

SPRAWOZDANIE Z DZIAŁALNOŚCI NAUKOWO-BADAWCZEJ KATEDRY METOD KOMPUTEROWYCH UMK W ROKU 1999

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.
5. Nie zaniechano realizacji żadnego tematu.

II. CZĘŚĆ OPISOWA

II.1. Przyczyny zaniechania tematów prowadzonych i rozpoczętych w 1999 roku.

W 1999 roku nie zaniechaliśmy realizacji żadnego tematu; jeden temat nie był aktywnie realizowany, ale sytuacja powinna się zmienić w 2000 roku.

II.2. Krótka charakterystyka i podsumowanie wyników uzyskanych w 1999 roku.

Problematyka badawcza KMK skoncentrowana jest wokół trzech grup tematycznych.

A) Interdyscyplinarny program badawczy dotyczący metod inteligencji obliczeniowej (computational intelligence), a w szczególności szeroko pojętych zagadnień modelowania sieci neuronowych i systemów uczących się.

Jest to część interdyscyplinarnego programu badawczego kierowanego przez prof. W. Ducha, finansowanego w części dotyczącej zastosowań medycznych przez realizowany w 1999 roku grant KBN „Systemy uczące się w zastosowaniu do analizy danych medycznych i psychometrycznych” oraz w części związanej z kognitywistyką i modelami umysłu, nie wchodzącej w tematykę grantu, przez badania własne i statutowe KMK. 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 Modelowanie kongitywne (cognitive modeling).

Kognitywistyka (nauki o poznawaniu) nie istnieje jeszcze w Polsce jako odrębna dyscyplina badawcza. Nasze prace w tym zakresie zmierzają w kierunku empirycznie uzasadnionych teorii umysłu w oparciu o modele sieci neuronowych. Teoria ta 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.

Przy współpracy z Instytutem Neuropsychologii Maxa Plancka w Lipsku, gdzie magistrant prof. Ducha spędził 4 miesiące w letnim semestrze 1999 roku, pracując nad metodą czynników niezależnych (ICA) w zastosowaniu do analizy obrazów fMRI. Mgr Jankowski spędził 2 tygodnie na letniej szkole modelowania koneksjonistycznego, zorganizowanej przez wydział Psychologii Eksperymentalnej Oxford University, korzystając ze wsparcia grantem z tej instytucji. Prof. Duch kontynuował współpracę z Instytutem Badań Psychologicznych Maxa Plancka w Monachium nad integracją sensomotoryczną, był również konsultantem poddawanego obecnie ocenie projektu Artificial Brain, powstałego w Tokyo Institute of Technology. Nawiązał również współpracę z prof. T. Gedeonem i dr Andrew Cohenem z Murdoch University, Zach. Australia, zajmujących się modelami systemów o wielkiej złożoności, porównywalnej ze złożonością ludzkiego mózgu. Prof. Duch kilkakrotnie odwiedził również Instytut Biologii Eksperymentalnej PAN, nawiązując kontakt z prof. Andrzejem Wróblem, kierownikiem pracowni badań układu wzrokowego.

Prof. Duch napisał pracę przeglądową na temat zastosowania sieci neuronowych do modelowania syndromów neuropsychologicznych i chorób psychicznych. wygłosił też na ten temat referat dla psychiatrów zrzeszonych w Pomorsko-Kujawskim Towarzystwie Psychiatrycznym. Takie modele wymagają uproszczonego opisu zachowania się sieci w postaci ewolucji automatów skończonych a w niektórych przypadkach w postaci reguł logicznych. W szczególności badamy metody upraszczania opisu złożonych układów dynamicznych, takich jak zbiór neuronów, zamierzając znaleźć serię systematycznych przybliżeń, pozwalająca na uzasadnienie przejść pomiędzy modelami na różnym poziomie szczegółowości (od zjawisk bioelektrycznych na błonach komórkowych do opisu dużych grup neuronów). Mgr Jankowski opracował neuronową konstrukcję maszyny Turinga. Mamy nadzieję na stworzenie dobrego, opartego na sieciach neuronowych, modelu tworzenia się reprezentacji mentalnych.

Prof. Duch przewodniczy komitetowi naukowemu utworzonego przy współpracy z logiczami, filozofami i pedagogami z UMK pisma, „Kognitywistyka i media w edukacji”. W 1999 roku ukazał się drugi numer (około 300 stron) a trzeci jest w druku. Pismo to ma na celu integrację środowiska osób interesujących się kognitywistyką w Polsce. Prof. Duch pracuje również nad serią książek stanowiących wprowadzenie do kognitywistyki. Notatki do tych książek i wykładu będącego wstępem do kognitywistyki, integrującego wiadomości dotyczące filozofii, neurofizjologii, psychologii poznawczej i sieci neuronowych, zostały udostępnione w Internecie.

Wspólnie z pracownikami z innych jednostek UMK dążymy do powołania specjalizację kognitywną w ramach filozofii. Jest to pierwszy krok w stronę powstania nowego, interdyscyplinarnego kierunku studiów specjalnych w tym zakresie. Służą temu „konwersatoria kognitywne”, organizowane przy aktywnej współpracy naszej Katedry na UMK, oraz utworzenie w najbliższej przyszłości Centrum Nauk Kognitywnych.

Ostatnie publikacje związane z tematem to:

1. Duch W, Kucharski T, Gomuła J, Adamczak R, *Metody uczenia maszynowego w analizie danych psychometrycznych. Zastosowanie do wielowymiarowego kwestionariusza osobowości MMPI-WISKAD* (Toruń, Marzec 1999; 650 str., ISBN 83-231-0986-9)
2. Duch W (2000) *Sieci neuronowe w modelowaniu zaburzeń neuropsychologicznych i chorób psychicznych*.

Biocybernetyka 2000, Tom 6: Sieci neuronowe (red. W. Duch, J. Korbicz, L. Rutkowski i R. Tadeusiewicz), rozdz. II.18, pp. xxx-yyy

3. Duch W, *Duch i dusza, czyli prehistoria kognitywistyki*. Kognitywistyka i Edukacja Medialna 1 (1999) pp. 7-38
4. Duch W (1999) *Jaka teoria umysłu w pełni nas zadowoli?* Kognitywistyka i Edukacja Medialna 2: xxx-yyy
5. Duch W, *What constitutes a good theory of mind?* Foundations of Science (wysłane)
6. Duch W, *Conscious mind as a limit of brain-like computing*. Minds and Machines (wysłane).

II.2.2 Rozwój teorii i zastosowań systemów neurorozmytych.

Prowadzono dalsze prace nad uniwersalnym systemem neurorozmytym, 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. Testowano i rozwijano oprogramowanie systemu FSM opartego na własnym, oryginalnym podejściu do systemów neurorozmytych, zainspirowanym przez model umysłu oparty na przestrzeniach psychologicznych. Rozwój systemu FSM w zastosowaniach do aproksymacji i klasyfikacji wchodzi w zakres dwóch prac doktorskich, mgr Adamczaka i ukończonej w 1999 roku pracy mgr Jankowskiego. Część dotycząca logiki rozmytej i możliwości wykorzystania tego systemu w procesach wnioskowania, jako systemu ekspertowego, będzie również tematem niezależnej pracy doktorskiej.

W 1999 roku rozwijano oprogramowanie systemu FSM, implementując i testując algorytmy dotyczące stabilizacji modeli (uśredniania wyników po wielu różnych modelach), ulepszenia metod inicjalizacji parametrów sieci, traktowania zmiennych symbolicznych i wartości brakujących oraz zastosowań FSM do odkrywania reguł logicznych w złożonych bazach danych. Testowano algorytmy obracania konturów decyzyjnych zlokalizowanych funkcji dyskryminacyjnych – oprócz rozwiniętego w naszej grupie systemu IncNet jest to jedyny system neuronowy, który za pomocą N parametrów może dokonać obrotu konturów decyzyjnych w wielowymiarowej przestrzeni cech w czasie uczenia. Sieć FSM zastosowaliśmy do wspomagania diagnoz medycznych i psychometrycznych, osiągając bardzo dobre wyniki. Rozwinięto również działający w systemie Unix i Windows 9x graficzny interfejs do naszego oprogramowania.

Ostatnie publikacje związane z tematem to:

1. Adamczak R, Duch W (2000) *Model FSM w zastosowaniu do klasyfikacji*. Biocybernetyka 2000, Tom 6: Sieci neuronowe (red. W. Duch, J. Korbicz, L. Rutkowski i R. Tadeusiewicz), rozdz. III.26, pp. xxx-yyy
2. Duch W, Jankowski N (1999) *Survey of neural transfer functions*, Neural Computing Surveys (w korekcie)
3. Duch W, Korczak J (1999) *Optimization and global minimization methods suitable for neural networks*, Neural Computing Surveys (po wstępnych recenzjach)
4. Duch W, Kucharski T, Gomuła J, Adamczak R, *Metody uczenia maszynowego w analizie danych psychometrycznych. Zastosowanie do wielowymiarowego kwestionariusza osobowości MMPI-WISKAD* (Toruń, Marzec 1999; 650 str., ISBN 83-231-0986-9)

II.2.3 Odkrywanie wiedzy w bazach danych za pomocą metod inteligencji obliczeniowej

W dalszym ciągu rozwijaliśmy metody odkrywania wiedzy dzięki ekstrakcji reguł logicznych z danych treningowych za pomocą sieci neuronowych, drzew decyzji i metod globalnej optymalizacji. Jest to część bardzo modnej obecnie dziedziny, określanej jako „data mining”, czyli dogłębna analiza danych lub odkrywanie wiedzy w bazach danych. Oprócz systemu FSM stosujemy w tym celu algorytm C-

MLP2LN dla wielowarstwowych perceptronów trenowanych metodą wstecznej propagacji. Rozwinęliśmy też nowe metody ekstrakcji reguł oparte na kryterium separowalności (SSV), prowadzące do bardzo użytecznego drzewa decyzyjnego, zastosowaliśmy sieci neuronowe o dyskretnych parametrach (wagach i progach), trenowane za pomocą algorytmów szukania wiązki zamiast klasycznych algorytmów gradientowych, oraz metody oparte na szukaniu charakterystycznych prototypów, wykorzystujące nowe miary podobieństwa.

Wyniki tych badań prezentowane były w najlepszych pismach i na kilku prestiżowych konferencjach naukowych. Niektóre zestawy odkrytych przez nas reguł przechowywane są jako wzorcowe (benchmark) w dostępnym przez Internet repozytorium baz danych do testowania metod uczenia maszynowego na Uniwersytecie Kalifornijskim w Irvine. W ramach grantu KBN przeanalizowaliśmy różne dane medyczne zbierane w kraju i za granicą oraz dane psychometryczne zbierane głównie na naszym Uniwersytecie. Otrzymane przez nas reguły pozwoliły stworzyć system ekspertowy do wspomagania diagnoz psychometrycznych, używany obecnie w praktyce w Akademickiej Przychodni Lekarskiej UMK.

Temat ten rozwijany jest przy współpracy z prof. Y. Hayashi z Meiji University, Tokyo, prof. M. Ishikawą z Kyushu Institute of Technology, prof. N. Kasabovem z University of Otago, Nowa Zelandia oraz prof. J. Żytkowem z University of North Carolina, USA.

Publikacje:

1. Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K, Żal G, Hayashi Y (1999) *Fuzzy and crisp logical rule extraction methods in application to medical data*. Computational Intelligence and Applications. Springer (Studies in Fuzziness and Soft Computing, Vol. 41, ed. P.S. Szczepaniak) 1999, pp. 593-616
2. Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K (1999) *Neural optimization of linguistic variables and membership functions*. International Conference on Neural Information Processing (ICONIP'99), Perth, Australia, Nov. 1999, Vol. II, pp. 616-621
3. Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K, *Neural methods for analysis of psychometric data*. Proc. of the Intern. Conference on the Engineering Applications of Neural Networks '99, Warsaw, 13-15.09.1999, pp. 45-50
4. Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K, *Methodology of extraction, optimization and application of crisp and fuzzy logical rules*. IEEE Transactions on Neural Networks (w druku, marzec 2000)
5. Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K (1999) *Optimization of logical rules derived by neural procedures*, 1999 International Joint Conference on Neural Networks, Washington, July 1999, paper no. 741 (6 str)
6. Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K, *Methodology of extraction, optimization and application of logical rules*, Intelligent Information Systems VIII, Ustroń, Poland, 14-18.06.1999, pp. 22-31
7. Duch W, Grąbczewski K (1999) *Searching for optimal MLP*, Fourth Conference on Neural Networks and Their Applications, Zakopane, May 1999, pp. 65-70
8. Grąbczewski K, Duch W (1999) *A general purpose separability criterion for classification systems*, Fourth Conference on Neural Networks and Their Applications, Zakopane, May 1999, pp. 203-208
9. Grąbczewski K, Duch W, Adamczak R (2000) *Neuronowe metody odkrywania wiedzy w danych*. Biocybernetyka 2000, Tom 6: Sieci neuronowe (red. W. Duch, J. Korbicz, L. Rutkowski i R. Tadeusiewicz), rozdz. III.20, pp. xxx-yyy
10. Duch W, Kucharski T, Gomuła J, Adamczak R, *Metody uczenia maszynowego w analizie danych psychometrycznych. Zastosowanie do wielowymiarowego kwestionariusza osobowości MMPI-WISKAD* (Toruń, Marzec 1999; 650 str., ISBN 83-231-0986-9)

II.2.4 Rozwój nowych algorytmów uczenia sieci neuronowych

Kontynuowaliśmy prace nad nowymi modelami sieci neuronowych i nowymi procedurami uczenia.

a) Opracowano taksonomię funkcji transferu w sieciach neuronowych i podano argumenty za uznaniem wyboru funkcji transferu za zagadnienie równie ważne co algorytmy uczenia i nowe architektur sieci neuronowych. Podano cały szereg nowych, nie stosowanych dotychczas funkcji transferu.

b) Wprowadzono nowy model sieci neuronowych o architekturze MLP, w którym wszystkie parametry są dyskretne i kodowane są z coraz większą rozdzielczością. Model S-MLP uczony jest za pomocą algorytmów szukania wiązką zamiast gradientowych algorytmów wstecznej propagacji. Model ten znajduje bardzo proste rozwiązania i nadaje się również do odkrywania reguł logicznych w danych.

c) Rozwijano nowe metody inicjalizacji sieci neuronowych. Brak dobrego punktu startu powoduje trudności w zbieżności algorytmów uczenia się oraz problemy z doбором właściwej architektury. W ramach pracy magisterskiej zbadano możliwości zastosowania znanych z statystyki wielowymiarowej metod dyskryminacji Fishera i dyskryminacji liniowej. Metody te pozwalają na określenie zarówno liczby neuronów, wartości wag i progów a także pozwalają na optymalizację nachyleń sigmoid dla indywidualnych neuronów. W niektórych przypadkach po inicjalizacji sieć rozwiązuje problemy klasyfikacyjne bez dalszego uczenia się ale obserwujemy również pogarszanie się wyników klasyfikacji przy jednocześnie malejącym średniokwadratowym błędzie uczenia. Zjawisko to jest badane na prostych modelach – prawdopodobnie wymagane są inne funkcje kosztu.

d) Dokonano przeglądu metod globalnej minimalizacji w zastosowaniu do uczenia sieci neuronowych. Przy współpracy z Department of Artificial Intelligence, Louis Paster Universite w Strasbourgu (grupa ta specjalizuje się w zastosowaniach algorytmów genetycznych do optymalizacji struktur sieci) napisano i rozszerzono pracę przeglądową napisaną wspólnie na ten temat – praca uzyskała pozytywne recenzje wstępne w bardzo wymagającym piśmie. Przy współpracy z Swinburne University of Technology w Melbourne, Australia, pracowano nad algorytmami rojowymi (swarm optimization) w zastosowaniu do sieci MLP.

e) Wprowadzono nowe, bardzo obiecujące algorytmy sieci D-MLP (Distance-based MLP), które operują całkiem odmiennymi granicami decyzji dzięki zmianie funkcji aktywacji na funkcje odległości, które w ogólności są funkcjami nieeuklidesowymi. Opisano oparty na klasteryzacji algorytm inicjalizacji tych sieci.

Publikacje związane z tym tematem:

1. Duch W, Jankowski N (1999) *Survey of neural transfer functions*, Neural Computing Surveys 2: 163-213
2. Duch W, Adamczak R, Diercksen GHF (1999) *Neural Networks in non-Euclidean spaces*. Neural Processing Letters 10: 201-210
3. Duch W, Adamczak R, Diercksen GHF (1999) *Distance-based multilayer perceptrons*. Computational Intelligence for Modeling Control and Automation. Neural Networks and Advanced Control Strategies. Ed. M. Mohammadian, IOS Press, Amsterdam, pp. 75-80
4. Duch W (1999) *Alternatives to gradient-based neural training and optimization*, Fourth Conference on Neural Networks and Their Applications, Zakopane, May 1999, pp. 59-64
5. Duch W, Adamczak R (1999) *Neural networks in non-Euclidean metric spaces*, 1999 Int. Joint Conference on Neural Networks, Washington, July 1999, paper no. 740 (6 str)
6. Duch W, Grąbczewski K (1999) *Searching for optimal MLP*, Fourth Conference on Neural Networks and Their Applications, Zakopane, May 1999, pp. 65-70
7. Duch W, Adamczak R, Diercksen GHF (1999) *Neural Networks from Similarity Based Perspective*. New Frontiers in Computational Intelligence and its Applications. Ed. M. Mohammadian, IOS Press, Amsterdam (w druku 6/1999)

II.2.5 Zastosowanie metod inteligencji obliczeniowej do analizy danych medycznych i psychometrycznych.

Badania te prowadzono przede wszystkim w oparciu o realizowany w 1999 roku grant KBN dotyczący analizy danych medycznych w oparciu o rozwijane przez nas metody typu sieci neuronowych, metod opartych na podobieństwie i metod ekstrakcji reguł logicznych z danych.

Korzystając z publicznie dostępnych medycznych baz danych oraz z danych otrzymanych z polskich, niemieckich i japońskich ośrodków naukowych osiągnęliśmy bardzo dobre rezultaty, w niektórych przypadkach otrzymując najlepsze z dotychczas publikowanych wyników. Planowaliśmy wydanie książki poświęconej porównaniu wielu metod w zastosowaniu do trudnego problemu praktycznego, analizy danych dotyczących chorób wątroby, ale projekt ten nieco się opóźnił ze względu na trudności z wstępnym opracowaniem danych przez lekarzy. W oparciu o zebrane przez współpracujących z nami psychologów dane psychometryczne opracowano system wspomagający diagnozy psychometryczne, który przyjmuje wyniki testów na skanowanych formularzach i dostarcza prawdopodobieństw dla 27 rodzajów zaburzeń wraz z werbalną interpretacją najbardziej prawdopodobnych z nich.

Zastosowano algorytm analizy czynników głównych i czynników niezależnych do interpretacji obrazów otrzymanych za pomocą funkcjonalnego rezonansu magnetycznego (fMRI). Niestety doktorant, który rozpoczął pracę nad tym obiecującym tematem odszedł do lepiej płatnej pracy wkrótce po rozpoczęciu badań.

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. xxx-yyy
2. Duch W, *Inteligentne metody szukania informacji medycznych*. IV Konferencja Internetu Medycznego, 12-13.11.1999 (materiały na CD-ROMie)
3. Duch W, *Sztuczna Inteligencja w Medycynie*. Materiały dla kursu zaawansowanego projektu MedUni, <http://www.phys.uni.torun.pl/~duch/ref/ai-med/index.html>
4. Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K, Żal G, Hayashi Y (1999) *Fuzzy and crisp logical rule extraction methods in application to medical data*. Computational Intelligence and Applications. Springer (Studies in Fuzziness and Soft Computing, Vol. 41, ed. P.S. Szczepaniak) 1999, pp. 593-616
5. Duch W, Kucharski T, Gomuła J, Adamczak R, *Metody uczenia maszynowego w analizie danych psychometrycznych. Zastosowanie do wielowymiarowego kwestionariusza osobowości MMPI-WISKAD* (Toruń, Marzec 1999; 650 str., ISBN 83-231-0986-9)
6. Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K, *Neural methods for analysis of psychometric data*. Proc. of the Intern. Conference on the Engineering Applications of Neural Networks '99, Warsaw, 13-15.09.1999, pp. 45-50
7. Jankowski N, *Approximation and classification in medicine with IncNet neural networks*. In: Machine Learning and Applications. Workshop on Machine Learning in Medical Applications, pages 53–58, Greece, July 1999

II.2.6 Ontogeniczne sieci neuronowe

Badania te, wspierane w 1999 roku grantem promotorskim, rozpoczęto przy współpracy z dr Visakanem Kadirkamanathanem z Computer Science Department, University of Sheffield. Prowadzono dalsze prace nad ontogenicznym modelem sieci neuronowej (zmienna liczba neuronów) IncNet, badając kryteria oceny optymalnej złożoności sieci w zależności od danych. Kryteria te zastosować można do innych sieci neuronowych, w szczególności sieci typu RBF i FSM.

Uzyskano doskonałe rezultaty w ramach uproszonej metody uczenia sieci IncNet opartej na filtrze Kalmana, w szczególności w zastosowaniu do klasyfikacji danych medycznych. Prace naukowe wykonane w ramach tej współpracy są częścią pracy doktorskiej mgr Jankowskiego, zakończonej we wrześniu 1999 roku.

Publikacje związane z tym tematem:

1. Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K, Jankowski N (2000) *Neural methods of knowledge extraction*, Control and Cybernetics (wysłane)

2. Duch W, Grąbczewski K, Jankowski N, Adamczak R (1999) *Optimization and interpretation of rule-based classifiers*. Intelligent Information Systems IIS'2000 (wysłane 12/99)
3. Duch W, Jankowski N (1999) *Taxonomy of neural transfer functions*. International Joint Conference on Neural Networks IJCNN 2000 (wysłane 12/99)
4. Jankowski N, *Approximation and classification in medicine with IncNet neural networks*. In: Machine Learning and Applications. Workshop on Machine Learning in Medical Applications, pages 53–58, Greece, July 1999
5. Jankowski, N. *Sieci ontogeniczne i ich zastosowanie do klasyfikacji danych medycznych*. Praca doktorska, KMK UMK, Toruń 1999
6. Jankowski N, *Approximation with RBF-type neural networks using flexible local and semi-local transfer functions*. In 4th Conference on Neural Networks and Their Applications, Zakopane, Poland, 5/1999, pp. 77–82.
7. Jankowski N, Duch W (2000) *Ontogeniczne sieci neuronowe*. Biocybernetyka 2000, Tom 6: Sieci neuronowe (red. W. Duch, J. Korbicz, L. Rutkowski i R. Tadeusiewicz), rozdz. 1.8, pp. xxx-yyy

II.2.7 Wizualizacja i redukcja wymiarowości danych

W oparciu o nowe algorytmy minimalizacji dla skalowania wielowymiarowego (MDS) opracowano program do interaktywnej wizualizacji wielowymiarowych danych. Porównano różne metody redukcji wymiarowości i ich przydatność do określania najważniejszych cech lub ich nieliniowej kombinacji. Zbadano możliwości wizualizacji granic decyzji klasyfikatorów.

Badania te stanowią część pracy doktorskiej A. Nauda. Jego program do wizualizacji danych ma już duże możliwości (publikacje są w przygotowaniu), np. pozwala on na zakreślenie na ekranie lub wybór dowolnego obszaru wokół jakiegoś wektora i powiększenie tego obszaru z przeliczaniem optymalnych położenia oglądanych wektorów, dodawanie punktów z gaussowskiego rozkładu wokół wektorów z danymi, co pozwala uwidocznic granice decyzji.

II.2.8 Alternatywne podejście do układów adaptujących się

Naszym celem jest integracja wielu metod inteligencji obliczeniowej, wyrastających 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). Udało się nam pokazać, że odpowiednia parametryzacja prawdopodobieństwa klasyfikacji pozwala ujęcie w ramach jednego schematów wszystkich wariantów metody najbliższych sąsiadów, adaptacyjnych metod kwantyzacji wektorowej, sieci neuronowych na radialnych funkcjach bazowych i bardziej egzotycznych modeli klasyfikacyjnych, takich jak model Restricted Coulomb Energy Leona Coopera.

Z teorii wynika szereg zupełnie nowych algorytmów, implementowanych i testowanych obecnie w ramach pracy doktorskiej przez mgr K. Grudzińskiego. Pracujemy nad oprogramowaniem SBL (Similarity-Based Learner), które pozwoli na automatyczne wybranie jednej z wielu metod mieszczących się we wspólnym schemacie, metody najlepiej działającej dla konkretnej bazy danych. Nie będzie więc to adaptacja jednego modelu do konkretnego przypadku, tak jak się to dzieje w dotychczas stosowanych algorytmach inteligencji obliczeniowej, ale raczej poszukiwanie najlepszego modelu w przestrzeni wszystkich modeli, jakie się da w ramach dostępnych środków utworzyć. W szczególności w 1999 roku testowano metody selekcji i ważenia cech, wyboru optymalnych funkcji odległości, oraz metody wyboru odpowiednich wektorów referencyjnych. Stworzono również interfejs graficzny do programu SBL.

Napisaliśmy na ten temat szereg prac i dążymy do rozwinięcia zintegrowanego pakietu programów komputerowych, opartych na opracowanych przez nas algorytmach, służącego do dogłębnej analizy danych (data mining).

Publikacje związane z tym tematem:

1. Duch W, Grudziński K (1999) *Search and global minimization in similarity-based methods*. 1999 International Joint Conference on Neural Networks, Washington, July 1999, paper no. 742 (6 str)
2. Duch W, Grudziński K (1999) *The weighted k-NN method with selection of features and its neural realization*. Fourth Conference on Neural Networks and Their Applications, Zakopane, May 1999, pp. 191-196
3. Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K, *Methodology of extraction, optimization and application of logical rules*, Intelligent Information Systems VIII, Ustroń, Poland, 14-18.06.1999, pp. 22-31
4. Duch W, Grudziński K, *Weighting and selection of features in Similarity Based Methods*. Intelligent Information Systems VIII, Ustroń, Poland, 14-18.06.1999, pp. 32-36
5. Duch W, Grudziński K (2000) *Sieci Neuronowe i Uczenie Maszynowe: próba integracji*. Biocybernetyka 2000, Tom 6: Sieci neuronowe (red. W. Duch, J. Korbicz, L. Rutkowski i R. Tadeusiewicz), rozdz. III.21, pp. xxx-yyy
6. Grudziński K, Duch W (1999) *SBL-PM: A Simple Algorithm for Selection of Reference Instances for Similarity Based Methods*. Intelligent Information Systems IIS'2000 (wysłane 12/99)

II.2.9 Inteligentne oprogramowanie dla potrzeb chemii komputerowej.

Projekt "Intelligent support for computational chemistry" realizowany w ramach programu współpracy COST Unii Europejskiej w poprzednich latach nie poczynił wielkich postępów. Rola grupy prof. Ducha miała się ograniczać tylko do części projektu związanej ze sztuczną inteligencją, opracowania reguł dla systemu eksperckiego na podstawie analizy przykładowych obliczeń za pomocą algorytmów neuronowych. Kwestie opracowania oprogramowania numerycznego i graficznego interfejsu użytkownika rozwijane są przez pozostałych uczestników tego projektu. Nadal brakuje nam dużej bazy danych przykładowych obliczeń. W 1998 roku powstała niewielka baza obliczeń wykonanych metodą sprzężonych klastrów. Baza ta została przeanalizowana przez nasz zespół ale jest za mała by znaleźć praktyczne zastosowanie.

Nie zamykamy tego projektu ze względu na aktywność pozostałych jego uczestników i możliwości przekształcenia go w szerszy projekt europejski, dotyczący analizy baz danych w astronomii, fizyce, chemii i medycynie.

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

Prof. J. Wasilewski ze współpracownikami prowadził badania w ramach tematu: „Struktura energetyczna małych cząsteczek”. Współpracował w ramach tej tematyki także z zespołem prof. A. J. Sadleja z Wydziału Chemii UMK. 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. Zespół prof. Wasilewskiego pracuje również nad symulacjami komputerowymi w fizyce atomowo-molekularnej, szczególnie nad modelowaniem oddziaływania cząsteczek z powierzchniami krystalicznymi.

Dr J. Meller prowadził badania przede wszystkim nad rozwojem metod dynamiki molekularnej w zastosowaniu do symulacji białek przy współpracy z prof. Ronem Elberem, jednym z najlepszych specjalistów w tej dziedzinie w skali światowej. Poza tym zajmował się rozwijaniem metod obliczeniowych, algorytmów i programów komputerowych pozwalających uwzględnić korelację elektronową pod ogólnym hasłem „Rozwój metod oddziaływania konfiguracyjnego i metod pokrewnych” w ramach badań własnych i statutowych, współpracując z ośrodkami zagranicznymi w Francji, Izraelu i Japonii.

Najważniejsze uzyskane wyniki w tej grupie tematów to:

II.2.10 Teoretyczne badania struktury energetycznej małych cząsteczek (prof. Wasilewski).

Kontynuowano badania stanów oscylacyjnych i efektów sprzężenia oscylacyjno-rotacyjnego w małych cząsteczkach metodami wykraczającymi poza elementarne przybliżenie harmoniczne. Rozpoczęto także badania stanów oscylacyjno-rotacyjnych metodami pseudospektralnymi. Wymieniona tematyka wchodzi m. innymi w zakres pracy doktorskiej mgr S. Zelka.

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 podejściu DVR wyznaczono poziomy oscylacyjno-rotacyjne układy HeNe⁺ i HeAr⁺, oraz poziomy oscylacyjne (z pełnym uwzględnieniem efektów anharmonicznych i ruchów o dużych amplitudach) układy LiCN, LiNC, HNS, HSN, SO₂. Podobną analizę przeprowadzono dla bardzo dokładnych powierzchni stanów: podstawowego i niższych wzbudzonych cząsteczki H₂O, uzyskanych systemem MOLCAS w zespole prof. Sadleja. Wyniki tych obliczeń włączone zostaną do kilku publikacji. Dla cząsteczki SO₂ przeprowadzono szczegółowe porównanie wyników otrzymywanych dla powierzchni CAS SCF i przy zastosowaniu metod funkcjonałów gęstości (DFT) z różnymi funkcjonalami.

Publikacje:

- L. Cyrnek, S. Zelek, J. Wasilewski, *Anharmonic Effects for the Vibrational Levels of SO₂ (¹A₁)*, 5-th International Conference Computers & Chemistry, Szklarska Poręba, 1-6.07.1999 - komunikat

Kontynuowano badania teoretyczne niższych stanów elektronowych glioksalu (C₂O₂H₂) przy zastosowaniu różnych wariantów metody funkcjonałów gęstości (DFT). Do wyznaczenia 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 „zwolnionej fluorescencji” (slow fluorescence). Wyniki te wchodzi w zakres pracy doktorskiej mgr S. Zelka, część jest już przyjęta do publikacji

Publikacje

1. S. Zelek, J. Wasilewski, J. Heldt, *Density Functional Study of the S₀ (X¹A_g) and T₁ (a³A_u) States of the Glyoxal Molecule*, Computers & Chemistry (1999) - przyjęta do druku
2. S. Zelek, J. Wasilewski, J. Heldt, *Density Functional Study of the S₀ (X¹A_g) and T₁ (a³A_u) States of the Glyoxal Molecule*. 5-th International Conference Computers & Chemistry, Szklarska Poręba, 1-6.07.1999 - komunikat

II.2.11 Symulacje komputerowe w fizyce atomowo-molekularnej (badania własne, prof. Wasilewski z zespołem):

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.

Wykonano obliczenia krzywych potencjalnych dla stanów X²Σ_{1/2}, A²Π_{1/2} układów HeNe⁺, HeAr⁺. Zastosowano metodę funkcjonałów gęstości w wariacie "adiabatycznej kontynuacji", dokonując reparametryzacji oryginalnego funkcjonału Becke'go B3. Użyto wysokiej klasy bazy funkcyjnej typu cc-pVQZ (klasa "quadruple-zeta"), specjalnie poszerzone dla dobrego opisu polaryzowalności He w polu jonów dodatnich atomów ciężkich; uwzględniono sprzężenie spin-orbita. Otrzymane krzywe potencjalne użyte zostały do wyznaczenia (metodą całkowania numerycznego) rodzin poziomów oscylacyjno-rotacyjnych, i na tej podstawie, poprzez analizę Dunhama - zestawów stałych molekularnych charakteryzujących poszczególne stany elektronowe. Stosując stosunkowo proste i niekosztowne podejście typu DFT uzyskano ostatecznie odtworzenie znanych doświadczalnie wartości stałych molekularnych z dokładnością porównywalną z najlepszymi wynikami innych autorów, obliczonymi przy użyciu najbardziej zaawansowanych metod molekularnej mechaniki kwantowej. Różne stadia tego projektu prezentowane były na konferencjach, publikacja w przygotowaniu.

Publikacja:

M. Siódmiak, L. Cyrnek, J. Wasilewski: *Two Lowest States of HeNe⁺ and HeAr⁺ Ions. Calculations Using the Density Functional Theory (DFT) and the Discrete Variable Representation (DVR) approaches* - w przygotowaniu do Chem. Phys. Letters.

Kontynuowano szczegółowe badania nad modelowaniem zjawisk powierzchniowych w kryształach jonowych i nad teoretyczną analizą procesów oddziaływania małych cząsteczek z takimi powierzchniami. Badania te, rozpoczęte w 1996 roku w ramach stażu prof. Wasilewskiego na Uniwersytecie w Bochum (RFN), prowadzi dalej mgr M. Wierzbowska jako pracę doktorską. Zastosowano modele elektrostatyczne dla opisu stwierdzonej doświadczalnie kontrakcji struktury kryształu przy powierzchni i redystrybucji ładunku elektrycznego. Przebadano szereg modeli pola Madelunga o różnych rozmiarach i kształtach. Ustalono wymagania dotyczące konstrukcji pola ładunków, gwarantujące uzyskiwanie stabilnych wyników dla energii oddziaływania cząsteczki z powierzchnią, także w wypadku znacznego przeniesienia ładunku lub adsorpcji jonu. Uzyskane w tym zakresie wyniki mają charakter pionierski. Analizę tę prowadzono na przykładzie adsorpcji tlenu (atomowego, molekularnego, i ich anionów) na powierzchni Cr_2O_3 (0001), a następnie zastosowano do opisu adsorpcji potasu na tej powierzchni. W roku 1999 większość prac prowadzona była w zespole prof. Staemmlera na Wydziale Chemii Uniwersytetu w Bochum (Niemcy), gdzie mgr Wierzbowska przebywała łącznie 6 miesięcy (w roku 1998 łącznie 7 miesięcy) na stypendium Romana Herzoga (administrowanym przez Fundację Alexandra von Humboldta). Wynikiem jest gotowa praca doktorska, przedłożona Radzie Instytutu Fizyki w grudniu 1999, komunikat konferencyjny oraz publikacja; dalsze publikacje są w planie.

Publikacje

1. M. Wierzbowska, V. Staemmler, L. Cyrnek, J. Wasilewski. *Adsorption of Small Molecules on the Cr_2O_3 (0001) Surface*. Sympozjum FAMO '99, Toruń, 3.09.1999 – komunikat
2. W. Zhao, M. Asscher, M. Wilde, K. Al.-Shamery, H.-J. Freund, V. Staemmler, M. Wierzbowska *Phys. Rev. B* (1999) – wysłana
3. M. Wierzbowska, *Ab initio Calculations for the Adsorption of Oxygen and Potassium on the Cr_2O_3 (0001) Surface*, praca doktorska, Toruń, 1999

II.2.12 Opracowanie nowych metod opisu efektów korelacji elektronowej.

Badania te wykonywane były w ramach grantu KBN (kierowanego przez prof. K. Jankowskiego z Instytutu Fizyki UMK), w realizacji którego uczestniczy prof. Wasilewski, oraz przez dr Mellera i prof. Duchę w ramach badań statutowych.

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 jednocząstkowej (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 elektronowej i był recenzentem rozprawy doktorskiej mgr Ireneusza Grabowskiego *Prawie liniowe metody sprzężonych klasterów dla stanów niezamkniętopowłokowych*, przygotowanej w ramach tej tematyki.

Dr Meller ukończył wspólnie z prof. Duchem pracę związaną z zakończonym już wcześniej tematem. Prof. Duch wycofał się z tych badań całkowicie po ukazaniu tej pracy. Dr Meller kontynuował współpracę z grupą z Tuluzy nad konsyistentną wymiarowo wersją metody oddziaływania konfiguracyjnego.

Publikacje:

1. Meller J, Duch W (1999) *SGA derivation of matrix elements between spin-adapted perturbative wavefunctions*. International Journal of Quantum Chemistry 74: 123-133
2. Meller J, Malrieu J.P, Heully J.L, *Size-consistent multireference CI method through the dressing of the norm of determinants*, Journal of Chemical Physics (w druku)
3. Turowski M, Yamakawa N, Meller J, Kimata K, Ikegami T, Hosoya K, Tanaka N and Thornton R, *Isotope effect on the hydrophobic interactions. Dispersion forces driven binding of protiated and deuterated compounds to non-polar organic moieties*. J. of American Chemical Society (wysłane)

II.2.13. Rozwój i zastosowania metod dynamiki molekularnej (dr J. Meller)

W ramach współpracy z grupa prof. Rona Elbera z Cornell University, gdzie dr Meller przebywał na stażu w 1999 roku, oraz współpracy z Centrum Fritza Habera Uniwersytetu Hebrajskiego w Jerozolimie, gdzie dr Meller odbył 6-tygodniowy staż na przełomie 1998/1999 roku, 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. Przeprowadzono symulacje na wielką skalę zwijania się peptydów, osiągnięto również bardzo ciekawe wyniki dla białek blokujących wzrost pomidorów – artykuł do pisma Science jest obecnie w przygotowaniu.

Publikacje związane z tym tematem:

1. Elber R, Meller J and Olender R, *Stochastic Path Approach to Compute Atomically Detailed Trajectories: Application to the Folding of C Peptide*, Journal of Physical Chemistry B, 103 (1999) 899-911
2. Meller J (2000), *Molecular Dynamics*. Encyclopedia of Life Sciences, Macmillan Reference Ltd (w druku)

C) Badania w zakresie dydaktyki wspomaganej metodami komputerowymi.

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

Badania te prowadzą nasi wykładowcy przy współpracy z prof. Duchem. Prof. Wasilewski włożył dużo pracy w formułowaniu nowych programów nauczania nauk komputerowych (computational science) oraz do reformy programu nauczania przedmiotów o charakterze informatycznym na Wydziale Fizyki i Astronomii UMK. Przy współpracy z pracownikami Centrum Kształcenia Komputerowego UMK powstała publikacja dotycząca programów nauczania podstaw informatyki.

Utrzymujemy strony WWW dotyczące wszystkich spraw związanych z komputerami, fizyką komputerową, sieciami neuronowymi, sztuczną inteligencją, kognitywistyką, badaniami nad mózgiem. Wydane w 1997 roku dwie książki W. Ducha posiadają rozbudowane i ciągle uaktualniane strony w Internecie pod adresem WWW:

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

z licznymi dowiązaniem do najnowszych informacji o poruszanych w nich tematach oraz do wykładów wprowadzających. Ze stron tych korzysta bardzo wiele osób (licznik wskazywał ponad 7000 przy końcu 1999 roku). 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.

Publikacja:

- Berndt-Schreiber M, Duch W, Kwiatkowska A, Polewczyński A, Skowronek K, *Różnorodność oferty nauczania w zakresie podstaw informatyki i technologii informatycznych jako szczególne wyzwanie dla szkoły wyższej*. XV Konferencja „Informatyka w Szkole”, Katowice, 24-27.09.1999, str. 84-87

III. PUBLIKACJE

III.1. W omawianym okresie ukazały się ogółem 38 prac, w tym:

oryginalnych prac badawczych: 22

podręczników i skryptów: 0

publikacji naukowo-popularnych: 1

redakcji książek naukowych, tłumaczeń: 1

artykułów, recenzji: 12

prac doktorskich: 2

III.2. Liczba prac przyjętych do druku: 14

Prac wysłanych: 9

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

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