Transpersonal Studies (w druku).

D) Badania w zakresie dydaktyki wspomaganej metodami komputerowymi.

II.2.14. Badania w zakresie dydaktyki wspomaganej metodami komputerowymi.

W 2001 roku wykonano następujące prace:

- Prof. Wasilewski koordynował prace redakcyjne nad Wydziałowym Informatorem ECTS - Studia na Wydziale Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej UMK w roku akademickim 2001/02, ISBN 83-231-1324-6, str. 384, Wydawnictwo UMK, Toruń, 2001 (skład i łamanie: mgr H. Małek z KMK)
- Prof. Wasilewski koordynował prace nad powołaniem i wdrożeniem na Wydziale nowego kierunku fizyka techniczna (w tym specjalności technologie informatyczne), oraz powołaniem nowej formy kształcenia nauczycieli – Międzywydziałowego Studium Matematyczno-Przyrodniczego UMK
- Utrzymujemy i rozszerzamy strony WWW dotyczące wszystkich spraw związanych z komputerami, fizyką komputerową, sieciami neuronowymi, sztuczną inteligencją, kognitywistyką, badaniami nad mózgiem. Ze stron tych korzysta bardzo wiele osób.

Sieci neuronowe, badania nad mózgiem i statystyka:

<http://www.phys.uni.torun.pl/~duch/neural.html> oraz <http://www.phys.uni.torun.pl/neural/neural.html>

Kognitywistyka <http://www.phys.uni.torun.pl/~duch/cognitive.html>

Sztuczna inteligencja i uczenie maszynowe, <http://www.phys.uni.torun.pl/~duch/ai-ml.html>

Oprogramowanie i bazy danych do testów metod inteligencji obliczeniowej

<http://www.phys.uni.torun.pl/~duch/software.html>

Fizyka komputerowa, <http://www.phys.uni.torun.pl/~duch/fiz-komp/index.html>

- W ramach eksperymentów z nauczaniem na odległość udostępniliśmy wiele stron Internetowych z notatkami do wykładów, pod adresem:

<http://www.phys.uni.torun.pl/~duch/Wyklady/index.htm>

1. Duch W, Wykłady wstępne o komputerach i oprogramowaniu, Studium Podyplomowe.
2. Duch W, *Wstęp do kognitywistyki* (wykład monograficzny).
3. Duch W, *Mózg, umysł i zachowanie* (wykład monograficzny).
4. Duch W, *Sztuczna inteligencja* (wykład monograficzny).
5. Duch W, *Inteligencja obliczeniowa* (wykład monograficzny).
<http://www.phys.uni.torun.pl/~duch/Wyklady/index.htm>

- Utrzymujemy również strony WWW dotyczące zagadnień związanych z komputerami i oprogramowaniem. Dziedzina ta, zwana w krajach anglojęzycznych „*information science*”, nie wyodrębniła się jeszcze w Polsce.

Adres: <http://www.phys.uni.torun.pl/~duch/book-fsk.html>

Ze stron tych korzysta bardzo wiele osób (licznik wskazywał ponad 7000 przy końcu 1999 roku i około 1000 nowych załadowań strony miesięcznie). Są to pierwsze książki nadające się jako podręcznik do dziedziny określanej w krajach anglosaskich mianem „information science”, dotyczącej zastosowań komputerów do przetwarzania informacji, i w niektórych ośrodkach akademickich już znalazły takie zastosowanie.

Ostatnia publikacja związana z tym tematem to:

1. M. Berndt-Schreiber, **W. Duch**, A. B. Kwiatkowska, A. Polewczyński, K. Skowronek (2001) *Pokolenie dorastające z komputerem wkracza na uniwersytety - nowe wyzwania edukacyjne*. II Krajowa Konferencja "Technologia informacyjna w zmieniającej się edukacji", 14 - 16 maja 2001 - Toruń.

III. PUBLIKACJE

III.1. W omawianym okresie ukazały się ogółem 32 prace, w tym:

oryginalnych prac badawczych: 15, w tym w recenzowanych wydawnictwach międzynarodowych 11, w tym z listy Filadelfijskiego Instytutu Informacji Naukowej 5, w recenzowanych wydawnictwach krajowych 4, oraz 15 doktoratów, prac magisterskich, raportów i prac popularnonaukowych.

podręczników i skryptów: 0

publikacji naukowo-popularnych: 6

redakcji książek naukowych, tłumaczeń: 0

artykułów, recenzji: 8

prac doktorskich: 3

III.2. Liczba prac przyjętych do druku: 12

Prac wysłanych: 4

III.3. Przykłady publikacji związanych z działalnością naukową KMK:

Podano przy omawianiu poszczególnych zagadnień; pełny spis znajduje się w Załączniku 2b.