

SPRAWOZDANIE Z DZIAŁALNOŚCI NAUKOWO-BADAWCZEJ KATEDRY METOD KOMPUTEROWYCH UMK W ROKU 1996

I TEMATY BADAWCZE

1. Liczba realizowanych tematów: 17
2. Liczba zakończonych tematów: 1
3. Działalność dotyczy badań podstawowych; nie przewidujemy wdrożeń ani przekazania rezultatów do wykorzystania poza publikacjami.
4. Nie przekazano żadnych tematów do wdrożenia.
5. Zaniechano realizacji jednego tematu.

II CZEŚĆ OPISOWA

1. Przyczyny zaniechania tematów prowadzonych i rozpoczętych w 1996 roku.

5. Zaniechano realizację jednego tematu, dotyczącego badania przydatności modeli sieci neuronowych w fizyce i chemii. Temat ten jako osobne zagadnienie badawcze zakończono w 1995 roku, wyrobiliśmy sobie już opinię na temat możliwości zastosowań takich modeli w fizyce i chemii. Na obecnym etapie naszej działalności temat ten stał się częścią innych zadań badawczych.

2. Krótka charakterystyka i podsumowanie wyników.

Główne tematy problematyki badawczej KMK koncentrują się wokół czterech grup tematycznych:

A) Interdyscyplinarny program badawczy dotyczący teorii i zastosowań modeli wykorzystujących sieci neuronowe (prof. W. Duch).

Jest to część szeroko zakrojonego, interdyscyplinarnego programu badawczego. W 1996 roku prace w tym zakresie prowadzono w ramach grantu KBN „Teoria i zastosowania systemów nerorozmytych” (kierownik, W. Duch, nakład: 40,000 zł na rok 1996) oraz, w części związanej z naukami o poznaniu i modelami świadomości, nie objętej grantem, w ramach badań statutowych i badań własnych.

W zakresie modelowania sieci neuronowych prace nasze dotyczą zarówno możliwości zastosowań jak i fundamentalnych mechanizmów działania struktur adaptujących się. W ramach tego programu pracujemy obecnie nad następującymi zadaniami badawczymi:

II.2.1 Modelowanie działania umysłu (cognitive modeling)

Naszym celem dalekosiężnym jest stworzenie standardowej teorii nauk kognitywnych, skupiającej w spójny sposób wokół jednego modelu wyniki badań z neurobiologii, psychologii i lingwistyki poznawczej a nawet filozofii umysłu i oparcie tej teorii na modelach matematycznych. Głównym problemem nauk kognitywnych jest brak pomostu pomiędzy neurobiologią a psychologią poznawczą. Nasze

badania opierają się na bardzo płodnej hipotezie traktowania problemu umysłu jako odpowiedniego przybliżenia do neurodynamiki opisującej działanie mózgu. Zwykle uproszczenie modeli neurodynamicznych pozwala badać tylko najprostsze, asocjacyjne funkcje kory mózgu. Prawidłowe upraszczanie modeli neurodynamicznych prowadzi do opisu przy pomocy przestrzeni cech (przestrzeni psychologicznych) i do realizacji modeli matematycznych w postaci systemów neurorozmytch. Dalsze upraszczanie tego opisu pozwala uzasadnić obecnie stosowane podejścia modelujące racjonalne cechy umysłu za pomocą systemów ekspertowych oraz opis zachowania przy pomocy teorii automatów skończonych. Podejście to daje bardzo ciekawe rezultaty, zarówno w zastosowaniu do fundamentalnych problemów w naukach poznawczych jak i w zastosowaniach technicznych. Wynikiem inspiracji z rozwijania tego typu modeli jest między innymi system neurorozmyty „Feature Space Mapping” (FSM), który zastosowaliśmy w wielu zagadnieniach dotyczących klasyfikacji danych. Przedyskutowano również eksperymenty psychologiczne dotyczące kategoryzacji w oparciu o model FSM pokazując, jak te same fakty można zinterpretować w psychologii poznawczej i neurobiologii.

Na temat modelowania kognitywnego wygłoszono szereg referatów na konferencjach krajowych i zagranicznych. Prof. Duch wygłosił referat zaproszony przez organizatorów sekcji nauk kognitywnych na dużej konferencji Soft Computing'96, zorganizowanej na Kyushu Institute of Technology, został też zaproszony do komitetów naukowych dwóch dużych konferencji Europejskich, ESANN'96 (European Symposium on Artificial Neural Networks), która odbyła się w Brugge, Belgia, EANN'96, Engineering Applications of Neural Networks, która odbyła się w Londynie, jak i drugiej z kolei konferencji zorganizowanej przez Polskie Towarzystwo Sieci Neuronowych, gdzie wygłosił 4-godzinny tutorial „From brain to mind”, oraz na kilku innych konferencjach.

Pobyty prof. Ducha w Japonii przyczynił się do nowych kontaktów związanych z rozwojem tego tematu, np. z prof. Torao Yanaru z Kyushu University of Technology w Kitakyushu, z którym planowana jest współpraca nad modelowaniem stanów emocjonalnych. Antoine Naud rozpoczął staż w „Vision Laboratory” Uniwersytetu w Antwerpii (od 1.10.1996). Badania prowadzone były częściowo w ramach grantu KBN „Rozwój i zastosowanie systemów neurorozmytch” a częściowo w ramach badań własnych i statutowych.

Publikacje:

Duch W, *Computational physics of the mind*. Computer Physics Communic. 97 (1996) 136-153

Duch W, *From cognitive models to neurofuzzy systems - the mind space approach*. Systems Analysis-Modelling-Simulation 24 (1996) 53-65

Duch W, *Categorization, Prototype Theory and Neural Dynamics*, in: Proc. of SoftComputing'96, Iizuka, Japan

Duch W, *From brain to mind to consciousness without hard problems*, Sympozjum Kognitywne '96: Świadomość a Percepcja. Instytut Filozofii UAM, 6-7 Dec. 1996, pp. 14

II.2.2. Neurobiologia kognitywna (cognitive neuroscience)

W ramach badań statutowych prowadzimy wstępne prace nad zastosowaniem modeli sieci neuronowych do badania funkcji mózgu, mieszczące się w nurcie neurobiologii kognitywnej. U uruchomiliśmy program GENESIS, duży symulator neuronów biologicznych opracowany przez grupę prof. Bowera z California Institute of Technology i badamy (mgr Ludwiczewski, prof. Duch) zachowania realistycznych neuronów przy różnych założeniach dotyczących statystyki sygnałów docierających do dendrytów. Celem tych badań jest opracowanie poprawnie uzasadnionych przybliżonych funkcji transferu neuronów modelowych.

Współorganizujemy konwersatorium kognitywne na UMK, zamierzamy w najbliższej przyszłości uruchomić studia specjalne w zakresie nauk o poznaniu. Prof. Duch kontynuował w 1996 roku wykłady z cieszącego się dużą popularnością wstępu do nauk o poznaniu. Niestety pomimo zaproszenia do współpracy przez dyrektora jeden z najlepszych ośrodków amerykańskich (prof. Jamesa Andersona z Cognitive and Linguistic Science Department) z braku funduszy do tej współpracy nie doszło. Znaczna część pobytu w Japonii prof. Ducha wiązała się z rozwojem tego tematu. Między innymi nawiązał on tam kontakty z grupą prof. Shiro Usui w Biological nad Physiological Engineering Laboratory,

Toyohashi University, oraz prof. Toshimitsu Mushy w Brain Function Laboratory, Kawasaki, Tokyo. Obydwie grupy łączą pracę teoretyczną i doświadczalną w zakresie neurobiologii kognitywnej.

Publikacje:

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

Duch W (1996) Minds and Machines (review, in print) Yves Burnod, *An Adaptive Neural Network. The Cerebral Cortex*

Duch W (1996) *Facing the hard problem*. Behavioral and Brain Sciences (wysłane)

II.2.3. Rozwój teorii i zastosowań systemów neurorozmytych

W ramach grantu KBN pracowaliśmy nad rozwojem systemu FSM (Feature Space Mapping). W znacznej mierze rozwinęliśmy oprogramowanie tego systemu, działające pod systemem Solaris na komputerach Sun, wprowadziliśmy nowe algorytmy wstępnej klasteryzacji, testowaliśmy system FSM w wielu zagadnieniach dotyczących klasyfikacji różnych danych. Wykonano również wstępne prace w celu sformułowania teorii sieci FSM w oparciu o podejście Bayesowskie do zagadnień estymacji gęstości prawdopodobieństwa. Przetestowano nowe funkcje transferu (funkcje biradialne) w sieciach FSM otrzymując bardzo dobre wyniki. Zbadano związki modelu FSM z metodami klasyfikacji opartymi na śladach pamięci (memory-based methods) i pokazano, że estymację gęstości w FSM traktować można jako ich uogólnienie.

Norbert Jankowski odbył staż w Department of Automatic Control and Systems Engineering, University of Sheffield, Wielka Brytania (15.09-15.11.96), zajmując się algorytmami uczenia sieci neuronowych, w szczególności sieciami typu INCNET.

Publikacje:

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

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

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

Duch W, Jankowski N, *Bi-radial transfer functions* (long version) UMK-KMK-TR 1/96 report

II.2.4. Ekstrakcja reguł logicznych za pomocą sieci neuronowych

W połowie 1996 roku rozpoczęliśmy nowy temat, w którym w krótkim czasie udało się nam osiągnąć bardzo dobre wyniki. Z wielu względów logiczny opis danych poddawanych klasyfikacji jest preferowany przez użytkowników systemów klasyfikacyjnych, a czasami opis taki może być dokładniejszy niż przy pomocy metod statystycznych czy metod uczenia maszynowego. Opracowaliśmy kilka nowych podejść do wyciągania reguł pozwalających na podanie warunków logicznych klasyfikacji wektorów danych korzystając z wstępnie sklasyfikowanych danych przykładowych. Pierwsza z tych metod korzysta z sieci FSM dla której wymuszamy logiczny opis danych, pozostałe metody korzystają ze standardowych perceptronów wielowarstwowych, zarówno w wersji klasycznej jak i konstruktywistycznej. Metody te doprowadziły nas do znalezienia najprostszych możliwych reguł w przypadku kilku baz danych. Spodziewamy się ich dużej przydatności jako rezultatów wzorcowych (benchmark results). Niestety w dalszym ciągu poszukiwanie reguł logicznych nie jest w pełni automatycznym procesem, temat ten będzie więc nadal kontynuowany. Ostatnio prace te prowadzone były przy współpracy z prof. Masumi Ishikawą i jego studentami z Kyushu Institute of Technology.

Publikacje:

Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K (1996) *Constrained backpropagation for feature selection and extraction of logical rules*, CAI'96, First Polish Conference on Theory and Applications of Artificial Intelligence, Łódź, 19-21.12.1996, pp. 163-170

Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K (1996) *Extraction of logical rules from training data using backpropagation networks*, CAI'96, First Polish Conference on Theory and Applications of Artificial Intelligence, Łódź, 19-21.12.1996, pp. 171-178

Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K (1996) *Extraction of logical rules from training data using backpropagation networks*, Proc. of the 1st Online Workshop on Soft Computing, 19-30 Aug. 1996; <http://www.bioele.nuee.nagoya-u.ac.jp/wsc1/>, pp. 25-30

Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K, Ishikawa M, Ueda H (1996) *Extraction of crisp logical rules using constrained backpropagation networks - comparison of two new approaches*, Proc. of the European Symposium on Artificial Neural Networks (ESANN'97), Brugge 16-18.4.1997, pp. xx-xx

Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K (1996) *Extraction of crisp logical rules using constrained backpropagation networks*, International Conference on Artificial Neural Networks (ICANN'97), Houston, 9-12.6.1997 (wysłane, sesja zaproszona)

Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K (1996) *Extraction of logical rules from backpropagation networks*, IEEE Transactions on Neural Networks (wysłane)

II.2.5. Samoorganizacja i uczenie się bez nadzoru

Kontynuowano porównywanie metod samoorganizacji i uczenia się bez nadzoru, opartych o algorytm Kohonena, z metodami wykorzystującymi skalowanie wielowymiarowe, mapowanie Sanmonna i inne podejścia; rezultatem tych badań jest opracowanie alternatywnej metody przedstawiania wielowymiarowych danych w niskowymiarowej przestrzeni, oraz ulepszenie metody Kohonena, które zostało wstępnie opisane w kilku pracach. Udało się nam również opracować zupełnie nową metodę klasyfikacji (classification by reference tokens), która jest obecnie testowana i zostanie wkrótce opublikowana.

Publikacje:

Duch W, Naud A, *On global self-organizing maps*. Proc. of the European Symposium on Artificial Neural Networks (ESANN'96), Brugge 22-26.4.1996, pp. 91-96

Duch W, Naud A, *Simplexes, Multi-Dimensional Scaling and Self-Organized Mapping*, in: Physics Computing '96, Kraków 17-21.9.1996

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

II.2.6. Wizualizacja i klasyfikacja danych psychometrycznych

W ramach badań statutowych i grantu UMK prowadziliśmy współpracę z pracownikami Katedry Psychologii UMK i Studium Pedagogicznego UMK (J. Gomuła, T. Kucharski). Wykonaliśmy pierwsze próby wizualizacji danych psychometrycznych przy użyciu nowej wersji algorytmu skalowania wielowymiarowego i samoorganizujących się map Kohonena (A. Naud, W. Duch) oraz opracowano założenia i wstępną wersję szkieletowego systemu ekspertowego NEURONEX do wspomagania decyzji diagnostycznych w psychiatrii (J. Gomuła, A. Korcala i T. Kucharski). System ten oparty jest na metodach diagnozy DSM-IV (Diagnostic and Statistical Manual of Mental Disorders).

Publikacje:

Duch W, Adamczak R, Jankowski N, Naud A, Gomuła J, Kucharski T, *Neural-based classification and visualization methods with applications to psychometry*, in: 34th International Seminar on Statistics and Clinical Practice, Warsaw 24-28.06.1996 (extended abstract), pp. 93-94

II.2.7. Alternatywne podejścia do układów adaptujących się

W 1996 roku kontynuowaliśmy (w ramach rozpoczętych prac magisterskich) kilka nowych tematów. Testowaliśmy i porównywaliśmy metody adaptacji opracowane w ramach teorii uczenia maszynowego, takie jak drzewa decyzji. Testowaliśmy również nowe podejście do neurodynamiki poszukując metod upraszczających opis układów dynamicznych, badając wpływ szumu na wymiar atraktorów w takich układach i badając relacje pomiędzy komputerami synergetycznymi Haakena a klasycznymi modelami sieci neuronowych opartych na neurodynamice. Zbadano również zagadnienie skalowania się złożoności metod klasyfikacji, co powinno pozwolić na ocenę przydatności różnych metod klasyfikacji do rozwiązywania złożonych problemów.

Publikacje:

Duch W (1996) KIT-TR-1/96 Report, *Scaling of classification methods*

B) Teoria układów złożonych (complex systems theory) i sztuczna inteligencja (prof. W. Duch)

II.2.8. Teoria informacji i układy złożone

Prace nad teorią układów złożonych kontynuowano w ramach badań statutowych. Próbuje się stworzyć teorię dla układów o dynamice złożonej lub nieznanej, w oparciu o przykłady zachowań (ewolucji lub wytworzonych struktur) układu. Badania te początkowo dotyczyły głównie struktur leksykograficznych. Kontynuowano pracę magisterską nad zastosowaniem metody łańcuchów Markowa do rozpoznawania struktury drugorzędowej białek i t-RNA w oparciu o oprogramowanie HMMER otrzymane z Washington University, które zostanie przystosowane do komputerów osobistych (pomimo otrzymania kodu źródłowego nie jest to proste).

Pracujemy też nad zastosowaniem nowej definicji pojęcia informacji syntaktycznej i semantycznej, zamierzając wykorzystać ją między innymi do hierarchicznej wstępnej klasteryzacji. Mamy nadzieję, że rozwiąże to problem szukania optymalnych architektur sieci neuronowych. Opracowano też wstępną wersję ciągłej wersji automatu Turinga, nowej podstawy teorii obliczeń w której zarówno dane jak i instrukcje są ciągłe. Badania w tym zakresie dopiero się rozpoczęły i na dłuższą metę mogą spowodować rewolucję w informatyce teoretycznej.

II.2.9. Inteligentne oprogramowanie wspierające obliczenia kwantowochemiczne

Projekt „Intelligent software for chemistry”, prowadzony jest przy współpracy z prof. G. Diercksem z Instytutem Maxa Plancka w Garching k. Monachium (prof. Duch jest zastępcą kierownika projektu). Projekt finansowany był przez program COST w 1995 roku i bierze w nim udział 7 europejskich grup badawczych. Pierwsze konferencje związane z tym tematem odbyły się w 1995 roku, jednakże trudności biurokratyczne związane z rozliczaniem tego projektu spowodowały, że w 1996 roku był on finansowany tylko przez Instytut Astrofizyki Maxa Plancka, gdzie prof. Duch spędził jeden miesiąc a mgr Grudziński (doktorant IF UMK, pracujący pod opieką prof. Ducha) pół roku. Udało się skonstruować realistyczny przykład systemu przewidującego spodziewane błędy obliczeń długości wiązań dla cząsteczek dwuatomowych przy zadanej bazie jednocząstkowej. Projekt zmierza więc w całkiem inną stronę niż początkowo planowano (miało to być system ekspertowy a teraz będzie przede wszystkim systemem klasyfikacji).

Możliwości stworzenia inteligentnego oprogramowania wspomagającego zastosowania metod chemii kwantowej do obliczeń własności cząsteczek chemicznych wydawały się sprawą dalszej przyszłości, przede wszystkim z braku odpowiedniej bazy wiedzy i bazy przykładów obliczeń, na których taki system można by wytrenować. Jednakże w styczniu 1997 roku okazało się, że nad podobnym problemem pracują eksperci z amerykańskiego laboratorium rządowego Pacific Northwest Laboratory

(PNL), zainteresowana jest również grupa badawcza z Tokyo (University of Telecommunications i firma NEC). Mamy nadzieję połączyć nasze wysiłki w najbliższej przyszłości.

Publikacja:

Duch W, *Artificial Intelligence Support for Computational Chemistry*, *Advances in Quantum Chemistry* xx (1996) xxx-xxx

II.2.10. Automatyczne dowodzenie twierdzeń

W prestiżowym piśmie „Journal of Automated Reasoning” ukazała się praca dr Larry Paulsona (Computer Laboratory University of Cambridge) i mgr Krzysztofa Grąbczewskiego na temat mechanizacji kilkadziesiątu wersji dowodów twierdzenia dotyczącego aksjomatu wyboru.

Paulson L.C, **Grąbczewski K**, *Mechanising Set Theory: Cardinal Arithmetic and the Axiom of Choice*, *Journal of Automated Reasoning* 17 (1996) 291-323

C) Metody fizyki komputerowej rozwiązywania równań opisujących własności i zachowanie się atomów i cząsteczek (prof. J. Wasilewski i dr J. Meller).

Prof. Wasilewski z współpracownikami prowadzi w ramach tej grupy tematów badania pod ogólnym hasłem „Struktura energetyczna małych cząsteczek” (szereg grantów wewnętrznych UMK w latach poprzednich). Uczestniczy 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 (w ramach badań własnych) nad symulacjami komputerowymi w zastosowaniu do zagadnień fizyki atomowo-molekularnej, zastosowaniem pseudopotencjałów w opisie budowy cząsteczek zawierających cięższe atomy, oraz teoretycznym opisem oddziaływania małych cząsteczek z powierzchniami krystalicznymi (współpraca z prof. V. Staemmlerem z Uniwersytetu w Bochum, Niemcy). W roku 1996 kontynuowano też publikowanie wyników badań prowadzonych w ramach (zakończonego w roku 1995) grantu KBN „Teoretyczne badania otwartopowłokowych stanów elektronowych cząsteczek”.

Dr Jarosław Meller, przy współpracy prof. W. Duchy, prowadzi badania nad rozwojem metod uwzględniających korelację elektronową pod ogólnym hasłem „Rozwój metod oddziaływania konfiguracyjnego”.

Najważniejsze wyniki uzyskane w tej grupie tematów to:

II.2.11. Teoretyczne badania otwartopowłokowych stanów elektronowych cząsteczek

Uzyskano następujące wyniki:

1. Przeprowadzono pierwszą w literaturze, wszechstronną klasyfikację otwartopowłokowych stanów elektronowych cząsteczek. Podstawą tej klasyfikacji jest badanie struktury konfiguracyjnej wieloelektronowej funkcji stanu zarówno w otoczeniu punktów stacjonarnych na powierzchni energetycznej, jak i wzdłuż współrzędnych uogólnionych, opisujących realne przekształcenia konformacyjne cząsteczki. Klasyfikacja ta jest próbą unifikacji takich zjawisk, jak wzbronienia typu Woodwarda-Hoffmanna, przecięcia stożkowe, stabilizacje Rennera-Tellera, punkty typu „avoided crossing”, oddziaływania van der Waalsa.

Publikacja: J. Wasilewski, *A Classification of Open-Shell States of Molecules*. *Int. J. Quantum Chem.* **57** (1996) 625-640

2. 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).

Publikacja: J. Wasilewski, *Stationary Points on the Lowest Doublet and Quartet Hypersurfaces of the N_3 Radical: A Comparison of Molecular Orbital and Density Functional Approaches* J. Chem. Phys. 105 (1996) 10969-10982

3. 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 - Orthogonalized Natural Orbitals) w ograniczonych obliczeniach typu CI dla cząsteczek, w których liczba elektronów walencyjnych znacznie przekracza liczbę formalnych wiązań chemicznych.

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

4. 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) i DFT: peroxymethylene (I), dioxirane (II), methylenebis(oxy) (III) i kwas mrówkowy (IV). Stosując uogólnione funkcjonały gradientowe i bardzo obszerne bazy funkcyjne stwierdzono, że zgodne z doświadczeniem ciepła tworzenia układów I i III można otrzymać jednie przy założeniu, że odpowiednie stany podstawowe mają charakter dwurodników trypletowych.

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

II.2.12. Teoretyczne badania struktury energetycznej małych cząsteczek (kontynuacja grantów UMK z lat poprzednich)

We współpracy z prof. J. Heldtem (Uniwersytet Gdański) przeprowadzono teoretyczną analizę widma elektronowo-oscylacyjnego fosforescencji glyksalu $(CHO)_2$ (przejście singlet-tryplet). W obliczeniach typu DFT zastosowano szereg funkcjonałów i różne bazy funkcyjne, aż do bardzo obszernej. Użytkano poprawne odtworzenie energii wzbudzenia do stanu trypletowego, energii wzbudzeń oscylacyjnych w obu stanach (w przybliżeniu harmonicznym) i geometrii cząsteczki. Dalsze badania dotyczą oceny efektów anharmonicznych i ewentualnie sprzężenia oscylacyjno-rotacyjnego.

Publikacja: J. Heldt, J. Wasilewski, S. Zelek - w przygotowaniu

II.2.13. Opracowanie nowych metod opisu stanów niezamkniętopowłokowych atomów i cząsteczek (grant KBN kierowany przez prof. dr hab. K. Jankowskiego z IF UMK, w którym uczestniczy 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.

II.2.14. 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: teoretyczna analiza cyklu Fentona - katalizowanego jonami Fe lub Cu rozpadu H_2O_2 na rodnik OH i anion OH^- , reaktywne

formy tlenu, występujące w łańcuchach oddechowych organizmów jako czynniki toksyczne (K. Jużków - praca magisterska 1996/7);

- zastosowanie różnego typu funkcjonałów mieszanych i baz typu „even-tempered” w metodzie DFT, na przykładzie niższych stanów jonu HeNe⁺ (M. Redmerska, M. Siódmiak);
- zastosowanie metod DFT do opisu stanów otwartopowłokowych i jej porównanie z typowymi metodami opisu korelacji elektronowej (CI, CC, MPx), na przykładzie LiH (M. Wierzbowska)
- oddziaływanie małych cząsteczek z powierzchniami kryształów jonowych: adsorpcja tlenu (atomowego i molekularnego) na powierzchni Cr₂O₃(0001), badania techniką „embedded cluster” na poziomie SCF (wspólnie z prof. V. Staemmlerem, Uniwersytet w Bochum, Niemcy), oraz metodami DFT (M. Wierzbowska)
- zastosowanie metod pseudospektralnych w sformułowaniu DVR (Discrete Variable Representation) do badań oscylacji cząsteczek wieloatomowych z uwzględnieniem efektów anharmonicznych (S. Zelek)

II.2.15 Inne (prof. Wasilewski):

Dokonano implementacji licencjonowanych wersji systemów GAUSSIAN-94/DFT, GAMESS i CAD-PAC na superkomputerze równoległym SUN-Microsystems Enterprise 6000; podjęto prace nad przygotowaniem wersji wykorzystujących explicite architekturę równoległą (S. Zelek).

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, <http://hackberry.chem.niu.edu:70/0/ECCCinformation.html>

II.2.16. Rozwój metod typu oddziaływania konfiguracyjnego (dr J. Meller)

W 1996 roku kontynuowano prace nad rozwojem metod obliczeniowych w fizyce molekularnej, w szczególności nowych wersji metody oddziaływania konfiguracyjnego. Praca doktorska dr J. Meller została obroniona w czerwcu 1996 roku. Prace dotyczące ekstensywnych wersji wielokonfiguracyjnych metod oddziaływania konfiguracyjnego wykonano przy współpracy z Lab. Physique Quantique, Paul Sabatier Universite, Tuluza, Francja, Universitat Rovira i Virgili w Tarragonie, Hiszpania i University of Arizona, USA a wyniki opublikowano w najlepszych pismach. Znacznie rozwinięto kilka wersji ekstensywnych rozszerzeń metody CI oraz metodę superbezpośredniego CI. Badania te prowadzone były początkowo w oparciu o umowę pomiędzy ministerstwem spraw zagranicznych Francji i KBN, a potem w ramach badań własnych KMK. Niektóre prace dotyczące tego tematu będą nadal kontynuowane w najbliższych kilku latach przez dr Meller. Od 1.10.1996 przebywa on na stażu w Fritz Haber Center (Hebrew University, Izrael), pracując obecnie nad dynamiką białek, tematem, który bardziej pasuje do głównego nurtu badań zespołu prof. Duchy.

Publikacje: Adamowicz L, R. Caballol, J.P. Malrieu and J. Meller, *A general bridge between CI and CC methods: a multistate solution*; Chem. Phys. Letters 259 (1996) 619;

Meller J, J.P. Malrieu and R. Caballol, *State-specific Coupled Cluster type dressing of Multireference Singles and Doubles Configuration Interaction matrix*. Journal of Chemical Physics 104 (1996) 4068

D) Badania w zakresie dydaktyki wspomaganiej metodami komputerowymi.

II.2.17. Badania w zakresie dydaktyki wspomaganiej metodami komputerowymi

Po zakończeniu programu „Komputerowo wspomaganą edukacją” finansowanego przez biuro TEM-PUS wiele projektów rozpoczętych na uczelni kontynuowano nadal. Wykonujemy prace w zakresie

komputerowych metod wspomaganie dydaktyki, zastosowania hipertekstu i technik „multimedia” w edukacji, w szczególności w nauczaniu matematyki, fizyki i chemii teoretycznej. Brałiśmy również udział w interdyscyplinarnym programie dotyczącym komputerowego wspomaganie badań środowiska naturalnego (kierownik: dr J. Turło). Mgr Halina Małek kontynuowała opracowywanie multimedialnego programu komputerowego do wspomaganie nauczania matematyki w wersji polskiej i nawiązała współpracę z dr Hugh McIntyre z Department of Mathematics and Computer Science, University of Salford, Manchester, gdzie odbędzie 3-miesięczny staż w 1997 roku. Na zamówienie środowiska pedagogów prof. W. Duch napisał artykuł na temat możliwości rozwoju komputerów.

Publikacja

Duch W, *Życie wewnętrzne komputerów*. Komputer w Szkole, **3-4** (1996) 19-27

III PUBLIKACJE

III.1. W omawianym okresie ukazało się ogółem 28 prac, w tym:

oryginalnych prac badawczych: 22
 podręczników i skryptów: 0
 publikacji naukowo-popularnych: 3
 redakcji książek naukowych, tłumaczeń: 0
 artykułów, recenzji: 3

III.2. Liczba prac przyjętych do druku: 6

III.3. Przykłady publikacji związanych z działalnością pracowników i współpracowników KMK:

Adamowicz L, R. Caballol, J.P. Malrieu and **J. Meller**, *A general bridge between CI and CC methods: a multistate solution*; Chem. Phys. Letters 259 (1996) 619

Duch W, *Computational physics of the mind*. Computer Physics Communic. 97 (1996) 136-153

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

Duch W (1996) Review of „*The roots of backpropagation. From Ordered Derivatives to Neural Networks and Political Forecasting*”, by Paul John Werbos. **Network** 7: 151

Duch W, *From cognitive models to neurofuzzy systems - the mind space approach*. Systems Analysis-Modelling-Simulation 24 (1996) 53-65

Duch W, *Categorization, Prototype Theory and Neural Dynamics*, in: Proc. of SoftComputing'96, Iizuka, Japan

Duch W, *Artificial Intelligence Support for Computational Chemistry*, Advances in Quantum Chemistry xx (1996) xxx-xxx

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

Duch W, **Adamczak R**, **Grąbczewski K** (1996) *Constrained backpropagation for feature selection and extraction of logical rules*, CAI'96, First Polish Conference on Theory and Applications of Artificial Intelligence, Łódź, 19-21.12.1996, pp. 163-170

Duch W, **Adamczak R**, **Grąbczewski K** (1996) *Extraction of logical rules from training data using backpropagation networks*, CAI'96, First Polish Conference on Theory and Applications of Artificial Intelligence, Łódź, 19-21.12.1996, pp. 171-178

Duch W, **Adamczak R**, **Grąbczewski K** (1996) *Extraction of logical rules from training data using backpropagation networks*, Proc. of the 1st Online Workshop on Soft Computing, 19-30 Aug. 1996; <http://www.bioele.nuee.nagoya-u.ac.jp/wsc1/>, pp. 25-30

- 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
- 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
- Duch W, Naud A**, *On global self-organizing maps*. Proc. of the European Symposium on Artificial Neural Networks (ESANN'96), Bruge 22-26.4.1996, pp. 91-96
- Duch W, Naud A**, *Simplexes, Multi-Dimensional Scaling and Self-Organized Mapping*, in: Physics Computing '96, Kraków 17-21.9.1996
- 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
- Meller J**, J.P. Malrieu and R. Caballol, *State-specific Coupled Cluster type dressing of Multireference Singles and Doubles Configuration Interaction matrix*. Journal of Chemical Physics **104** (1996) 4068
- Paulson L.C, **Grąbczewski K**, *Mechanising Set Theory: Cardinal Arithmetic and the Axiom of Choice*, Journal of Automated Reasoning **17** (1996) 291-323
- Wasilewski J**, *A Classification of Open-Shell States of Molecules*. Int. J. Quantum Chem. **57** (1996) 625-640
- Wasilewski J**, S. Zelek and M. Wierzbowska, *Modifications of Virtual Orbitals in the Limited CI Calculations for Electron-Rich Molecules* Int. J. Quantum Chem. **60** (1996) 1027-1036
- Wasilewski J.**, *Stationary points on the doublet and quartet hypersurfaces of the N_3 radical: A comparison of molecular orbital and density functional approaches*, J. Chem. Phys., **105** (1996) 10969-10982

• **Pracownicy i doktoranci KMK wygłosili wiele referatów biorąc udział w licznych konferencjach w kraju i za granicą, np:**

- R. Adamczak, Colloquia in Artificial Intelligence, Łódź, 19-21.12.1996, *Constrained backpropagation for feature selection and extraction of logical rules* (with W. Duch and K. Grąbczewski).
- R. Adamczak, Nowe metody w analizie danych astronomicznych, Piwnice 18.09.1996, *Rozpoznawanie typów galaktyk za pomocą sieci neuronowych*
- R. Adamczak, Second Conference on Neural Networks And Their Applications, Orle Gniazdo, kwiecień 1996, poster: *Feature Space Mapping network for classification*, w czasie konferencji
- W. Duch, *Dynamical systems approach to models of mind* (wykład zaproszony), Open systems and information dynamics, Toruń, Poland, 19-22 March 1996 (session chairman)
- W. Duch, ESANN'96, 4th European Symposium on Artificial Neural Networks. Bruge, Belgium, 19-21.04.1996 (member of the scientific committee, session chairman) *Multidimensional scaling and Kohonen's self-organizing maps* (paper with A. Naud)
- W. Duch, Recent Advances in Computational Quantum Chemistry, Munich, 28-31.03.1996 (session chairman) Contribution: *Artificial intelligence support for quantum chemistry* (wykład zaproszony)
- W. Duch, 34th ICM Seminar: Statistic and Clinical Practice, 24--28 June, 1996, Warsaw Poland, referat zaproszony *Neural-Based Classification and Visualization Methods with Applications to Psychometry* (with R. Adamczak, N. Jankowski, A. Naud, J. Gomuła and T. Kucharski).
- W. Duch, Neural networks and their applications, Orle Gniazdo, kwiecień 1996, poster: *On simplifying brain functions*
- W. Duch, Second Conference on Neural Networks And Their Applications, Orle Gniazdo, kwiecień 1996, tutorial: *Cognitive and neural brain function modeling* (członek komitetu naukowego, przewodniczący sesji plenarnej).
- W. Duch, EANN'96, Engineering Applications of Neural Networks, London, 21-28.08.1995, referat: *Improved memory-based classification* (member of the scientific committee, session chairman, paper with R. Adamczak, N. Jankowski).
- W. Duch, A. Naud, Physics Computing'96, Kraków 9/1996, poster: *Simplexes, Multi-Dimensional Scaling and Self-Organized Mapping* (member of the scientific committee, organization of neural computing session).

- W. Duch, International Conference on Fuzzy Logic and Neural Systems, Iizuka, Sept. 29-Oct. 5, 1996 Contribution: *Categorization, prototype theory and neural dynamics* (wykład zaproszony, w sesji nauk kognitywnych)
- K. Grąbczewski, Open systems and information dynamics, Toruń, Poland, 19-22 March 1996, referat: *Formalizing Mathematics inside Theorem Provers*
- K. Grąbczewski, Colloquia in Artificial Intelligence CAI'96, Łódź, 19-21.12.1996, *Extraction of logical rules from neural networks* (with W. Duch and R. Adamczak).
- N. Jankowski, Open systems and information dynamics, Toruń, Poland, 19-22 March 1996, referat: *Levin's Algorithmic Information in Machine Learning*
- N. Jankowski, Second Conference on Neural Networks And Their Applications, Orle Gniazdo, kwiecień 1996, poster: *On optimal network processing functions* (with W. Duch)
- A. Naud, Second Conference on Neural Networks And Their Applications, Orle Gniazdo, kwiecień 1996, referat *Multidimensional scaling and Kohonen's self-organizing maps* (paper with W. Duch)
- A. Naud, Open systems and information dynamics. Toruń, Poland, 19-22 March 1996, referat: *Self organisation and data vizualisation*
- M. Wierzbowska uczestniczyła w sympozjum roboczym organizowanym przez Gaussian Inc., „Gaussian Workshop”, Liege (Belgia), 3-6.12.1996, gdzie przedyskutowała z autorami systemu programów Gaussian-94/DFT szereg problemów powstających w badaniach prowadzonych przez zespół naukowy prof. Wasilewskiego

• **Referaty i wykłady wygłoszone poza konferencjami, nie licząc seminariów lokalnych:**

- Duch W**, Kyushu Institute of Technology, Kitakyushu, Japan, 11.10.1996, *Neurophysiology and a Platonic model of mind* (Prof. T. Yanaru)
- Duch W**, Kyushu University, Fukuoka, Japan, 22.11.1996, *Extraction of logical rules and selection of features using neural networks* (Prof. E. Miyoshi)
- Duch W**, Department of Artificial Intelligence and Cognitive Science, Chukyo University, Nagoya, Japan 5.12.1996, *Models of memory and learning* (Prof. Y. Miyata)
- Duch W**, Biological and Physiological Engineering Laboratory, Toyohashi University, Toyohashi, Japan, 7.12.1996, *Extraction of logical rules and selection of features using neural networks* (Prof. S. Usui)
- Duch W**, Department of Engineering, University of Tokyo, 12.12.1996. *Extraction of logical rules and selection of features using neural networks* (Prof. K. Hirao)
- Duch W**, The University of Electrocommunications, Chofu, 13.12.1996. *Neurophysiology and a Platonic model of mind* (Profs. K. Tanaka, T. Kambara)
- Duch W**, Kyushu University of Technology, Iizuka, Japan, 17.12.1996, *Extraction of logical rules and selection of features using neural networks* (Prof. M. Ishikawa)
- Meller J**, *Metoda oddziaływania konfiguracyjnego*, cykl referatów w ramach seminarium: Metody Komputerowe w Badaniach Układów wieloatomowych (KMK, Zakład Chemii Teoretycznej ICh).
- J. Wasilewski**, *Classification of open-shell states of molecules*, seminarium Lehrstuhl fuer Theoretische Chemie, Ruhr-Universitaet, Bochum (RFN), 21.08.1996
- J. Wasilewski**, *Oxygen adsorption on the Cr₂O₃(0001) surface*, seminarium robocze Graduirtenkolleg Dynamische Prozesse an Festkoerperoberflaechen, Bochum (RFN), 07.96
- Meller J**, *Metoda oddziaływania konfiguracji*, seminarium KMK i ZChT (Metody komputerowe w badaniach układów wieloatomowych)
- Meller J**, *Nowe algorytmy obliczeniowe oparte na metodzie oddziaływania konfiguracji*, IF UMK (kolokwium czwartkowe)
- Meller J**, *Pomiedzy CI a CC - ekstensywne wymiarowo modyfikacje metody CI*, Inst. Chemii UW
- Meller J**, *New computational algorithms based on CI method*, Fritz Haber Center (Hebrew University, Israel)

- **Staż zagraniczne:**

Duch Włodzisław - Max Planck Inst. fuer Astrophysik, Garching, Germany, lipiec 1996 (prof. Geerd H.F. Diercksen)

Duch Włodzisław - KIT Iizuka, Japonia, 23.09-23.12.1996 (prof. Masumi Ishikawa)

Jankowski Norbert - staż w University of Sheffield, Department of Automatic Control and Systems Engineering, Sheffield, W. Brytania, 2 miesiące, 15.09-15.11.95 (prof. Visakan Kadirkamanathan)

Naud Antoine - od 1.10.96, staż naukowy w Uniwersytecie Antwerpii (RUCA), laboratorium "VisieLab". Zastosowanie sieci neuronowych do analizy obrazów (prof. Van Dyck)

Meller Jarosław - Fritz Haber Center (Hebrew University, Israel) - od 1.10.96. dynamika molekularna białek (prof. Ron Elber)

J. Wasilewski, Graduirtenkolleg Dynamische Prozesse an Festkoerperoberflaechen, Fakultaeet fuer Chemie, Ruhr-Universitaet, Bochum (RFN), 01.06-31.08.96 (prof. V. Staemmler); teoretyczny opis adsorpcji tlenu (atomowego i molekularnego) na powirzchni kryształu tlenku chromu

- **Inne informacje na temat działalności pracowników KMK**

W. Duch został powołany na okres trwania XI i XII konkursu Komitetu Badań Naukowych do Zespołu Automatyki, Elektroniki, Informatyki i Telekomunikacji, sekcji Technika w Medycynie (T11E);

J. Wasilewski kierował seminarium naukowym: Metody komputerowe w badaniach układów wieloatomowych, w roku 1996 wygłoszono łącznie 12 referatów;

J. Wasilewski od 01.09.1996 pełni funkcję prodziekana Wydziału Fizyki i Astronomii UMK d/s reformy systemu kształcenia (3-letnia kadencja)