

Załącznik Nr 1 do wniosku o finansowanie działalności statutowej
Katedry Metod Komputerowych UMK.

**Informacja o prowadzonych w jednostce w sposób ciągły
badaniach naukowych.**

Katedra Metod Komputerowych jest unikalną jednostką naukowo-dydaktyczną Uniwersytetu Mikołaja Kopernika. Podejmujemy **interdyscyplinarne** programy badawcze oraz organizujemy specjalistyczne wykłady i seminaria dotyczące zastosowań metod komputerowych w naukach ścisłych i humanistycznych oraz w naukach o poznaniu (kognitywistyce). Współpracując z kadrą naukową z różnych dyscyplin naukowych - fizyki, chemii, biologii, geografii, nauk humanistycznych - dążymy do powołania jednostki integrującej wszystkich zainteresowanych zastosowaniami metod komputerowych, Centrum Nauk Komputerowych. Problematyka badawcza KMK skoncentrowana jest wokół kilku głównych tematów:

1. Metod komputerowych w fizyce i chemii.
2. Metod sztucznej inteligencji a w szczególności szeroko pojętych zagadnień modelowania sieci neuronowych.
3. Kognitywistyki (cognitive sciences) i teorii układów złożonych (complex systems theory).
4. Dydaktyki wspomaganej metodami komputerowymi.

W szczególności w 1995 roku rozwijaliśmy następujące tematy:

1. W zakresie metod komputerowych w fizyce i chemii

Prof. Wasilewski z współpracownikami prowadził w ramach tej grupy tematów badania pod ogólnymi hasłami „Struktura energetyczna małych cząsteczek” (grant UMK), oraz „Teoretyczne badania otwartopowłokowych stanów elektronowych cząsteczek” (grant KBN, zakończony zgodnie z planem w połowie roku 1995). Uczestniczył też w badaniach kierowanych przez prof. K. Jankowskiego z Inst. Fizyki UMK, dotyczących opracowania nowych metod opisu efektów korelacji elektronowej w atomach i cząsteczkach. Prof. Wasilewski pracuje również nad symulacjami komputerowymi zagadnień fizyki atomowo-molekularnej oraz zastosowaniem teorii pseudopotencjałów do opisu budowy cząsteczek zawierających cięższe atomy.

Prof. Duch prowadził badania nad rozwojem metod obliczeniowych, algorytmów i programów komputerowych pozwalających uwzględnić korelację elektronową pod ogólnym hasłem „Rozwój metod oddziaływania konfiguracyjnego” w ramach badań własnych i statutowych, współpracując z ośrodkami zagranicznymi w Niemczech,

Francji i Japonii, oraz w ramach grantu: *Rozwój metod wyznaczania energii korelacji opartych na teorii hamiltonianów pośrednich* na współpracę naukową pomiędzy KBN/Le ministre francais des affaires etrangeres. W badaniach tych brał też udział uczestnik Studium Doktoranckiego przy Instytucie Fizyki (od 10/1995 asystent w KMK), mgr. J. Meller. Do spółki z współpracownikami z siedmiu krajów Europy realizowano interdyscyplinarny projekt finansowany w 1995 roku w oparciu o grant komisji Unii Europejskiej w ramach współpracy COST. Projekt dotyczy inteligentnego oprogramowania dla potrzeb chemii komputerowej, a więc połączenia oprogramowania do zastosowań numerycznych z systemami ekspertowymi i sieciami neuronowymi w celu stworzenia systemu ułatwiającego wykonywanie obliczeń chemikom, którzy nie są ekspertami w zakresie metod chemii komputerowej. Prof. Duch jest zastępcą kierownika tego projektu (prof. Diercksen z Instytutu Astrofizyki Maxa Plancka, Garching k. Monachium). Temat ten wchodzi w zakres pracy doktorskiej mgr Karola Grudzińskiego, realizowanej w Instytucie Astrofizyki Maxa Plancka w Garching k. Monachium pod częściową opieką prof. Ducha.

Słowa kluczowe i dyscypliny pokrewne: fizyka teoretyczna, fizyka komputerowa, chemia kwantowa, chemia teoretyczna, chemia komputerowa, symulacje komputerowe.

2. W zakresie metod sztucznej inteligencji a w szczególności szeroko pojętych zagadnień modelowania sieci neuronowych.

Prace nasze dotyczą możliwości zastosowań algorytmów typu sieci neuronowych, logiki rozmytej, algorytmów „pattern recognition” i algorytmów opartych na śladach pamięci (memory-based), jak też fundamentalnych mechanizmów działania struktur adaptujących się, w tym również zagadnień związanych z działaniem mózgu i umysłu. Prof. Duch wraz z asystentami, doktorantami i magistrantami prowadził prace nad nowym, uniwersalnym systemem neurorozmytym. Jest to system uczący się tak, jak sieci neuronowe a jednocześnie zdolny do korzystania z reguł logiki rozmytej, pozwalających na sekwencyjne procesy rozumowania wraz z użyciem predefiniowanej wiedzy w modelach uczących się, podobnie jak robi się to w systemach ekspertowych. Testowano i rozwijano oprogramowanie systemu FSM (Feature Space Mapping) opartego na własnym, oryginalnym podejściu do systemów neurorozmytych, zainspirowanym przez kognitywistykę. Prace te wspierane są przez grant indywidualny KBN na lata 1995-97 pt: „Teoria i zastosowania systemów neurorozmytych”.

W minionym roku pracowaliśmy też nad metodami samoorganizacji i wizualizacji wielowymiarowych danych. Metody te wyrastają z modelu samoorganizującej się sieci neuronowej Kohonena, powiązaliśmy je z procedurami minimalizacji miar zgodności topograficznej przestrzeni danych i niskowymiarowych przestrzeni siatek neuronów (skalowaniem wielowymiarowym i podobnymi nieliniowymi transformacjami). Prowadzimy testy porównawcze różnych wersji tych metod, stosując je między innymi do klasyfikacji w zagadnieniach psychologii poznawczej i psychometrii. Naszym celem jest stworzenie wygodnego systemu do klasyfikacji, analizy i wizualizacji danych biomedycznych i innych.

Część naszych wysiłków badawczych skierowana została w stronę nauk o poznawaniu (kognitywistyki) i próby stworzenia empirycznej teorii umysłu w oparciu o modele sieci neuronowych. W szczególności włączyliśmy się w nurt empirycznych badań nad świadomością. Kontynuowaliśmy współpracę z najlepszymi ośrodkami zajmującymi się tą nową dziedziną (King's College, Londyn oraz Princeton University, NJ). Teoria ta powinna nie tylko być pomocną w rozwiązaniu podstawowych problemów nauk o poznaniu lecz również prowadzić do nowych konstrukcji systemów uczących się i w tym kierunku zmierzają nasze badania. Jej zarysy, 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.

Słowa kluczowe i dyscypliny pokrewne: sieci neuronowe, sztuczna inteligencja, logika rozmyta, systemy neurorozmyte, pattern recognition, systemy ekspertowe, biocybernetyka, nauki o poznaniu, badania nad mózgiem, symulacje komputerowe.

3. W zakresie kognitywistyki (cognitive sciences) i teorii układów złożonych (complex systems theory).

Badania należące do tej grupy tematów mają na celu opracowanie teorii układów złożonych i jej zastosowanie przede wszystkim w zagadnieniach sztucznej inteligencji. Szukamy alternatywnych podejść do adaptacji i opisu działania sieci neuronowych, wykorzystujących metody statystyczne, metody teorii estymacji, metody oparte na lokalnych, nieliniowych transformacjach układów współrzędnych.

Pracowaliśmy nad procedurami uczenia maszynowego wykorzystującymi teorię informacji (informacja Levina, informacja algorytmiczna). Pracujemy również nad modelami wykorzystującymi procesy Markowa (modele HMM i DFA, Discreet Finite Automata) oraz metodami dynamiki symbolicznej do aproksymacji dynamiki sieci neuronowych z rekurencją. Pozwala to na opis zachowania się sieci w postaci ewolucji automatów skończonych a w niektórych przypadkach w postaci reguł logicznych. Metody te są bardzo ważne dla zastosowań teorii układów złożonych (układy dynamiczne, samoorganizujące się stany krytyczne i chaotyczne) do zagadnień kognitywistyki (nauk o poznawaniu) i nauk przyrodniczych.

Wspólnie z pracownikami z innych jednostek UMK dążymy do powołania (w roku akademickim 1996/97) nowego, interdyscyplinarnego kierunku studiów specjalnych w zakresie kognitywistyki. Podstawą tego nowego kierunku powinny stać się badania w zakresie modelowania umysłu oparte na systematycznych przybliżeniach do globalnej dynamiki mózgu realizowanej przez hierarchicznie zbudowaną, modułarną sieć neuronową.

Słowa kluczowe i dyscypliny pokrewne: układy złożone, układy dynamiczne, dynamika symboliczna, fizyka teoretyczna, teoria informacji, symulacje komputerowe, matematyka stosowana, biocybernetyka, sieci neuronowe z rekurencją.

4. Badania w zakresie dydaktyki wspomaganej metodami komputerowymi.

Badania w tym zakresie rozpoczęto w ramach programu „Komputerowo wspomagana edukacja” finansowanego przez biuro TEMPUS (1992-1995), są one kontynuowane również po zakończeniu tego projektu. Wykonywaliśmy prace w zakresie komputerowych metod wspomagania dydaktyki, zastosowania hipertekstu i technik „multimedia” w edukacji, a w szczególności w nauczaniu matematyki, fizyki i chemii teoretycznej. Przy współpracy z Department of Applied Mathematics and Theoretical Physics Uniwersytetu w Cambridge rozwijaliśmy oprogramowanie multimedialne (w wersji angielskiej i polskiej) do nauczania matematyki stosowanej i fizyki. Koordynowaliśmy podobne prace na UMK w kilku innych dziedzinach (biologia, geografia, psychologia) oraz współpracowaliśmy w tym zakresie z instytutem ekonomii i pedagogiki UMK. Braliśmy udział w interdyscyplinarnym programie (TESSA) dotyczącym komputerowego wspomagania badań środowiska naturalnego finansowanym przez Unię Europejską. Czynnie włączyliśmy się również do formułowania nowych programów nauczania nauk komputerowych (computational science) oraz do reformy programu nauczania przedmiotów o charakterze informatycznym na Wydziale Fizyki i Astronomii UMK.

Słowa kluczowe i dyscypliny pokrewne: dydaktyka fizyki, dydaktyka matematyki, dydaktyka chemii teoretycznej, pedagogika, fizyka komputerowa, symulacje środowiska naturalnego, multimedia w nauczaniu.

RAPORT Z DZIAŁALNOŚCI STATUTOWEJ W ROKU 1995

1. Opis merytoryczny realizowanych prac wg. planu zadaniowo-financego

Działalność statutowa (uwzględniono tu działalność w ramach badań statutowych - nakłady KBN: 20884 zł w 1995 roku, w ramach badań własnych - nakłady 4800 zł, grantów wewnętrznych UMK 2000 zł, oraz grantów indywidualnych KBN 59000 zł).

W ramach działalności statutowej pracowaliśmy nad następującymi tematami:

1.1 Rozwój metod komputerowych w fizyce i chemii (główni wykonawcy: prof. Duch i Prof. Wasilewski, działalność statutowa, badania własne i granty indywidualne)

1.1.1 Teoretyczne badania struktury energetycznej małych cząsteczek (grant wewnętrzny UMK nr 326-F, kierowany przez prof. Wasilewskiego).

Kontynuowano badania stanów oscylacyjnych i efektów sprzężenia oscylacyjno-rotacyjnego w małych cząsteczkach metodami wykraczającymi poza elementarne przybliżenie harmoniczne. W ramach współpracy z grupą prof. Handy'ego z Uniwersytetu w Cambridge przeprowadzono metodami zaburzeniowymi badania efektów anharmonicznych w stanie podstawowym cząsteczki SO_2 . Najnowszą wersję programu SPECTRO, opracowanego do takich badań w Cambridge, zaimplementowano za zgodą autorów na UMK. Rozpoczęto także badania stanów oscylacyjno-rotacyjnych metodami pseudospektralnymi. Wymieniona tematyka wchodzi w zakres pracy doktorskiej mgr S. Zelka *Zastosowanie technik wielociałowych w badaniach oscylacji molekularnych*. S. Zelek odbył staż w Inst. of Chemistry, University of Cambridge, Wielka Brytania (4.06-5.08.95, projekt Tempus)

1.1.2 Teoretyczne badania otwartopowłokowych stanów elektronowych cząsteczek (grant KBN nr 2.2702.92.03, kierowany przez prof. Wasilewskiego).

W zakończonym w roku 1995, 3-letnim programie badawczym, uzyskano następujące wyniki:

1. Zaproponowano nową klasyfikację otwartopowłokowych stanów elektronowych cząsteczek. Klasyfikacja ta ma zastosowanie w przypadkach dobrze opisywanych w przybliżeniach Borna-Oppenheimera i nierelatywistycznym. Wiodącą ideą porządkującą jest struktura konfiguracyjnych funkcji stanu (CSF - Configuration State Function) dominujących w rozwinięciu typu CI (Configuration Interaction) w konfiguracji równowagowej danego stanu, i jej ewolucja przy zmianach parametrów

geometrycznych odpowiadających realnie zachodzącym przemianom konformacyjnym, w tym także separacji (dysocjacji) układu w rozważanym stanie. Stany podzielono generalnie na jedno- i wielo-referencyjne, z tych ostatnich wydzielono stany wielokonfiguracyjne, w których dominujące CSF generowane są przez różne konfiguracje elektronowe. Na podstawie zależności wielokonfiguracyjnego charakteru stanu od parametrów konformacyjnych przeprowadzono dalszy podział na przypadki lokalnie-, asymptotycznie-, globalnie- i silnie wielokonfiguracyjne. Proponowana klasyfikacja jest próbą spojrzenia unifikującego takie sytuacje konformacyjno-spektroskopowe, jak bariery typu *avoided crossing*, wzbronienia Woodwarda-Hoffmanna, przecięcia stożkowe, stabilizacje Jahna-Tellera i Rennera-Tellera, minima typu Van-der-Waalsa. Tam gdzie możliwa jest odpowiedniość, dokonano porównania z jedyną istniejącą w literaturze klasyfikacją Kutzelnigga i Smitha (Int. J. Quantum Chem. **2** (1968) 531), opartą na analizie liczb obsadzeń orbitali naturalnych.

Publikacja: J. Wasilewski, *A Classification of Open-Shell States of Molecules* Int. J. Quantum Chem. **57** 625-640 (1996), oraz prezentacje na konferencjach: *8-th International Congress of Quantum Chemistry*, Prague, June 19-23, 1994, oraz *31. Symposium für Theoretische Chemie*, Loccum (RFN), 10-13.10.1995.

2. Liniowy stan podstawowy rodnika N_3 zbadano metodą DFT w przybliżeniu nielokalnym B-LYP. Zastosowano serię baz gaussowskich o wzrastającej jakości, od małych baz typu split-shell do baz klasy TZPP. Przy użyciu najlepszych z zastosowanych baz możliwe było bardzo dobre odtworzenie znanych doświadczalnie z dużą dokładnością parametrów widm oscylacyjnych. Pomimo iż równania Kohna-Shama rozwiązane zostały bez uwzględnienia prawidłowej symetrii spinowo-przestrzennej, zastosowana metoda jest w stanie prawidłowo opisywać rozważany, otwartopowłokowy i zdegenerowany stan elektronowy.

Publikacja: R. B. Słupski and J. Wasilewski, *A DFT Study of the Ground State of N_3 Radical* Int. J. Quantum Chem. **56** (1995) 655-661

Wyniki prezentowano także na konferencji: *Thirty Years of Density Functional Theory: Concepts and Applications*, Cracow, June 13-16, 1994. Abstrakt opublikowany w materiałach konferencji.

3. Punkty stacjonarne na najniższych energetycznie powierzchniach: dubletowej i kwartetowej rodnika N_3 przebadano stosując metody jednokonfiguracyjne (UHF, ROHF), wielokonfiguracyjne (CAS CI, CAS SCF) i uwzględniające dynamiczne efekty korelacji elektronowej (MP2, DFT). W obliczeniach DFT uwzględniono funkcjonały lokalne (S-VWN) i nielocalne (B-LYP). Ogólne własności topologiczne obu powierzchni energetycznych w ramach grupy C_{2v} wyjaśnione zostały na podstawie diagramu Walsha. Wnioski z tej analizy potwierdzone zostały obliczeniami typu CAS CI. Znalezione minima zostały szczegółowo zbadane bez narzucania ograniczeń wynikających z symetrii; tylko jeden z wyższych stanów kwartetowych okazał się asymetryczny. Nieciągłości energii orbitalnych w funkcji kąta walencyjnego, znalezione po raz pierwszy w literaturze, pozwalają wyjaśnić istnienie i stabilność minimów i barier energetycznych; obraz ten przenosi się na wyniki obliczeń DFT, mimo iż odpowiednie energie orbitali Kohna-Shama nie wykazują analogicznych nieciągłości.

Wszystkie zastosowane metody przewidują zgodnie istnienie i własności stabilnego konformera cyklicznego. Zaproponowano alternatywne mechanizmy deaktywacji wzbudzonych stanów liniowych rodnika N_3 , wykorzystujące procesy Rennera-Tellera inicjowane drganiami zginającymi i punkty przecięć stożkowych.

Publikacja: J. Wasilewski, *Stationary Points on the Lowest Doublet and Quartet Hypersurfaces of the N_3 Radical: A Comparison of MO and DFT Approaches* J. Chem. Phys. (1995) - wysłana do druku

4. Na przykładzie izowalencyjnych cząsteczek O_3 i SO_2 zbadano efektywność zmodyfikowanych orbitali wirtualnych (MVO - Modified Virtual Orbital) typu jonowego, i ortogonalizowanych przybliżonych orbitali naturalnych, (ONO - Orthogonalised Natural Orbitals) w obliczeniach energii korelacji metodą CI-SD - w porównaniu ze stosowanymi standardowo orbitalami kanonicznymi (CVO). W badanych układach, typowych dla kilkuatomowych cząsteczek zbudowanych z atomów grup głównych, liczba walencyjnych par elektronowych zdecydowanie przewyższa liczbę formalnych wiązań chemicznych. Stwierdzono, że dla omawianej klasy układów stosowanie orbitali zmodyfikowanych nie prowadzi do tak znacznego przyspieszenia zbieżności rozwinięć CI, jak w znanych z literatury przypadkach układów AH_n . Przedyskutowano fizyczne przyczyny tych różnic. Na licznych przykładach przeanalizowano ewolucję własności przestrzennych orbitali w procesach ich modyfikacji.

Publikacja: J. Wasilewski, S. Zelek and M. Wierzbowska, *Modifications of Virtual Orbitals in the Limited CI Calculations for Electron-Rich Molecules*, Int. J. Quantum Chem. (1995) - w druku

5. Punkty stacjonarne na singletowych i trypletowych powierzchniach energetycznych cząsteczki SO_2 zbadano w ramach zunifikowanego podejścia typu CAS SCF, przy użyciu specjalnie adaptowanej bazy funkcyjnej wysokiej jakości. Ogólną charakterystykę rodziny stanów walencyjnych tego układu w ramach grupy C_{2v} przedyskutowano na podstawie diagramu Walsha, i porównano na tym poziomie z izowalencyjną cząsteczką ozonu, O_3 . W obu wypadkach stwierdzono analogiczne nieciągłości energii orbitalnych dla pośrednich wartości kąta walencyjnego, które umożliwiają precyzyjną lokalizację i wyjaśnienie genezy poszczególnych minimów i barier energetycznych. Pomimo iż w obliczeniach uwzględniono jedynie aspekty strukturalne korelacji elektronowej, uzyskano dobre odtworzenie energii adiabatycznych przejść elektronowych, parametrów widma oscylacyjnego (z uwzględnieniem efektów anharmonicznych), oraz stabilności poszczególnych stanów względem symetrycznych ($S + O_2$) i asymetrycznych ($SO + O$) kanałów dysocjacji.

Publikacja: J. Wasilewski and S. Zelek, *CAS SCF Study of some Lower Electronic States of SO_2 Molecule* - w przygotowaniu; wyniki prezentowano także na: *First Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics*, Girona, June 28 - July 7, 1993 b. komunikat na szkole *Ogólnopolska Szkoła Fizykochemii Organicznej*, Karpacz, 05-10.06.1994

6. Następujące, rozważane w literaturze produkty oddziaływania rodnika metylowego (CH_2 , 3B_1) i tlenu molekularnego (O_2 , $^3\Sigma_g^-$) przebadano stosując szereg metod typu MO (RHF, UHF, ROHF, CAS SCF, MP2) i DFT (S-VWN, B-LYP):

peroxy-methylene (I), dioxirane (II, C_{2v}), methylene-bis(oxy) (III, C_{2v}) i kwas mrówkowy (IV, formic acid). W wyniku oddziaływania powstać mogą produkty zarówno w stanach singletowych, jak i trypletowych. Jako wynik przeprowadzonych obliczeń (w bazie typu DZP) stwierdzono, że w stanach singletowych stabilność układów wzrasta w kolejności I, II, IV; III nie jest układem stabilnym, w symetrii C_{2v} dysocjuje na CO_2 i H_2 , a po zniesieniu ograniczeń symetrii przechodzi w IV. W stanach trypletowych II i III nie są odróżnialne, I i IV przechodzą w konformacje niepłaskie, powyżej odpowiednich stanów singletowych. Względne stabilności obliczone metodami MP2 i B-LYP są w porównywalnej zgodności z danymi literaturowymi, w metodach nieskorelowanych stabilności te są generalnie za niskie, w przybliżeniu lokalnym (S-VWN) - za wysokie.

Publikacja: J. Wasilewski and M. Wierzbowska, *Reaction Intermediates in the Interaction of Methylene Radical (CH_2 , 3B_1) and Molecular Oxygen (O_2 , $^3\Sigma_g^-$): A Comparison of MO and DFT Approaches* Int. J. Quantum Chem, (1996) - wysłana do druku

Poz. 3-6 zakończono w roku 1995.

- 1.1.3 Opracowanie nowych metod opisu efektów korelacji elektronowej w atomach i cząsteczkach (grant KBN kierowany przez prof. K. Jankowskiego z Instytutu Fizyki UMK, uczestniczy w nim prof. Wasilewski).

Prowadzone były badania układów modelowych w ramach nowych wersji wieloreferencyjnych metod sprzężonych klasterów (MRCC - Multi-Reference Coupled Clusters) w sformułowaniu walencyjnie-universalnym. Badania dotyczyły wpływu bazy jednocząstkowej (formy orbitali molekularnych) na zbieżność rozwinięcia klasterowego.

- 1.1.4 Symulacje komputerowe w fizyce atomowo-molekularnej (badania własne, prof. Wasilewski).

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 (dwa ostatnie kierunki wchodzą w zakres pracy doktorskiej mgr M. Wierzbowskiej)

- 1.1.5 Inne prace dotyczące teoretycznego badania struktury energetycznej małych cząsteczek (prof. Wasilewski):

a) W ramach wspólnej akcji z IF uzyskano nową, licencjonowaną, źródłową wersję systemu GAUSSIAN-94/DFT i dokonano jego implementacji na komputerach SUN.

b) Doktorantka prof. Wasilewskiego w KMK wzięła udział w konferencji organizowanej w sieci Internet w oparciu o serwery WWW (wszystkie prace były recenzowane w tradycyjny sposób).

Nowak W, M.Wierzbowska, A Theoretical Study of Geometry and Transition Moment Directions of Flexible Fluorescent Probes - Acetoxy Derivatives of Phenylanthracene. Second Electronic Computational Chemistry Conference (ECCC2), November 1-30 (1995), Paper 28, konferencja organizowana w sieci Internet, adres: <http://hackberry.chem.niu.edu:70/0/ECCCinformation.html>

1.1.6 **Rozwój metod typu oddziaływania konfiguracyjnego** (badania statutowe, kierownik prof. W. Duch).

Badania te wspierane były również przez grant w ramach umowy o współpracy Polsko-Francuskiej (cooperation scientifique entre la France et la Pologne, KBN/Le ministre français des affaires étrangères, grant num. 114) pod tytułem: *Rozwój metod wyznaczania energii korelacji opartych na teorii hamiltonianów pośrednich*. Ze strony polskiej kierownikiem tej umowy był prof. W. Duch.

W 1995 roku kontynuowano prace nad rozwojem metod obliczeniowych w fizyce molekularnej, w szczególności nowych wersji metody oddziaływania konfiguracyjnego. Przy współpracy z grupą z Instytutu Astrofizyki Maxa Plancka oraz z Laboratoire Physique Quantique, Paul Sabatier University, Francja, napisano kilka prac. Ukończona została praca doktorska mgr J. Meller, jej obrona odbyła się w czerwcu 1996 roku. Przetestowano i znacznie rozwinęto metodę superbepośredniego CI wyprowadzając wzory w trzecim rzędzie, chociaż nie zaprogramowano jeszcze wersji optymalnej z punktu widzenia szybkości obliczeń (metoda ta zostanie prawdopodobnie zaimplementowana przez współpracującą z nami grupę z Instytutu Maxa Plancka w Monachium).

Przy współpracy z grupą francuską opracowano kilka wersji rozszerzeń metody CI korygujących jej ekstensywność. O randze tych badań świadczyć może fakt, że w 1995 roku odwiedziło nas trzech profesorów z Laboratoire Physique Quantique, Paul Sabatier University, najbardziej znanej grupy francuskiej zajmującej się rozwojem metod chemii komputerowej. Mgr J. Meller odbył staż w Lab. Physique Quantique, na Paul Sabatier University w Tuluzie.

Publikacje:

1. **Meller J**, J.P. Malrieu, J.L. Heully, *Multireference size-consistent self consistent CI method; a few applications to ground and excited states*. Chem. Phys. Letters 244 (1995) 440
2. **Meller J**, J.P. Malrieu, R. Caballol, *State-specific Coupled Cluster type dressing of Multireference Singles and Doubles Configuration Interaction matrix*. Journal of Chemical Physics 104 (1996) 4068
3. Adamowicz L, R. Caballol, J.P. Malrieu, **J. Meller**, *Multistate Coupled Cluster dressing of MRCI matrix* (Chem. Phys. Letters, w druku)
4. **Meller, J**, *New computational algorithms based on the configuration interaction method*. Praca Doktorska, UMK 1996

1.2 Rozwój **metod sztucznej inteligencji** a w szczególności szeroko pojętych zagadnień **modelowania sieci neuronowych** (badania statutowe i grant KBN, kierownik prof. W. Duch).

1.2.1 Rozwój teorii

W ramach rozwoju teorii pracowaliśmy nad kilkoma tematami.

a) W kilku pracach i doniesieniach konferencyjnych przedstawiono nowy punkt widzenia na tworzenie modeli sieci neuronowych a w szczególności modeli inspirowanych przez kognitywistykę. Polega ono na systematycznym poszukiwaniu przybliżeń do dynamiki działania grup neuronów na różnych poziomach, począwszy od poszukiwania najlepszych funkcji pozwalających na aproksymację opisu działania pojedynczych neuronów, przez grupy neuronów opisanych przy pomocy neurofizjologicznie poprawnych modeli opartych na neuronach wysyłających impulsy, do uproszczeń w postaci sieci z rekurencją o elementach reprezentujących uśrednioną aktywność realnych neuronów. Podejście behawiorystyczne zadowala się badaniem dyskretnych przejść pomiędzy kwazistacjonarnymi stanami (atraktorami) sieci z rekurencją, podejście bardziej dokładne korzysta z uproszczonego opisu sieci z rekurencją przy pomocy dynamiki symbolicznej wprowadzając stosowane w psychologii przestrzenie cech (feature spaces). Pozwala to na tworzenie modeli sieci neuronowych do bezpośredniego modelowania zdarzeń zachodzących w umyśle a nie w mózgu.

Poszukiwanie empirycznej teorii umysłu dającej odpowiedzi na tysiące szczegółowych pytań i wyjaśniającej wyniki licznych eksperymentów neuropsychologów i psychologów poznawczych można sformułować jako precyzyjnie określone zagadnienie aproksymacji działania grup neuronów i tworzenia reprezentacji wewnętrznych w przestrzeniach cech (feature spaces, knowledge spaces). Realizacja takich modeli prowadzi do szczególnego rodzaju systemów uczenia maszynowego jakimi są systemy neurorozmyte. Jest to bardzo obiecujący kierunek badań, wymagający integracji wiedzy z wielu dziedzin. W ostatnich dwóch latach znajdujemy coraz więcej potwierdzeń słuszności takiego podejścia, ale do jego pełnego sukcesu, tj. połączenia neurofizjologii z psychologią, jest jeszcze daleko.

Publikacje związane z tym tematem:

1. **Duch W** and Diercksen GHF, *Feature Space Mapping as a universal adaptive system*. Computer Physics Communications **87** (1995) 341-371
2. **Duch W**, *From cognitive models to neurofuzzy systems*. In: E. Kacki, editor, Volume 3, Artificial Neural Networks and Their Applications (Polish Society of Medical Informatics, Łódź 1995), p. 22-27
3. **Duch W**, *Physics of consciousness*, IV Krajowa konferencja „Modelowanie Systemów biologicznych”, Kraków 2-3.06.1995, pp. 101-114; oraz referat na tej konferencji.
4. **Duch W**, *Psychophysics*, European Summer School on Computing Techniques in Physics, Skalsky Dvur, 5-14.09.1995 (Lecture Notes)
5. **Duch W**, *Computational physics of the mind*. Computer Physics Communic. 995 (1996) 1-18

6. **Duch W**, *On simplifying brain functions*. Proceedings of the Second Conference on Neural Networks and their applications, Orle Gniazdo, 30.IV-4.V.1996, pp. 118-124
7. **Duch W**, *From cognitive models to neurofuzzy systems - the mind space approach*. Systems Analysis-Modelling-Simulation xx (1996) 1-13.
8. **Duch W**, *Transparent theory of consciousness: is there a problem?* Behavioral and Brain Sciences (submitted)

Doniesienia konferencyjne i referaty:

1. **Duch W**, *From cognitive models to neurofuzzy systems*. SMC, System Modelling Control, Zakopane, Poland, 1-5.05.1995
2. **Duch W**, *Psychophysics*. European Physical Society (EPS) Computational Physics Summer School. Skalsky Dvur, Czech Republic, 5-14.9.1995 (wykłady na szkole, na zaproszenie organizatorów).
3. **Duch W**, *Towards a plausible theory of mind*. Instytut Fizyki UMK, Nicholas Copernicus University, Toruń, 22.3.1995 (zapr: prof. J. Karwowski).
4. **Duch W**, *Dynamical system approach to models of mind*. Department of Artificial Intelligence, Birmingham University, UK, 30.3.1995 (zapr: prof. Aaron Sloman).
5. **Duch W**, *Fizyka i Metafizyka Świadomości*. Lubelskie Towarzystwo Naukowe, Lublin 5.6.1995 (zapr: prof. W. Kamiński)

b) Badaliśmy teorie alternatywne w stosunku do sieci neuronowych. Zakończono z wynikiem bardzo dobrym pracę magisterską (M. Buczkowski), której celem było zbadanie możliwości alternatywnego podejścia do adaptacji i opisu działania sieci neuronowych w oparciu o lokalne transformacje układów współrzędnych. Wynikiem tej pracy jest model alternatywny w stosunku do sieci neuronowych, oparty na adaptacji parametrów określających odległość w globalnym lub lokalnym układzie współrzędnych; w szczególności prowadzi to do uogólnienia często stosowanej w *pattern recognition* metody najbliższych sąsiadów z lokalną transformacją (w ogólności nieliniową) odległości. Metody oparte na pamięci (memory-based methods) znajdują szerokie zastosowanie praktyczne skutecznie konkurując z sieciami neuronowymi. Usiłujemy zrozumieć powiązania tego modelu z metodami z *patter recognition* i sieci neuronowych.

1. Marcin Buczkowski, *Idee geometryczne w teorii układów uczących się*, UMK Toruń 1995 (praca magisterska napisana pod opieką prof. W. Duchy)
2. **Duch W**, **Adamczak R**, **Jankowski N**, *Improved memory-based classification*. Solving Engineering Problems with Neural Networks, Proc. of the Intern. conference EANN'96, London, 17-19.06.1996 (ed. A.B. Bulsari, S. Kallio, D. Tsaptsinos), pp. 447-450

Pracowaliśmy również (w ramach nieukończonej jeszcze pracy magisterskiej) nad zastosowaniami modeli opartych na procesach Markowa (modele HMM i DFA, Discreet Finite Automata) do aproksymacji dynamiki sieci neuronowych z rekurencją i w zastosowaniu do opisu struktury makrocząsteczek (DNA, RNA), w szczególności nad sposobami określenia reguł dla probabilistycznych automatów skończonych na podstawie dynamiki sieci z rekurencją.

Pracowaliśmy też nad nowym, bardzo ogólnym paradygmatem informatyki, w którym zarówno dane jak i instrukcje są ciągłymi, wielowymiarowymi, rozmytymi obiektami. Jest to najbardziej ogólne podejście do obliczeń, w którym maszyna Turinga, systemy logiki rozmytej jak i sieci neuronowe są szczególnymi przypadkami.

c) Przy współpracy z dr Visakanem Kadirkamanathanem z Computer Science Department, University of Sheffield, prowadzono prace nad ontogenicznym modelem sieci neuronowej (zmienna liczba neuronów) INCNET. Mgr Norbert Jankowski odbył tam dwumiesięczny staż w 1995 roku. Współpraca kontynuowana jest w 1996 roku a wykonane w jej ramach prace zostaną wkrótce opublikowane i będą częścią pracy doktorskiej mgr Jankowskiego.

d) Kontynuowano prace nad wykładem „Umysł, mózg i sieci neuronowe”, będącym wstępem do kognitywistyki, integrującym wiadomości dotyczące filozofii, neurofizjologii, psychologii poznawczej i sieci neuronowych, napisano około 400 stron książki, dotyczącej tego tematu. W książce tej przedyskutowane zostaną problemy związane z tworzeniem teorii umysłu, poczynając od problemów filozoficznych i modeli historycznych, przez teorie psychologiczne i badania nad mózgiem, do modeli matematycznych. Trzech pracowników KMK wzięło udział w „Easter School on Computational methods in psychology”, Kings College, Cambridge, UK, 26-28.03.1995 (wyjazd opłacony był z projektu finansowanego przez biuro Tempus) . W ramach interdyscyplinarnego programu badawczego związanego z zastosowaniami i rozwojem teorii sieci neuronowych w fizyce, chemii, ekonomii, lingwistyce i innych naukach zorganizowano szereg seminariów.

W 1996 roku rozszerzyliśmy nasze badania na sieci o neuronach symulujących działanie neuronów biologicznych, zamierzamy też rozwinąć współpracę z neurofizjologami z Zakładu Fizjologii Zwierząt UMK, w którym prof. Duch wygłosił referat.

1.2.2 Rozwój i zastosowania systemu FSM (Feature Space Mapping)

Znacznie rozwinęto teorię jak i oprogramowanie systemu FSM (prace wspierane przez grant KBN). Jest to uniwersalny system neurorozmyty oparty na ogólnych przesłankach teoretycznych wynikających ze wspomnianego już podejścia do modelowania umysłu. System ten można traktować jako typową sieć neuronową, system oparty na śladach pamięci integrujący dwa podstawowe modele kategoryzacji w psychologii (teorię prototypów i teorię egzemplarzy) jak i system logiki rozmytej. Zagadnienia związane z rozwojem tego systemu w zastosowaniach do aproksymacji i klasyfikacji będą tematem dwóch prac doktorskich oraz kilku prac magisterskich. Część dotycząca logiki rozmytej i możliwości wykorzystania tego systemu w procesach wnioskowania, jako systemu ekspertowego, będzie również tematem niezależnej pracy doktorskiej. W 1995 roku skupiliśmy się przede wszystkim na rozwoju teorii tego systemu, testowaniu nowych funkcji realizowanych przez neurony i zastosowaniu FSM do zagadnień klasyfikacji, osiągając bardzo dobre wyniki. Pan Rafał Adamczak ukończył z wynikiem bardzo dobrym pracę magisterską „*Rozpoznawanie widm atomowych za pomocą sieci neuronowych*” korzystając z modelu FSM. W pierwszej połowie 1996 roku zajmowaliśmy się też możliwościami ekstrakcji reguł logicznych przy pomocy takich sieci jak i przy pomocy zmodyfikowanych sieci typu

wielowarstwowych perceptronów. W dalszej perspektywie zamierzamy przekształcić system FSM w narzędzie do klasyfikacji, analizy i wizualizacji danych.

Publikacje związane z tematem:

1. **Duch W** and Diercksen GHF, *Feature Space Mapping as a universal adaptive system*. Computer Physics Communications **87** (1995) 341-371
2. **Duch W, Jankowski N, Naud A, Adamczak R**, *Feature Space Mapping: a neurofuzzy network for system identification*. Engineering Applications of Neural Networks, Helsinki 21-23.08.1995, pp. 221-224
3. **Adamczak R**, Rozpoznawanie widm atomowych za pomocą sieci neuronowych, praca magisterska, UMK Toruń 1995
4. **Duch W, Adamczak R**, *Feature Space Mapping network for classification*. Proceedings of the Second Conference on Neural Networks and their applications, Orle Gniazdo, 30.IV-4.V.1996, pp. 125-130
5. **Duch W, Adamczak R, Jankowski N**, *Improved memory-based classification*. Solving Engineering Problems with Neural Networks, Proc. of the Intern. conference EANN'96, London, 17-19.06.1996 (ed. A.B. Bulsari, S. Kallio, D. Tsaptsinos), pp. 447-450
6. **Duch W, Jankowski N**, *Bi-radial transfer functions*. Proceedings of the Second Conference on Neural Networks and their applications, Orle Gniazdo, 30.IV-4.V.1996, pp. 131-137

1.2.3 Samoorganizacja i uczenie bez nadzoru

Interesującym modelem samoorganizacji, przydatnym do symulacji tworzenia się map topograficznych w mózgu, jest sieć Kohonena. Ponieważ sieć ta nie bardzo nadaje się do aproksymacji czy klasyfikacji (dając stosunkowo niskie dokładności, jak przyznaje sam Kohonen) jej najbardziej atrakcyjną cechą pozostaje wizualizacja danych w postaci zachowania topograficznego sąsiedztwa wielowymiarowych danych odwzorowanych na dwuwymiarową siatkę neuronów. Wprowadzone przez nas miary ilościowe zgodności topograficznej przestrzeni danych i niskowymiarowych przestrzeni siatek neuronów pokazują jednak, że jest to odwzorowanie dalekie od optymalnego. Podejście oparte na minimalizacji takich miar (MDS, czyli skalowanie wielowymiarowe oraz odwzorowanie Sammona) ma solidniejsze podstawy matematyczne niż metoda Kohonena, ale jest bardzo kosztowne (dla N obiektów liczba parametrów do minimalizacji jest rzędu $N^2/2$), przez co nie nadaje się do klasyfikacji.

Wprowadziliśmy nowe metody, łączące zalety SOM i MDS i badamy przydatność tych metod do klasyfikacji i wizualizacji danych. Oprócz danych modelowych, takich jak współrzędne wierzchołków 2-20 wymiarowych sympleksów czy 3-5 wymiarowych hipersześcianów, zastosowaliśmy tę metodę do wizualizacji danych psychometrycznych otrzymanych z testów do klasyfikacji typów osobowości. Wyniki wzbudziły duże zainteresowanie psychologów. Praca będzie kontynuowana a metoda opisana bardziej szczegółowo w pracach przygotowywanych do druku oraz w pracy doktorskiej A. Nauda. Algorytm SOM testowano również w zagadnieniach klasyfikacji obrazu, w szczególności klasyfikacji tekstur (przy współpracy z grupą LERI z Universite Reims, Dept. de Informatique, Francja).

Publikacje związane z tematem:

1. **Duch W**, *Quantitative measures for the self-organized topographical mapping*. Open Systems and Information Dynamics **2** (1995) 295-302
2. **Naud A**, *Applications of Kohonen's Self-Organizing Maps to Textured Image Segmentation*. In: E. Kacki, editor, Volume 3, Artificial Neural Networks and Their Applications (Polish Society of Medical Informatics, Łódź 1995), p. 91-95; **Naud A**, referat w czasie konferencji: SMC, System Modelling Control, Zakopane, Poland, 1-5.05.1995
3. **Duch W**, **Naud A**, *On global self-organizing maps*. Proc. of the European Symposium on Artificial Neural Networks (ESANN'96), Bruges 22-26.4.1996, pp. 91-96
4. **Duch W**, **Naud A**, *Multidimensional scaling and Kohonen's self-organizing maps*. Proceedings of the Second Conference on Neural Networks and their applications, Orle Gniazdo, 30.IV-4.V.1996, pp. 138-143
5. **Duch W**, **Naud A**, *Simplexes, Multi-Dimensional Scaling and Self-Organized Mapping* UMK-KMK-TR 2/96 report (1996)

1.2.4 Inteligentne oprogramowanie dla potrzeb chemii komputerowej.

Przy współpracy z Max-Planck-Institut für Astrophysik z Garching k. Monachium oraz dr Nicosem Drakosem (Computer Based Learning Unit, University of Leeds, W. Brytania), dr Leifem Laaksonenem (Center for Scientific Computing, Espoo, Finlandia), prof. Willemem Nieuwpoortem (Laboratory of Chemical Physics, University of Groningen, Holandia), dr Stanem Scottem (Queen's University of Belfast, Department of Computer Science) oraz prof. Mirosławem Urbanem (Comenius University, Department of Physical Chemistry) pracowaliśmy nad zatwierdzonym przez komisję biura COST Unii Europejskiej do wstępnej realizacji na 1995 rok tematem „Intelligent support for computational chemistry”. Prof. Duch jest zastępcą kierownika tego projektu i był osobą odpowiedzialną za przygotowanie tego wniosku. Zagadnienie to będzie tematem pracy doktorskiej mgr Karola Grudzińskiego, wykonywanej w Instytucie Maxa Plancka w Garching, pod częściową opieką prof. Ducha.

Projekt dotyczy zastosowania metod sztucznej inteligencji, w szczególności budowy systemu ekspertowego i systemu neurorozmytego do wspomagania wszystkich etapów wykonywania obliczeń przy pomocy wielkich systemów programów numerycznych rozwiniętych dla potrzeb chemii komputerowej i fizyki molekularnej. Prowadzenie takich obliczeń wymaga dużego doświadczenia, wiedzy i intuicji, w szczególności w wyborze odpowiedniej metody obliczeniowej i bazy funkcji jednocząstkowych. Celem jest stworzenie systemu nadającego się do użytku przez fizyków czy chemików zainteresowanych badaniem przyrody a nie algorytmami numerycznymi. Jest to bardzo ambitne przedsięwzięcie, wymagające stworzenia obiektowo-zorientowanego oprogramowania dla obliczeń numerycznych w chemii kwantowej (nic podobnego dotychczas nie istnieje), które będzie współpracować z systemem ekspertowym. W pierwszym etapie opracowaliśmy prototyp systemu opartego na śladach pamięci (-memory-based reasoning).

W 1995 roku odbył się zjazd uczestników projektu w celu koordynacji wspólnych działań, niestety trudności biurokratyczne w rozliczaniu grantu COST okazały się tak

duże, że do końca roku nie udało się rozliczyć kosztów tego spotkania i nie wiadomo kiedy odbędzie się drugi zjazd uczestników projektu. Jednakże wstępne wyniki, osiągnięte w pierwszym roku projektu wydają się na tyle zachęcające, że w 1996 roku prof. Dierksen i prof. Duch wystąpią o grant DFG na dalszą realizację tego tematu. Rola grupy prof. Ducha będzie się ograniczać w nadchodzących latach tylko do części projektu związanej ze sztuczną inteligencją, pomijając kwestie opracowania oprogramowania numerycznego i graficznego interfejsu użytkownika, które rozwijane są przez pozostałych uczestników tego projektu.

Publikacje związane z tematem:

1. Duch W, *Artificial Intelligence Support for Computational Chemistry*, Advances in Quantum Chemistry (w druku)

1.3 Kognitywistyka (cognitive sciences) i teoria układów złożonych (complex systems theory) (badania statutowe, kierownik prof. W. Duch)

Badania w tym zakresie zmierzają w kilku kierunkach. Z jednej strony dążymy do powołania kognitywistyki jako odrębnego kierunku studiów (już w roku akademickim 1996/7) i rozwoju interdyscyplinarnego programu badań. Służyć temu mają „konwersatoria kognitywne”, organizowane na naszej uczelni. W ramach tych konwersatoriów specjaliści z tak różnych dziedzin jak filozofia, lingwistyka poznawcza czy fizjologia zwierząt dyskutują zagadnienia związane z teorią umysłu. Opracowane przez prof. Ducha wykłady z wstępu do kognitywistyki cieszyły się dużą popularnością i pozwoliły na znaczną integrację materiałów z wielu dziedzin nauki. Są to jednak nadal badania wstępne, które w ciągu najbliższych paru lat powinny zaowocować szeregiem książek.

Węższym, ale za to bardziej konkretnym zagadnieniem był dalszy rozwój algorytmów uczenia maszynowego opartych na teorii informacji (przy współpracy z Politechniką Monachijską, TUM). Rozwinięto wersję deterministyczną procedury uczenia maszynowego, opartą o miarę ilości informacji podaną przez Levina (informacja algorytmiczna plus człon proporcjonalny do logarytmu z czasu wykonania programu). Osiągnięto ciekawe rezultaty dla doboru wag prostych sieci neuronowych i takich zagadnień jak szukanie wyjścia z labiryntu. Wyniki prezentowane były na międzynarodowych konferencjach przez mgr Jankowskiego z KMK i dr hab. Schmidhubera z TUM.

Drugim zagadnieniem była udana próba mechanizacji dowodów aksjomatu wyboru w teorii zbiorów przy pomocy oprogramowania komputerowego „Isabelle” typu *theorem checker*, dokonana przez mgr. Grąbczewskiego z naszej Katedry w czasie jego pobytu w *Computer Laboratory* Uniwersytetu w Cambridge. Wyniki znajdują się w druku w prestiżowym piśmie „Journal of Automated Reasoning” i przedstawione zostały na specjalistycznej konferencji.

Chwilowo zaniechano prowadzonych w latach ubiegłych badań nad nowymi miarami ilości informacji, jednakże do tych zagadnień zamierzamy jeszcze powrócić.

Publikacje związane z tematem:

1. **Jankowski N**, *Applications of Levin's universal optimal search algorithm*. In: E. Kacki, editor, Volume 3, Artificial Neural Networks and Their Applications (Polish Society of Medical Informatics, Łódź 1995), p. 34-40; oraz referat w czasie konferencji: SMC, System Modelling Control, Zakopane, Poland, 1-5.05.1995
2. **Grąbczewski K**, L. Paulson, *Mechanising Set Theory: Cardinal Arithmetic and the Axiom of Choice*, University of Cambridge Computer Laboratory, Technical Report no. 377 (1995).
3. Paulson L, **Grąbczewski K**, *Mechanising Set Theory: Cardinal Arithmetic and the Axiom of Choice*, Proc. of the Isabelle Users Workshop, University of Cambridge 18-19.09.1995.
4. **Grąbczewski K**, L. Paulson, *Mechanising Set Theory: Cardinal Arithmetic and the Axiom of Choice*, Journal of Automated Reasoning 1996 (in print)

1.4 **Badania w zakresie dydaktyki wspomagannej metodami komputerowymi (w ramach grantu biura „TEMPUS”, koordynator: prof. W. Duch.)**

W ramach programu „Komputerowo wspomagana edukacja” (JEP 33-40) finansowanego przez biuro TEMPUS (trzeci rok 1994/95 nakłady 309.900 ecu) prowadzone były badania w zakresie komputerowych metod wspomagania dydaktyki. Program obejmuje współpracę UMK z University of Cambridge i University of Leeds w Wielkiej Brytanii, Paul Sabatier University i Universite de Reims we Francji, oraz Instytutem Astrofizyki Maxa Plancka i Politechniką Monachijską. Koordynatorem całego programu jest prof. W. Duch. Katedra Metod Komputerowych koordynuje szeroki program współpracy w zakresie komputerowego wspomagania dydaktyki różnych dziedzin. Interesujące programy dydaktyczne powstały dla potrzeb fizyki, psychologii, chemii, biologii i geografii.

W ramach tego programu prowadzono badania nad zastosowaniem hipertekstowych systemów multimedialnych w edukacji. Mgr H. Małek pracowała w 1995 roku przez kolejny semestr nad tym tematem w czasie stażu w Cambridge, w Department of Theoretical Physics and Applied Mathematics, kontynuując opracowywanie programu komputerowego w wersji polskiej po powrocie na UMK. Na zamówienie środowiska zajmującego się edukacją prof. Duch napisał szereg artykułów dotyczących globalnych sieci komputerowych i możliwości zastosowań komputerów w różnych dziedzinach nauki. Częścią programu „Komputerowo wspomagana edukacja” jest również praca nad nowymi programami nauczania w zakresie rozwoju komputerowych gałęzi tradycyjnych kierunków studiów i tworzenia nowych kierunków studiów. Dokonaliśmy gruntownej reformy programów nauczania na Wydziale Fizyki i Astronomii i będziemy pracować nad nowymi programami nauczania w nadchodzących latach.

Publikacje związane z tematem:

1. **Duch W**, *Sieci globalne w nauce i kulturze, cz. I-III*. Głos Uczelni nr. 4/95, s. 8-9; 5/95, s. 10-11; 6/95, s. 10-11

2. **Duch W**, *Sieci globalne w nauce i kulturze*. Komputer w Szkole **2** (1995) 19-28
3. **Duch W**, *Globalne sieci komputerowe w nauce i kulturze*, Kultura i Edukacja **3** (1995) 145-162
4. **Duch W**, *Życie wewnętrzne komputerów*, Komputer w Szkole, **3-4** (1995) 19-27
5. **Duch W**, *Możliwości sieci komputerowych*, Toruńskie Studia Dydaktyczne, **8** (1995) 18-33
6. **Duch W**, *Zastosowania komputerów*. W: Perspektywa edukacji z komputerem, red. B. Siemieniecki, Wyd. Adam Marszałek (Toruń-Płock 1995), pp.9-38
7. **Duch W**, *Sieci globalne w edukacji*. W: Badania środowiska, red. J. Turło (Top Kurier, Toruń 1995), pp. 151-155
8. **Małek H**, *Rozwijanie multimedialnych materiałów dydaktycznych do nauczania matematyki w Wielkiej Brytanii*. Ogólnopolskie Sympozjum nt. Techniki komputerowe w przekazie edukacyjnym, 29-30 września 1995, Kraków