

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

Informacja o prowadzonych w jednostce w sposób ciągły badaniach naukowych i pracach badawczo-rozwojowych (z określeniem dyscyplin i kierunków).

Katedra Metod Komputerowych jest jednostką naukowo-dydaktyczną Uniwersytetu Mikołaja Kopernika podejmującą **interdyscyplinarne** programy badawcze w dziedzinach, które wykorzystują wyrafinowane metody komputerowe. Organizujemy specjalistyczne wykłady i seminaria dotyczące zastosowań informatyki w naukach ścisłych i humanistycznych oraz w kognitywistyce (naukach o poznaniu). Współpracując z kadrą naukową z różnych dyscyplin naukowych – fizyki, chemii, biologii, nauk humanistycznych – dążymy do rozwinięcia tych dziedzin nauk podstawowych i stosowanych, które stosują wyrafinowane metody komputerowe zarówno w zakresie obliczeń numerycznych (symulacyjnych) jak i zagadnień wymagających obliczeń symbolicznych i metod inteligencji obliczeniowej. W terminologii anglojęzycznej odpowiada to pojęciu „informatics”, występującym w takich złożeniach jak bioinformatics, neuroinformatics, medical informatics czy chemical informatics; w terminologii polskiej najbardziej odpowiednim terminem wydaje się „informatyka stosowana”.

Problematyka badawcza KMK skoncentrowana jest wokół kilku głównych tematów:

1. Zagadnień inteligencji obliczeniowej (computational intelligence), a w szczególności szeroko pojętych zagadnień neuroinformatyki i uczenia maszynowego.
2. Metod symulacyjnych i metod inteligencji obliczeniowej w zastosowaniu do problemów astronomii, fizyki, chemii i bioinformatyki oraz nauk o życiu (life sciences).
3. Kognitywistyki (*cognitive sciences*), włączając w to neuroinformatykę, komputerowe modele procesów poznawczych i filozofię umysłu.
4. Dydaktyki wspomaganą metodami komputerowymi.

Profil naszej jednostki w klasyfikacji KBN najbliższy jest sekcji T11F (metody komputerowe w nauce) oraz T11C (informatyka stosowana). W 2000/2001 roku rozwijaliśmy następujące tematy:

1. Metody inteligencji obliczeniowej, modelowanie sieci neuronowych i uczenie maszynowe.

Nasze prace dotyczą teorii i zastosowań modeli sieci neuronowych, logiki rozmytej, rozpoznawania obiektów (pattern recognition), algorytmów opartych na precedensach (case-based), oraz fundamentalnych mechanizmów działania struktur adaptujących się, w tym również zagadnień związanych z działaniem mózgu i modelowaniem umysłu. Prace te wspierane są przez grant KBN na lata 2000-2002 dotyczący teorii i zastosowań metod inteligencji obliczeniowej, oraz dwa roczne granty promotorskie na badania dotyczące zastosowań systemu neurorozmytego FSM do analizy fizycznych, chemicznych i medycznych danych, oraz zastosowania metod opartych na podobieństwie do analizy obrazów medycznych.

Jedną z rozwiniętych przez nas specjalności w ramach tej grupy zagadnień są metody rozumienia danych, wykraczające poza analizy statystyczne. Zajmowaliśmy się przede wszystkim metodami ekstrakcji reguł logicznych z danych treningowych za pomocą sieci neuronowych i metod globalnej optymalizacji, osiągnięto bardzo dobre rezultaty. Prace te zostały rozszerzone w stronę innych metod rozumienia danych, metod opartych na wizualizacji i analizie prototypów. Stosujemy w tym celu kilka różnych podejść opisanych dokładniej poniżej. Wyniki prezentowane były w licznych pracach napisanych zarówno do najlepszych pism w dziedzinie sieci neuronowych jak i rozdziałów do książek oraz prezentowane w czasie tutoriali na kilku prestiżowych konferencjach naukowych: 2 i 4-godzinne tutoriali przedstawiono na dwóch najbardziej prestiżowych konferencjach międzynarodowych dotyczą-

cych sieci neuronowych (IJCNN w Como, Włochy, i ICONIP w Tae-jong, Korea Płd) oraz na konferencji Polskiego Towarzystwa Sieci Neuronowych i wykładach plenarnych.

Kontynuowano prace nad ontogenicznymi sieciami neuronowymi i innymi algorytmami budowy i adaptacji sieci neuronowych. N. Jankowski pisze na ten temat monografię, która powinna zostać złożona do druku w 2001 roku. Ukończona została kolejna praca doktorska dotycząca tego tematu (obroniona w czerwcu 2001 roku w Instytucie Fizyki UMK). Dotyczyła ona systemu neurorozmytego Feature Space Mapping (FSM), opartego na własnym podejściu zainspirowanym przez kognitywny model umysłu. Zaimplementowano w nim różne ulepszenia, takie jak mieszanie kilku modeli o różnej złożoności i sposoby głosowania lub uśredniania wyników tych modeli. Przeprowadzono pierwsze próby z wyborem różnych funkcji transferu w czasie dodawania nowych węzłów do sieci. Dzięki temu końcowy model ma szansę odkryć najprostsze struktury w danych. Jest to pierwszy krok w kierunku heterogenicznych modeli neuronowych, tworzących końcowe rozwiązanie z różnych elementów – wszystkie dotychczasowe modele oparte są na powielaniu elementów tego samego typu.

Rozwijano również schemat integracji większości znanych metod uczenia maszynowego i sieci neuronowych, oparty o ocenę podobieństwa przypadków referencyjnych (precedensów). Rozwinięto znacznie komputerowe oprogramowanie realizujące wiele wersji tych metod opracowując schemat tworzenia modeli o wzrastającym stopniu złożoności. W przestrzeni modeli, które można wygenerować w ramach tego schematu, automatycznie poszukiwany jest najlepszy model ze względu na dokładność i jego prostotę. Testowano szereg nowych modeli sieci neuronowych, takich jak *Distance-based MLP*, czyli typowe perceptrony wielowarstwowe korzystające z funkcji aktywacji będących dowolnymi miarami podobieństwa (odległości). Testowano nowe metody apriorycznego poprawiania wyników klasyfikacji, wstępnych transformacji danych pozwalających na używanie danych symbolicznych we wszystkich systemach.

Przy współpracy z Swinburne University of Technology w Melbourne, Australia, próbowano zastosować algorytmy rojowe (swarm optimization) w uczeniu sieci MLP. Testowano też inne metody alternatywne w stosunku do gradientowych metod minimalizacji. Szczególnie obiecujące są metody zastępujące minimalizację szukaniem dla zdyskretyzowanych parametrów adaptacyjnych sieci neuronowych (Search-based MLP). Opracowano nową taksonomię funkcji transferu podkreślając ich istotną rolę w optymalizacji modeli neuronowych i rozwijając ideę systemów heterogenicznych, opartych na różnych funkcjach w obrębie jednej sieci.

Rozwijano metody interaktywnej wizualizacji wielowymiarowych danych korzystając z procedur minimalizacji miar zgodności topograficznej przestrzeni danych i niskowymiarowych przestrzeni docelowych. Wprowadzono procedurę względnego mapowania, pozwalającą na szybkie umiejscowienie owych przypadków w otoczeniu przypadków znanych. Testowano oprogramowanie pozwalające interaktywnie oglądać brzegi obszarów decyzji dowolnych klasyfikatorów dla dowolnej liczby wymiarów. Program pozwala na wierniejsze odwzorowanie wielowymiarowych danych niż bardzo popularny model samoorganizującej się sieci neuronowej Kohonena. Na początku 2001 roku zakończono pracę doktorską związaną z tym tematem (A. Naud).

Wyniki naszych badań teoretycznych znajdują liczne zastosowania w analizie danych dla potrzeb medycyny, nauk ścisłych i bioinformatyki. Ekstrakcja reguł logicznych znajduje zastosowanie do automatyzacji akwizycji wiedzy i konstrukcji systemów inteligentnego wspomaganie decyzji. Planujemy opracowanie dalszych systemów ekspertowych w oparciu o neuronowe metody odkrywania wiedzy w bazach danych. Nawiązaliśmy w tej dziedzinie współpracę z Children's Hospital Medical Center w Cincinnati, Ohio, USA.

W najpoważniejszym współzawodnictwie programów analizujących dane empiryczne, zorganizowanym w grudniu 2000 w ramach konferencji NIPS (Neural Information Processing Systems), Denver, USA, brało udział 150 uczestników. Rezultaty znajdują się na stronie <http://q.cis.uoguelph.ca/~skremer/NIPS2000/>

Wysłaliśmy tam dla kilku problemów wyniki otrzymane za pomocą naszych metod, drzewa SSV i systemu neurorozmytego FSM. Wyniki SSV w końcowej ocenie dla problemu P6 znalazły się na pozycji 1, dla P9 na pozycji 5, dla P11 na 9 i dla P5 na 12; chociaż wysłano wyniki tylko dla 4 problemów z 11 w końcowej klasyfikacji metoda SSV znalazła się na 6 miejscu. Wyniki z FSM znalazły się one na

pozycjach dla P7 na 6, dla P11 na 8 i dla P5 na 10. Różnice w stosunku do najlepszych wyników innych autorów, którzy często wysyłali swoje wyniki kilkanaście razy, były nieznaczne.

W. Duch jest członkiem wielu komitetów naukowych i bierze regularnie udział w kilku największych konferencjach w dziedzinie sieci neuronowych (WCCI, ICONIP, IJCNN, ICANN, ESSAN, EANN), będąc zwykle jedynym przedstawicielem naszego kraju na tym forum. Mamy realną szansę stać się jedną z najlepszych grup badawczych na świecie w tej grupie zagadnień.

Temat ten rozwijany jest obecnie przy współpracy z prof. G.H.D. Diercksenem z Inst Astrofizyki Maxa Plancka w Garching (Monachium), prof. Y. Hayashi z Meiji University, Tokyo, prof. M. Ishikawę z Kyushu Institute of Technology, prof. N. Kasabovom z University of Otago, Nowa Zelandia oraz prof. Jackiem Żuradą z Univ. of Louisville, Kentucky, USA.

Słowa kluczowe i dyscypliny pokrewne: sieci neuronowe, sztuczna inteligencja, logika rozmyta, reguły logiczne, dogłębna analiza danych, systemy neurorozmyte, rozpoznawanie obiektów, systemy eksperckie, biocybernetyka, bioinformatyka, data mining, inteligentne wspomaganie decyzji, optymalizacja, analiza obrazów medycznych.

2. **Metody symulacyjne w fizyce, chemii, biologii, bioinformatyce i naukach o życiu.**

Prof. J. Wasilewski z współpracownikami prowadził badania w ramach tematu: „Struktura energetyczna małych cząsteczek”, zajmując się zastosowaniami teorii funkcjonałów gęstości do obliczeń struktury poziomów elektronowo-oscylacyjnych cząsteczek. Uczestniczył też w badaniach kierowanych przez prof. K. Jankowskiego z Instytutu Fizyki UMK, dotyczących nowych metod opisu efektów korelacji elektronowej w stanach niezamknięto-powłokowych atomów i cząsteczek. Przy współpracy z Ruhr Universität w Bochum prowadzone są również prace w zakresie symulacji komputerowych w fizyce atomowo-molekularnej, szczególnie nad modelowaniem oddziaływania cząsteczek z powierzchniami krystalicznymi.

Dr J. Meller prowadził badania nad zastosowaniem metod obliczeniowych do zagadnień bioinformatycznych, w szczególności symulacji struktury białek, rozpoznawania struktur i funkcji białek, metod dopasowania sekwencji w biologii molekularnej, proteomice i genomice. Badania wykonywał w przy współpracy z ośrodkami zagranicznymi przebywając przez cały 2000 rok w Computer Science Department, Cornell University w USA na stażu.

Przy współpracy z prof. Diercksenem z Instytutu Astrofizyki Maxa Plancka w Garching koło Monachium pracowano nad projektem COST, *Knowledge Exploration in Science and Technology*. Chęć udziału w tym projekcie zapowiedziało 25 grup z 11 krajów Europy. Projekt ten złożony został do COST Committee of Senior Officials (CSO) w czerwcu 1999 i jest obecnie zatwierdzony. Dotyczy on zastosowania metod inteligencji obliczeniowej do odkrywania wiedzy w astronomicznych, fizycznych i chemicznych bazach danych.

Kontynuowano interdyscyplinarny projekt finansowany w 1999 roku w oparciu o umowę dwustronną pomiędzy Niemcami a Polską (IBMBF-KBN). Projekt ten 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. Temat ten wiąże numeryczne metody komputerowe z metodami sztucznej inteligencji. Prof. Duch z KMK jest kierownikiem tego projektu po stronie polskiej.

Słowa kluczowe i dyscypliny pokrewne: bioinformatyka, metody komputerowe w fizyce i chemii, symulacje komputerowe, fizyka teoretyczna, fizyka komputerowa, chemia kwantowa, chemia teoretyczna, chemia komputerowa, dynamika molekularna.

3. Kognitywistyka, neuroinformatyka, komputerowe modele procesów poznawczych i filozofia umysłu.

Kognitywistyka (nauki o poznaniu) budzi duże zainteresowanie, powoli rozwijając się w Polsce jako odrębna dyscyplina badawcza. Przy współpracy z logiczami, filozofami, biologami, lingwistami i pedagogami dążymy do stworzenia Centrum Kognitywistyki na UMK. W celu integracji środowiska osób interesujących się tą dziedziną w Polsce założyliśmy nowe pismo „Kognitywistyka i Media w Edukacji” (Wyd. A. Marszałek), które wychodzi przynajmniej dwa razy do roku (każdy numer ma ponad 300 stron); numery specjalne publikowane są w języku angielskim. Prof. Duch przewodniczy komitetowi naukowemu tego pisma. Instytut Filozofii UMK powołał w roku akademickim 1999/2000 specjalizację kognitywną w ramach filozofii, Instytut Socjologii w roku 2001/2002 specjalizację „Biologiczne koncepcje kultury”; nasza Katedra oferuje w ramach tych specjalizacji 90 godzin wykładów i 60 godzin laboratorium. Dążymy do powołania interdyscyplinarnego kierunku studiów doktoranckich w zakresie kognitywistyki.

Nasze wysiłki zmierzają do stworzenia empirycznie uzasadnionej teorii umysłu w oparciu o modele neuronowe. 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, zarówno o charakterze filozoficznym jak i bardziej technicznym. Prof. Duch przygotowuje do druku obszerną monografię będącą wstępem do kognitywistyki oraz napisał kilka prac z filozofii umysłu.

Kognitywistyka jest z natury rzeczą nauką interdyscyplinarną. Kontynuowaliśmy współpracę z filozofami umysłu, biorąc udział w konferencjach, seminariach i dyskusjach na temat fundamentalnych problemów dotyczących natury świadomości oraz recenzując prace doktorskie dotyczące filozofii percepcji (dla Uniwersytetu Adama Mickiewicza). Kontynuujemy współpracę z Instytutem Neuropsychologii Maxa Plancka w Lipsku. Utrzymujemy kontakty z Instytutem Biologii Eksperymentalnej im. M. Nenckiego w Warszawie – prof. Duch był wykładowcą na szkole organizowanej przez ten instytut. Dr Jankowski napisał projekt wysłany do programu Marie Curie UE by w ramach stażu podoktoranckiego w Center for Neural Networks, King's College, London, prowadzić badania nad modelowaniem mechanizmów uwagi za pomocą metod obliczeniowej neurobiologii kognitywnej.

Pracujemy nad modelem zdarzeń mentalnych w oparciu o uproszczone modele sieci neuronowych z rekurencją, podając serię przybliżeń pozwalający na opis zjawisk istotnych dla zrozumienia umysłu na różnych poziomach, począwszy od poziomu molekularnego do opisu zachowania aż do poziomu percepcji, powstawania wrażeń i modeli wewnętrznych. Opracowano wstępne warunki dla systemów, które powinny być przekonane, że mają świadome wrażenia. Jest to bardzo ambitny projekt, zakrojony na długie lata. Takie modele mogą mieć zastosowania do modelowania zjawisk psychiatrycznych.

Słowa kluczowe i dyscypliny pokrewne: kognitywistyka, modele umysłu, filozofia umysłu, neuroinformatyka, układy złożone, układy dynamiczne, dynamika symboliczna, teoria informacji, symulacje komputerowe, matematyka stosowana, biocybernetyka, sieci neuronowe, reprezentacje mentalne.

4. Dydaktyka wspomagana metodami komputerowymi.

Badania w tym zakresie prowadzone są przez zatrudnionych w naszej Katedrze wykładowców i profesorów. Bierzemy udział zarówno w restrukturyzacji programów nauczania w zakresie specjalizacji komputerowych i przedmiotów o charakterze informatycznym na Wydziale Fizyki i Astronomii UMK (prof. Wasilewski), w tworzeniu nowych programów na uczelni przy współpracy z Centrum Kształcenia Komputerowego, programów studiów podyplomowych oraz w tworzeniu nowych programów nauczania dla regionu. W ramach programu MedUni, finansowanego w latach 1998-2000 przez Fundację Batorego i kierowanego przez prof. Duchę, prowadziliśmy kształcenie lekarzy w używaniu komputerów i Internetu, przygotowując do tego celu liczne materiały dydaktyczne i strony Internetowe.

Utrzymujemy strony WWW dotyczące wszystkich spraw związanych z komputerami, fizyką komputerową, sieciami neuronowymi, sztuczną inteligencją, kognitywistyką, badaniami nad mózgiem. Ze stron

tych korzysta bardzo wiele osób. W ramach eksperymentów z nauczaniem na odległość stworzono dostępne w Internecie wersje notatek do kilku wykładów w formacie HTML i PPT. Niestety tworzenie takich materiałów jest czasochłonne i brakuje środków na wsparcie prac w tym zakresie.

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

RAPORT Z DZIAŁALNOŚCI STATUTOWEJ KATEDRY METOD KOMPUTEROWYCH W ROKU 2000

Opis merytoryczny realizowanych prac

Finansowanie: działalność statutowa, badania własne, granty promotorskie KBN, granty indywidualne oraz współpraca międzynarodowa.

W ramach działalności statutowej pracowaliśmy nad następującymi tematami:

I. Rozwój teorii i zastosowań metod inteligencji obliczeniowej a w szczególności modelowania sieci neuronowych i uczenia maszynowego.

Kierownik prof. W. Duch, finansowanie – badania statutowe, grant indywidualny KBN, dwa granty promotorskie i współpraca międzynarodowa.

W ramach rozwoju teorii inteligencji obliczeniowej, a szczególnie modeli sieci neuronowych, metod opartych na podobieństwie, metod rozpoznawania wzorców i wizualizacji, oraz metod sztucznej inteligencji opartych na logicznym opisie danych pracowaliśmy nad następującymi tematami.

I.1. Odkrywanie wiedzy w bazach danych i ekstrakcja reguł logicznych

W 2000 roku nadal jednym z naszych głównych zainteresowań były metody odkrywania wiedzy w bazach danych (KDD, knowledge discovery in databases, lub data mining) lub też ogólniej, próba „zrozumienia danych”. Dane można objaśniać za pomocą

- reguł logicznych;
- podobieństwa do ustalonych prototypów;
- metod wizualnej eksploracji pokazujących zależności w danych.

Początkowo skupiliśmy się głównie nad metodami opartymi na szukaniu reguł logicznych, ponieważ jest to najbardziej zaawansowana dziedzina, ale w ostatnim okresie rozszerzyliśmy nasze badania na metody szukania najlepszych prototypów. W 2000 roku przeprowadziliśmy 3 tutoriale w tej dziedzinie na najpoważniejszych konferencjach specjalistycznych:

1. Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K, Grudzinski K, Jankowski N, Naud N.
Understanding the data: extraction, optimization and interpretation of logical rules.
ICONIP-2000, 7th International Conference on Neural Information Processing, Nov. 2000, Dae-jong, Korea, str. 53 (materiały tutorialu)
2. Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K, Grudzinski K, Jankowski N, Naud N.
Extraction of knowledge from data using Computational Intelligence methods.
ICONIP-2000, 7th International Conference on Neural Information Processing, Nov. 2000, Dae-jong, Korea, str. 70 (materiały tutorialu)

3. Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K, Grudzinski K, Jankowski N, Naud N. *Methods of knowledge extraction from training data*. 5th Neural Networks and Soft Computing conference, Zakopane, June 2000

I.1.1. Opracowaliśmy i ulepszyliśmy wcześniej rozwinięte neuronowe metody ekstrakcji wiedzy z danych treningowych przy pomocy neurorozmytego systemu FSM (Feature Space Mapping) opartego na zastosowaniu separowalnych funkcji transferu. Do szukania reguł logiki klasycznej stosowane są funkcje prostokątne a funkcje trójkątne, trapezoidalne oraz Gaussowskie pozwalają na interpretację działania sieci dla reguł logiki rozmytej. Ulepszono algorytm uczenia systemu FSM tak, by minimalizować liczbę warunków w regułach oraz upraszczać końcowy zestaw reguł (przez upraszczanie struktury sieci). Program otrzymał nowy interfejs graficzny i planujemy jego integrację w pakiecie przeznaczonym do Data Mining.

Publikacje:

1. Duch W, Adamczak R, Dierksen G.H.F. *Classification, Association and Pattern Completion using Neural Similarity Based Methods*. Applied Mathematics and Computer Science **10**(4) (2000) 101-120
2. Duch W, Grąbczewski K, Jankowski N, Adamczak R. *Optimization and interpretation of rule-based classifiers*. Advances in Soft Computing, Physica Verlag (Springer), pp. 1-13
3. Adamczak R, Duch W, *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. 801-824
4. Duch W, Adamczak R, Dierksen GHF, *Constructive density estimation network based on several different separable transfer functions*. 9th European Symposium on Artificial Neural Networks (ESANN), Brugge 2001. De-facto publications, pp. 107-112

I.1.2. Rozwijano metodę ekstrakcji reguł logicznych za pomocą zmodyfikowanych sieci MLP, czyli sieci typu perceptronów wielowarstwowych na które narzuca się dodatkowe warunki pozwalające na transformację sieci MLP w sieć, której działanie można zinterpretować za pomocą funkcji logicznych (algorytm określany przez nas akronimem MLP2LN). Parametry tej sieci przyjmują wartości 0 (niepotrzebne połączenia), +1 (cecha musi wystąpić) lub -1 (cecha nie powinna wystąpić) i są wymuszane dodając odpowiedni człon do funkcji błędu i używając algorytmu konstruktywistycznego. Wystarczy uczyć kolejno tylko po jednym neuronie, co daje bardzo szybki algorytm określany akronimem C-MLP2LN. Do eksperymentów komputerowych wykorzystywaliśmy dotychczas zmodyfikowany symulator sieci neuronowych SNNS, obecnie napisana została nowa, niezależna wersja programu.

Wiele metod inteligencji obliczeniowej nie może używać bezpośrednio danych ciągłych dla określenia zmiennych lingwistycznych, wymagając wstępnej dyskretyzacji danych. W sieciach MLP2LN specjalna warstwa elementów złożonych z podsieci dwóch neuronów, które mają tylko 2 parametry adaptacyjne (progi) dobiera optymalne przedziały jednocześnie z ustalaniem reguł logicznych. Opisano również wstępną warstwę jednostek agregacyjnych, które pozwalają na tworzeniu kombinacji cech w tych przypadkach, w których opis logiczny za pomocą dostarczonych cech nie jest wystarczająco prosty lub wystarczająco dokładny. Pracujemy nad metodami oceny zysku informacyjnego w tej warstwie niezależnie od uczenia pozostałych części sieci.

1. Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K, Jankowski N. *Neural methods of knowledge extraction*. Control and Cybernetics **29**, No. 4 (2000), pp. 31-50
2. Duch W, Hayashi Y, *Computational intelligence methods and data understanding*. Springer studies in fuzziness and soft computing **54** (2000), pp. 256-270

I.1.3. Pracowano nad zastosowaniem metod nie używających gradientów do uczenia sieci neuronowych. Metody takie powinny być szczególnie przydatne w poszukiwaniu ostrych reguł logicznych, gdy obszar niezerowych gradientów kurczy się do zera. Testowaliśmy i rozwijaliśmy metody generacji reguł oparte na dyskretyzacji parametrów opisujących sieć neuronową i zastosowanie algorytmów szukania wiązką lub szukania typu „pierwszy najlepszy” zamiast minimalizacji gradientowej. Prowadzi to do alternatywnych metod uczenia opartych na algorytmach szukania zamiast algorytmów minimalizacji. W przypadku szukania reguł zmieniamy początkowo parametry o liczby całkowite, stopniowo zwiększając precyzję, czyli zmniejszając krok kwantyzacji parametrów. Stwierdziliśmy, że zmiana

pojedynczego parametru nie prowadzi do globalnie optymalnego rozwiązania, ale już zmiana pary parametrów jednocześnie daje bardzo dobre wyniki. Jest to bardzo obiecujący kierunek badań.

1. Grąbczewski K, Duch W, Adamczak R. *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. 637-662

I.1.4. Bardzo dobre rezultaty w szukaniu reguł logicznych osiągnięto wykorzystując proste kryterium separowalności (SSV, Separability Split Value), pozwalające budować drzewa decyzji lub tworzyć optymalne podziały ciągłych zmiennych i wybierać podzbiory zmiennych dyskretnych. Kryterium to można zastosować zarówno dla szukania najlepszego sposobu dyskretyzacji jak i tworzenia zestawów reguł. Ulepszono program tworzący drzewa decyzji na podstawie poszukiwania najlepszych punktów podziału na poziomie pojedynczych cech (najpierw najlepszy) lub przez uwzględnienie kilku cech (szukanie wiązką), wprowadzono kilka mechanizmów obcinania drzewa w oparciu o wyniki krosvalidacji, jak i mechanizmów wyboru najlepszego punktu podziału przez optymalizację separowalności na niższych poziomach. Program SSV zastosowano do generowania reguł logicznych otrzymując dla kilku baz danych najprostsze i najdokładniejsze ze znanych reguł.

1. Grąbczewski K, Duch W. *The separability of split value criterion*. 5th Conference on Neural Networks and Soft Computing, Zakopane, June 2000, pp. 201-208

I.1.5. Ekstrakcja reguł jest jedynie pierwszym krokiem w tworzeniu systemów wspomaganie decyzji. Rozwinięto metody optymalizacji zestawów reguł wykorzystując zależność pomiędzy liczbą odrzuconych przypadków a wiarygodnością działania reguł. Metoda ta nie jest zależna od sposobu generowania reguł i pozwala na zwiększanie zaufania do używanych, aż do osiągnięcia doskonałej selektywności i wrażliwości reguł, kosztem odrzucania pewnej liczby przypadków jako niemożliwych do sklasyfikowania. Osiągamy to wprowadzając funkcję kosztu złożoną z członu maksymalizującego predykcyjną moc klasyfikatora regułowego przy jednoczesnej minimalizacji liczby błędów. Pozwala to na tworzenie hierarchii zbiorów reguł o coraz większej wiarygodności kosztem przypisania coraz większej liczby przypadków do klasy „nieznany”.

Ponieważ funkcja kosztu jest nieciągła w optymalizacji wykorzystano nie-gradientowe metody minimalizacji. Założenie o gaussowskim rozkładzie błęd pomiarowych prezentowanych wektorów treningowych pozwala na użycie gradientowych metod optymalizacji dla ponad 1000 parametrów opisujących zmienne lingwistyczne w zestawach reguł. Próbkowanie Monte Carlo pozwala zastosować dowolne klasyfikatory do obliczania prawdopodobieństw zamiast binarnych wyników klasyfikacji. Wyprowadzono analityczne wzory na te prawdopodobieństwa przy założeniu rozkładów Gaussowskich (podobne wzory otrzymać można dla innych funkcji przynależności logiki rozmytej). Pokazano, iż założenie o istnieniu błęd pomiarowych przekłada się na specyficzne funkcje przynależności reguł w sensie logiki rozmytej.

1. Duch W, Grąbczewski K, Jankowski N, Adamczak R. *Optimization and interpretation of rule-based classifiers*. Advances in Soft Computing, Physica Verlag (Springer 2000), pp. 1-13
2. Grąbczewski K, Duch W, Adamczak R. *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. 637-662
3. Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K, Jankowski N. *Neural methods of knowledge extraction*. Control and Cybernetics **29**, No. 4 (2000), pp. 31-50
4. Duch W, Hayashi Y, *Computational intelligence methods and data understanding*. Springer studies in fuzziness and soft computing **54** (2000), pp. 256-270

I.1.7. Opracowano nowe podejście do rozumienia struktury danych oparte na regułach oceniających podobieństwo do prototypów. Okazuje się, że przyjęcie miary odległości w formie addytywnych przyczynków zależnych od pojedynczych cech (przykładem jest miara odległości Manhattan) pozwala na bezpośrednią interpretację takich reguł w sensie logiki rozmytej. Reguły klasyczne otrzymać można dla używając metryki Chebyscheva. Reguły tego typu generować można będzie za pomocą wielu metod inteligencji obliczeniowej: sieci neuronowych, drzew decyzji i metod opartych na podobień-

stwie. Ponieważ te ostatnie nie były dotychczas używane do generacji reguł logicznych opracowaliśmy metodę wybierania najlepszych prototypów w algorytmie najbliższego sąsiada.

Algorytm SBL-PM można zastosować zarówno w przypadku ciągle napływających danych jak i do analizy istniejących baz treningowych. W niektórych przypadkach zmniejszenie liczby wektorów referencyjnych poprawia wyniki pomimo zmniejszenia złożoności całego systemu. Zrobiliśmy wstępne obliczenia dla kilku baz danych, pozwalające na wyróżnienie prototypowych wektorów, które są wzorcowymi reprezentantami swojej klasy. Zastosowanie tej metody do wyboru najlepszych kandydatów na studia prowadzi do wzorcowej sylwetki kandydata ('supermena') i jest alternatywną formą wyjaśniania danych. Kolejnym krokiem będzie zbadanie możliwości optymalizacji prototypów przez zmianę ich własności na takie, które nie istnieją w bazie danych.

1. Grudziński K, Duch W (2000) SBL-PM: A Simple Algorithm for Selection of Reference Instances for Similarity Based Methods, Intelligent Information Systems IIS'2000, Physica Verlag (Springer), pp. 99-108
2. Duch W, Grudziński K
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. 663-690
3. Duch W, Grudziński K, *Prototype based rules - new way to understand the data.*
International Joint Conference on Neural Networks 2001. Washington D.C. 14-18.07. 2001, pp. 1858-1863

Szukanie wiedzy w bazach danych (data mining) nabiera coraz większego znaczenia i na wielu konferencjach organizuje się sesje specjalne poświęcone temu zagadnieniu. Temat ten będzie przez naszą grupę nadal intensywnie rozwijany. Otrzymaliśmy zaproszenie do napisania artykułu przeglądowego w Proceedings of the IEEE, najbardziej prestiżowym piśmie IEEE.

Najnowsze publikacje:

1. Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K, A new methodology of extraction, optimization and application of crisp and fuzzy logical rules. IEEE Transactions on Neural Networks 12 (2001) 277-306
2. Duch W, Grąbczewski K, Adamczak R, Grudziński K, Hippe Z.S. (2001) Rules for melanoma skin cancer diagnosis. KOSYR, Wrocław 2001, pp. 59-68

I.2. Rozwój i zastosowania neurorozmytego systemu FSM

Inspiracją do stworzenia tego modelu były poszukiwania empirycznej teorii umysłu dającej odpowiedzi na szczegółowe pytania związane z eksperymentami w neuropsychologii i psychologii poznawczej, zwłaszcza w zagadnieniach kategoryzacji. Model działania umysłu 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. Model neurorozmyty Feature Space Mapping (FSM) estymuje prawdopodobieństwa rozkładu danych za pomocą sieci elementów, które realizują funkcje separowalne. Pozwala to na interpretację tych funkcji w jako funkcji przynależności w sensie logiki rozmytej. Jest to model bardzo bogaty, można go rozpatrywać z wielu punktów widzenia, jako sieć neuronową, system logiki rozmytej korzystający z zależnych od kontekstu funkcji przynależności, system oparty na podobieństwie (przy użyciu funkcji zlokalizowanych) integrujący dwa podstawowe modele kategoryzacji w psychologii (teorię prototypów i teorię egzemplarzy), a nawet jako system realizujący heurystyki w procesach poszukiwania rozwiązań.

I.2.1. W ostatnich latach opracowano wiele ulepszeń algorytmu modelu FSM: usprawniliśmy metody uczenia, sposób inicjalizacji sieci, rodzaj stosowanych funkcji transferu, wprowadziliśmy możliwości pełnej rotacji granic decyzji w wielowymiarowych przestrzeniach cech przy użyciu funkcji zlokalizowanych za pomocą N parametrów określających kierunek obrotu, tworzenie komitetów sieci FSM i spo-

soby uśredniania wyników, metody uzupełniania brakujących wartości w sieciach FSM badając lokalne rozkłady gęstości prawdopodobieństwa w podprzestrzeniach o określonych wartościach celem ustalenia lokalnych wartości średnich.

W 2000 roku system ten zastosowany został do analizy wielu danych medycznych, fizycznych, chemicznych i biologicznych w związku z grantem promotorskim i pracą doktorską R. Adamczaka, obronioną w czerwcu 2001.

1. Duch W, Adamczak R, Diercksen G.H.F. *Classification, Association and Pattern Completion using Neural Similarity Based Methods*. Applied Mathematics and Computer Science **10**(4) (2000) 101-120
2. Duch W, Adamczak R, Diercksen G.H.F. *Neural Networks from Similarity Based Perspective*. New Frontiers in Computational Intelligence and its Applications. Ed. M. Mohammadian, IOS Press, Amsterdam, pp. 93-108
3. 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. 801-824

I.2.2. Model FSM zastosowany został do analizy wielu danych, w tym oceny aktywności biologicznej pirymidyn i przewidywania własności rakotwórczych związków chemicznych (predictive toxicology challenge, organizowane przez Uniwersytet w Oxfordzie). Otrzymano bardzo dobre wyniki, opublikowane w pracach:

1. Duch W, Adamczak R, Diercksen GHF. *Feature space mapping neural network applied to structure-activity relationship problems*. ICONIP-2000, 7th International Conference on Neural Information Processing, Nov. 2000, Dae-jong, Korea, ed. by Soo-Young Lee, pp. 270 – 274
2. Adamczak R and Duch W. *Neural networks for structure-activity relationship problems*. W: L. Rutkowski, R. Tadeusiewicz, eds, Neural Networks and Soft Computing, Zakopane, June 2000, pp. 669-674

I.2.3. Opracowaliśmy nową taksonomię funkcje transferu, tworząc je systematycznie z różnych funkcji aktywacji i funkcji wyjścia i dochodząc do funkcji o kilku parametrach i dużych możliwościach tworzenia złożonych granic decyzji. Chociaż sieci MLP są uniwersalnymi aproksymatorami w niektórych przypadkach nowe funkcje transferu pozwalają na znalezienie rozwiązań za pomocą znacznie prostszych sieci o zredukowanej liczbie parametrów. Szczególnie interesująca możliwość to tworzenie heterogenicznych sieci neuronowych, wykorzystujących funkcje transferu różnego typu. Wstępne wyniki dotyczące konstrukcji takich systemów oraz używania różnych funkcji w systemie FSM zostały wysłane do druku w 2000 roku.

Chociaż zagadnienie to przez kilka lat nie było należycie doceniane przez ekspertów zainteresowanie możliwościami wykorzystania funkcji transferu wzrosło i w kwietniu 2001 zorganizowaliśmy sesję specjalną na konferencji 9th European Symposium on Artificial Neural Networks (ESANN), Brugge, Belgia.

1. Duch W, Jankowski N. *Taxonomy of neural transfer functions*, International Joint Conference on Neural Networks IJCNN 2000, Vol. III, pp. 477-484
2. Duch W, Jankowski N, *Transfer functions: hidden possibilities for better neural networks*. 9th European Symposium on Artificial Neural Networks (ESANN), Brugge 2001. De-facto publications, pp. 81-94
3. Jankowski N, Duch W, *Optimal transfer function neural networks*. 9th European Symposium on Artificial Neural Networks, Bruges, Belgium. De-facto publications, pp. 101-106

I.2.4. Rozwinięto oprogramowanie w języku C++ realizujące model FSM działające pod kontrolą systemów Unixowych (Solaris, Linux) jak i pod Windows 95/NT. Poprawiono interfejs graficzny, ułatwiający korzystanie z programu, zwiększono jego stabilność, możliwości używania różnych funkcji trans-

feru, tworzenia komitetów sieci, regulacji końcowej złożoności, oraz sposobów testowania. Pomimo tych zmian sieć FSM można zastosować bez manipulacji parametrami do prawie każdej bazy danych osiągając dobre wyniki. Program jest nadal rozwijany i zostanie zintegrowany z naszym pakietem do data mining.

1. R. Adamczak, Zastosowanie sieci neuronowych do klasyfikacji danych doświadczalnych. Praca doktorska, KMK UMK, Toruń 2001, 124 str.

1.3. Badanie złożoności ontogenicznych sieci neuronowych.

Sieci ontogeniczne dopasowują swoją złożoność do danych pozwala na znalezienie nieobciążonych modeli klasyfikatorów o minimalnej wariancji. Sieć FSM dodaje i usuwa nowe jednostki w miarę potrzeb. W sieciach typu IncNet możliwe jest dodawanie, usuwanie i łączenie neuronów, używanie różnych funkcji transferu i obracanie granic decyzji w wielowymiarowych przestrzeniach cech. Przy współpracy z dr Visakanem Kadiramanathanem z Computer Science Department, University of Sheffield, prowadzono dalsze prace nad ontogenicznym modelem sieci neuronowej IncNet. W modelu tym rozwinięto metodę kontroli złożoności sieci opartą na testach statystycznych.

Uzyskano doskonałe rezultaty w ramach uproszczonej metody uczenia sieci IncNet opartej na filtrze Kalmana, w szczególności w zastosowaniu do klasyfikacji danych medycznych oraz w zagadnieniach związanych z aproksymacją. Sieć IncNet zastosowana została do analizy danych medycznych posiadających wiele klas. Dla każdej klasy utworzony został automatycznie model o odpowiedniej złożoności. Sieć IncNet zastosowana została również do problemów aproksymacyjnych z bardzo dobrymi wynikami. W oprogramowaniu rozwiniętym przez Norberta Jankowskiego zaimplementowano wiele ulepszeń. Przeprowadzono pierwsze testy z siecią IncNet dodającą neurony o bogatej parametryzacji, specjalizujące się w wyniku uczenia. Dr Jankowski przygotowuje monografię na temat sieci ontogenicznych.

1. 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. 257-294
2. Jankowski N, Duch W, *Optimal transfer function neural networks*. 9th European Symposium on Artificial Neural Networks, Bruges, Belgium. De-facto publications, pp. 101-106

1.4. Zastosowanie metod inteligencji obliczeniowej do analizy danych medycznych i psychometrycznych.

W poprzednich latach realizowaliśmy grant KBN dotyczący analizy danych medycznych w oparciu o rozwijane przez nas metody inteligencji obliczeniowej. Jednym z celów naszych badań jest analiza porównawcza dostępnych metod CI w ważnych z praktycznego punktu widzenia zastosowaniach. Innym celem było odkrywanie wiedzy w danych i znajdowania najprostszych opisów danych. w roku 2000 przeanalizowaliśmy wiele różnych medycznych i psychometrycznych baz danych.

1.4.1. Korzystając z publicznie dostępnych baz danych dokonaliśmy porównania wielu systemów klasyfikujących dane jak i systemów analizy logicznej. Wyniki tych badań dostępne są ciągle uzupełniane i udostępniane naszych stronach internetowych.

<http://www.phys.uni.torun.pl/kmk/projects/datasets.htm>

Otrzymaliśmy liczne nowe rezultaty dla wielu danych medycznych, również dla danych zbieranych w Polsce dotyczących chorób cukrzycy i czerniaka. Otrzymane reguły są proste i posługują się niewielką liczbą ważnych diagnostycznie testów. Porównanie z innymi metodami uczenia maszynowego, w tym z metodami generującymi reguły rozmyte, pokazuje jednoznacznie wyższość proponowanych przez nas metod. Reguły podane są na stronie:

<http://www.phys.uni.torun.pl/kmk/projects/rules.htm>

i opublikowane w wymienionych uprzednio pracach.

I.4.2. Rozszerzyliśmy naszą bazę danych psychometrycznych (ok. 1600 przypadków dla kobiet i tyle samo dla mężczyzn) podzielonych na 28 klas. Reguły logiczne opisujące te dane otrzymano z systemu SSV i FSM, zoptymalizowano i użyto w systemie do wspomagania diagnostyki zaburzeń psychologicznych i psychiatrycznych używany w pracowni psychologicznej Przychodni Akademickiej UMK. Ponieważ system ten posługuje się testami psychologicznymi MMPI, których adaptacja do polskich warunków nie została jeszcze oficjalnie zakończona nie możemy go rozpowszechniać na inne ośrodki, ale w momencie uzyskania licencji będziemy gotowi do jego rozpowszechnienia.

Szukaliśmy innych testów i danych psychologicznych podobnego typu, np. testów przydatności zawodowej. Przeanalizowaliśmy dane otrzymane od psychiatrów z Korei dotyczące rozróżnienia dwóch rzadkich form schizofrenii, ale nie zawierały one interesujących informacji; analizowaliśmy również dane z nowych testów przydatności zawodowej, ale wyniki są dość słabe. Niektóre testy psychologiczne nie są po prostu wiarygodne. Liczymy na dalszą współpracę z ośrodkami zagranicznymi w pozyskiwaniu dobrych danych psychometrycznych.

1. Jankowski N, Gomuła J. *Simultaneous differential diagnoses basing on MMPI inventory using neural networks and decision trees methods*. In L. Bobrowski, J. Doroszewski, E. Marubini, and N. Victor, editors, *Statistics and Clinical Practice*, Warsaw, Poland, June 2000, pp. 89-95

I.4.3. Gromadzimy dane medyczne z polskich i zagranicznych ośrodków naukowych. Dane te wymagają często uzupełnień i wyjaśnień, co w niektórych przypadkach zajmuje długi okres czasu. Nasze metody analizy danych medycznych przedstawiane były na specjalistycznych konferencjach, takich jak „4th International Seminar on Statistics and Clinical Practice”, Warszawa 26-30.06.2000. Analiza danych medycznych pozwala na odkrywanie zawartej w nich wiedzy. W przypadku danych dotyczących czerniaka okazało się, że całkiem proste reguły logiczne pozwalają na uzyskanie prawie doskonałej dokładności diagnoz – poprzednio publikowane wyniki nie pozwalały ani na zrozumienie struktury tych danych ani nie dawały tak wysokiej dokładności.

Na temat japońskich danych dotyczących chorób wątroby napisaliśmy już kilka prac. Ponieważ są to dane trudne, z nakładającymi się silnie klasami, opracowaliśmy nowe podejście do analizy takich oparte na eliminacji klas i wprowadzania nowych klas pośrednich. Dzięki temu w przypadkach, w których klasyfikacja jest mało wiarygodna można nadal podać ekspertom jakieś użyteczne informacje. Takie systemy nazwano *eliminatorami*. Uzyskiwane w ten sposób informacje pozwalają na znacznie lepszą ocenę wiarygodności diagnoz i na odkrywanie nowych jednostek chorobowych, przypadków mieszanych występowania kilku rodzajów chorób równocześnie.

Oprócz danych z kwestionariuszy i testów medycznych rozpoczęliśmy również analizowanie obrazów medycznych. Jest to nowy temat, wspierany rozpoczętym w październiku grantem promotorskim.

1. Duch W, Grabczewski K, Adamczak R, Grudzinski K, Hippe Z.S. *Rules for melanoma skin cancer diagnosis*. *Computer Recognition Systems (KOSYR)*, Wrocław 2001, pp. 59-68
2. Duch W, Adamczak R, Hayashi Y, *Neural eliminators and classifiers*, ICONIP-2000, 7th International Conference on Neural Information Processing, Nov. 2000, Dae-jong, Korea, ed. by Soo-Young Lee, pp. 1029 – 1034
3. Adamczak R, Duch W, *Neural networks for structure-activity relationship problems*. W: L. Rutkowski, R. Tadeusiewicz, eds, *Neural Networks and Soft Computing*, Zakopane, June 2000, pp. 669-674
4. Duch W, Adamczak R, Diercksen GHF, *Feature space mapping neural network applied to structure-activity relationship problems*. ICONIP-2000, 7th International Conference on Neural Information Processing, Nov. 2000, Dae-jong, Korea, ed. by Soo-Young Lee, pp. 270 – 274

1.5. Integracja metod inteligencji obliczeniowej i nowe modele sieci neuronowych.

Środowisko ekspertów w zakresie rozpoznawania obiektów, uczenia maszynowego i sieci neuronowych wyrasta z nieco innych tradycji i ma silne tendencje do stosowania własnych metod, stąd stosunkowo niewielkie przenikanie się idei opracowanych w pokrewnych dziedzinach. Naszym celem jest integracja metod uczenia maszynowego (ML, machine learning) i statystycznych metod rozpoznawania obiektów z metodami typu sieci neuronowych. Metody oparte na precedensach (case-based) lub śladach pamięci (memory-based methods) znajdują szerokie zastosowanie praktyczne, skutecznie konkurując z sieciami neuronowymi.

1.5.1. Opracowaliśmy i rozszerzyliśmy ogólny schemat dla metod opartych na podobieństwie (Similarity-Based Methods, SBM), obejmujący jako szczególne przypadki większość znanych metody rozpoznawania obiektów, takich jak różne warianty k-NN czy kwantyzacji wektorowej LVQ, wiele modeli sieci neuronowych, w tym najbardziej popularne modele MLP i RBF, oraz wiele innych metod. Schemat ten oparty jest na parametryzacji prawdopodobieństw *a posteriori* za pomocą funkcji podobieństwa, sposobu wyboru prototypowych wektorów, sposobu ważenia ich wpływu na obliczane prawdopodobieństwo, liczby wykorzystywanych wektorów prototypowych, sposobu ich wyboru i optymalizacji ich położeń, sposobu wyboru cech do klasyfikacji, sposobu mieszania różnych modeli ze sobą i wielu innych procedur. Opisaliśmy zastosowania tego schematu w zagadnieniach klasyfikacji, aproksymacji, asocjacji i szukania brakujących danych.

1. Duch W. *Similarity based methods: a general framework for classification, approximation and association*, Control and Cybernetics 29(4) (2000) pp. 1-30
2. 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. 663-690
3. Duch W, Adamczak R, Diercksen GHF (2000) *Neural Networks from Similarity Based Perspective*. New Frontiers in Computational Intelligence and its Applications. Ed. M. Mohammadian, IOS Press, Amsterdam, pp. 93-108

1.5.2. Z teorii wynika szereg zupełnie nowych algorytmów, implementowanych i testowanych obecnie w ramach pracy doktorskiej Karola Grudzińskiego. Próba zrozumienia związków pomiędzy sieciami neuronowymi a metodami opartymi na podobieństwie doprowadziła nas do uogólnienia najbardziej obecnie popularnych perceptronów wielowarstwowych przez wprowadzenie nie-euklidesowych funkcji odległości. Otrzymany model D-MLP jest na razie słabo zbadany. Pozwala on na dramatyczne zmiany granic funkcji odległości. Nie zbadano jeszcze wielu możliwości sieciowych realizacji metod opartych na schemacie SBM, chociaż wstępnie zostały one opisane.

1. Duch W, Adamczak R, Diercksen G.H.F. *Neural Networks from Similarity Based Perspective*. New Frontiers in Computational Intelligence and its Applications. Ed. M. Mohammadian, IOS Press, Amsterdam, pp. 93-108

1.5.2. Nowe metody uczenia wymagają minimalizacji funkcji kosztów, która nie zawsze da się przeprowadzić za pomocą metod gradientowych. Przykładem takiego modelu jest uogólnienie k najbliższych sąsiadów (k NN), w którym zastosowaliśmy skalowanie poszczególnych wymiarów w funkcji odległości i nową metodę wyboru istotnych cech. Ze wszystkich metod, które mogłyby znaleźć zastosowanie do optymalizacji sieci neuronowych jedynie algorytmy genetyczne są powszechnie stosowane, chociaż nie ma przekonujących wyników świadczących o ich wyższości nad innymi sposobami optymalizacji modeli neuronowych. Dokonaliśmy przeglądu metod globalnej minimalizacji w zastosowaniu do sieci neuronowych, te same metody można stosować w schematach SBM. Oprócz metod minimalizacji użyliśmy też metod szukania. Jest to istotne przy takich uogólnieniach metod opartych na podobieństwie, w których pojawiają się ciągle, nieliniowe parametry optymalizacyjne.

1. Grudziński K, Duch W (2000) *SBL-PM: A Simple Algorithm for Selection of Reference Instances for Similarity Based Methods*, Intelligent Information Systems IIS'2000, Physica Verlag (Springer), pp. 99-108

I.5.3. Ponieważ nie można stworzyć jednego systemu, który będzie zawsze najlepiej działał na wszystkich danych poszukujemy najlepszej metody wśród tych, które można wygenerować w schemacie metod opartych na podobieństwie. Opracowaliśmy wstępny algorytm automatycznego konstruowania optymalnej metody mieszczącej się we wspólnym schemacie, metody najlepiej działającej dla konkretnej bazy danych. Oprócz możliwości wyboru liczby sąsiadów, wyboru i optymalizacji wielu funkcji odległości, można w nim dokonywać selekcji cech i wektorów referencyjnych (prototypów). Optymalizacja miary podobieństwa obejmuje skalowanie odległości i minimalizację funkcji kosztów za pomocą metody symulowanego wyżarzania i metody wielosympleksowej. Naszym celem jest osiągnięcie najlepszych rezultatów dla wszystkich 22 zbiorów danych użytych w projekcie StatLog (Esprit, Unia Europejska). Mamy już najlepsze rezultaty dla ponad połowy z tych baz danych, a pozostało jeszcze wiele metod do implementacji.

Kolejnym krokiem będzie rozszerzenie możliwości tego programu poza zagadnienia klasyfikacji, do problemów wymagających asocjacji, uzupełniania brakujących elementów wektora wejściowego (pattern completion), w tym brakujących danych i innych problemów. Takie możliwości znajdują się w opracowywanym przez nas pakiecie do data mining.

1. Duch W, Grudziński K, *Meta-learning: searching in the model space*. ICONIP 2001, Shanghai (wysłane)

Rozpoczęliśmy też pracę (w ramach nowej pracy doktorskiej) nad metodami oceny podobieństwa wykraczającymi poza paradygmat przestrzeni wektorowych o ustalonej liczbie wymiarów. Jest to potrzebne do zastosowań bioinformatycznych, chemicznych i innych, w których obiekty mają różną strukturę, trudną do opisaną za pomocą ustalonych cech.

I.6. Wizualizacyjna eksploracja wielowymiarowych danych.

Badania należące do tej grupy pozwalają na zrozumienie struktury wielowymiarowych danych dzięki tworzeniu ich wizualnych reprezentacji. W minionych latach porównaliśmy różne metody redukcji wymiarowości i ich przydatność do określania najważniejszych cech lub ich nieliniowej kombinacji. W szczególności porównaliśmy mapy wielowymiarowych danych otrzymane za pomocą sieci Kohonena z mapami otrzymanymi w wyniku minimalizacji miary zachowania topograficznego sąsiedztwa wielowymiarowych danych. Wprowadzone przez nas miary ilościowe zgodności topograficznej przestrzeni danych i niskowymiarowych przestrzeni siatek neuronów pokazują, że odwzorowanie Kohonena dalekie jest od optymalnego. Podejście oparte na minimalizacji takich miar, czyli skalowanie wielowymiarowe (MDS) oraz odwzorowanie Sammona, ma solidniejsze podstawy matematyczne niż metoda Kohonena, ale jest bardzo kosztowne obliczeniowo.

Nasze prace rozwinęły się w następujących kierunkach:

I.6.1. Wprowadzono nowe algorytmy minimalizacji dla MDS pozwalające na szybkie określenie pozycji pojedynczego wektora w stosunku do istniejącej mapy (mapowanie relatywne). W oparciu o ten algorytm opracowano program do interaktywnej wizualizacji wielowymiarowych danych. Interesującym zagadnieniem jest nie tylko interaktywna wizualizacja wielowymiarowych danych, lecz również próba oglądania granic decyzji różnych klasyfikatorów. Ponieważ granice decyzji w N wymiarach są $N-1$ wymiarowymi obiektami ich obraz w dwuwymiarowej reprezentacji jest rozmytą figurą. Dodawanie punktów z gaussowskiego rozkładu wokół wektorów z danymi i zaznaczanie klas zgodnie z działaniem danego klasyfikatora pozwala uwidocznic granice decyzji takich klasyfikatorów.

Program do interaktywnej wizualizacji działa w systemach Windows, pozwalając na zakreślenie na ekranie lub wybór dowolnego obszaru wokół jakiegoś wektora i powiększenie tego obszaru z przeliczaniem optymalnych położenia oglądanych wektorów (zoomowanie). Liczba punktów z różnych klas znajdujących się w pobliżu pozwala na ocenę prawdopodobieństwa klasyfikacji, a stopień zaufania do tej oceny można oszacować na podstawie miary zniekształceń topograficznych przy redukcji wymiarowości. Ocena nowego przypadku może wówczas pokazać, że jest to typowy przypadek daleki od granic decyzji i innych wektorów lub też przypadek trudny do zdiagnozowania, położony w pobliżu granicy różnych klas.

Program zastosowany został do analizy danych medycznych i psychometrycznych a tworzone przez niego mapy porównywane są z informacjami otrzymywanymi za pomocą wykresów prawdopodobieństw otrzymanych przy założeniu zwiększającej się niepewności położenia danego wektora.

1. Naud A and Duch W (2000) *Interactive data exploration using MDS mapping*. 5th Conference on Neural Networks and Soft Computing, Zakopane, June 2000, pp. 255-260
2. A. Naud, *Neural and statistical methods for multidimensional data visualization*. PhD Thesis, KMK UMK Toruń 2001, pp. 110
3. Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K, Grudziński K, Jankowski N, Naud A, 5th Conference on Neural Networks and Soft Computing, Zakopane 5-10.06.2000, tutorial: "Understanding the data".

I.6.2. Badanie całkowitego prawdopodobieństwa klasyfikacji daje ogólne wyobrażenie o tym, na ile dany przypadek jest typowy. Jeśli przy coraz większym zakładanym błędzie pomiaru pojawiają się jakieś nowe klasy diagnostyczne to należy zbadać dokładnie, które cechy są za to odpowiedzialne. Probabilistyczne przedziały ufności (PPU) wprowadzone w pracy doktorskiej N. Jankowskiego właśnie na to pozwalają. Jest to nowa metoda określania wiarygodności klasyfikacji dla dowolnego klasyfikatora, umożliwiająca szczegółową eksplorację okolic podawanych do diagnozy danych. Metoda PPU pozwala również na śledzenie zmian trajektorii zachowania w czasie dzięki interpolacji wartości pomiędzy poszczególnymi badaniami.

1. 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. I.8, pp. 257-294
2. Jankowski N, *Probabilistic intervals of confidence*. W: L. Rutkowski and R. Tadeusiewicz, editors, Neural Networks and Soft Computing, Zakopane, Poland, June 2000, pp. 215-220

Rozpoczęliśmy też prace nad wizualizacją danych dynamicznych, np. trajektorii w układach dynamicznych (w ramach pracy magisterskiej).

I.7. Analiza szeregów czasowych obrazów medycznych

Bardzo popularną obecnie metodą filtracji artefaktów z szeregów czasowych stała się analiza czynników niezależnych (ICA, Independent Component Analysis). Wynikiem współpracy z Instytutem Neuropsychologii Maxa Plancka w Lipsku, zajmujących się między innymi analizą obrazów z funkcjonalnego jądrowego rezonansu magnetycznego (fMRI), były napisane przez naszego magistranta A. Chojnowskiego programy implementujące dwa algorytmy ICA. Programy te zastosowano do obrazów fMRI. Trudność w tym przypadku polega na ocenie jakości uzyskiwanych obrazów. Nawiązaliśmy kontakty ze specjalistami z RIKEN (Japonia) i Helsinki University (Finlandia). Zagadnienie to jest nadal rozwijane w Instytucie Neuropsychologii, ale odejście do lepiej płatnej pracy mgr Chojnowskiego spowodowało przerwanie prac w tej dziedzinie.

1. Chojnowski A, Duch W (2000) *Analiza szeregów czasowych obrazów*. Biocybernetyka 2000, Tom 6: Sieci neuronowe (red. W. Duch, J. Korbicz, L. Rutkowski i R. Tadeusiewicz), rozdz. II.17, pp. 569-588

I.8. Projekt COST: szukanie wiedzy dla potrzeb naukowych i technologicznych.

W czerwcu 1999 roku złożyliśmy przy współpracy z prof. Diercksenem z Instytutu Astrofizyki Maxa Plancka w Garching koło Monachium projektem dla biura COST Unii Europejskiej, *Knowledge Exploration in Science and Technology*. Chęć udziału w tym projekcie zapowiedziało 25 grup z 11 krajów Europy. Projekt ten został zatwierdzony dopiero w 2001 roku i trwa właśnie procedura jego formalnego uruchamiania.

Projekt dotyczy zastosowania metod inteligencji obliczeniowej do odkrywania wiedzy w naukowych i technologicznych bazach danych. Przewidziano również pracę nad rozwojem metod, koniecznym dla

odkrywania wiedzy w złożonych, hierarchicznych i zmieniających się w czasie bazach tego typu. Liczymy na dostęp do danych posiadanych przez grupy badawcze, które zgłosiły akces do tego projektu. Obejmują one chemiczne bazy danych, dla których istotne jest przewidywanie toksyczności różnych związków, ich aktywności biologicznej, przewidywania własności materiałów, bazy farmakologiczne, genomiczne i proteomiczne bazy danych, oraz bazy danych z eksperymentów astronomicznych i fizycznych.

I.9. Pozostałe tematy.

Oprócz głównych tematów, opisanych powyżej, podejmowaliśmy też różne drobniejsze tematy związane z metodami inteligencji obliczeniowej.

I.9.1. Jeśli dane nie są najlepszej jakości nie należy zbyt wierzyć w podawane wartości ani w przypisane wektorom klasy. Metoda regularyzacji danych opracowana przez N. Jankowskiego pozwala poprawiać dane i przypisywać im prawdopodobieństwa klas zamiast jednoznacznych wartości klas, lub odrzucać niektóre dane jako błędne.

1. Jankowski N, *Data regularization*. W: L. Rutkowski, R. Tadeusiewicz, eds, 5th Conference on Neural Networks and Soft Computing, Zakopane, Poland, June 2000, pp. 209-214

I.9.2. Nowa metoda traktowania zmiennych symbolicznych, pozwalająca na sensowną zamianę tych zmiennych na wartości numeryczne i zastosowanie dowolnych klasyfikatorów do tak przygotowanych danych stanowiła temat pracy magisterskiej a jej wyniki przedstawione zostały w publikacji:

1. Duch W, Grudziński K and Stawski G (2000) *Symbolic features in neural networks*. 5th Conference on Neural Networks and Soft Computing, Zakopane, June 2000, pp. 180-185
2. G. Stawski, *Probabilistyczne miary odległości, sieci neuronowe i cechy symboliczne*. (KMK UMK, Toruń 6/2000)

I.9.3. Przeprowadzono wstępne analizy danych wiążących aktywność biologiczną i chemiczną cząsteczek chemicznych (np. ich rakotwórczość) z ich strukturą. Jest to tematyka którą zamierzamy dalej rozwijać w związku z programem COST. Pozyskano również dane z Deutsche Krebs Forschungs Zentrum w Heidelbergu, z którym nawiązaliśmy współpracę.

1. Duch W, Adamczak R, Diercksen GHF (2000) *Feature space mapping neural network applied to structure-activity relationship problems*. ICONIP-2000, 7th International Conference on Neural Information Processing, Dae-jong, Korea, ed. by Soo-Young Lee, pp. 270 – 274
2. Adamczak R and Duch W (2000) *Neural networks for structure-activity relationship problems*. 5th Conference on Neural Networks and Soft Computing, Zakopane, June 2000, pp. 669-674

I.9.4. Do spółki z pracownikami Deutsche Krebs Forschungs Zentrum w Heidelbergu, University of Ulster w Irlandii i University of Tartu w Estonii złożyliśmy projekt *Breeding Creative Information Societies* do programu Future Emerging Technologies (FET) V Programu Ramowego UE.

Projekt zakłada stworzenia symulatora sztucznego środowiska i agentów programowych o różnym poziomie złożoności, które posiadając lokalną wiedzę i wymieniając pomiędzy sobą informację wykazują własności emergentne, łącznie z twórczymi zachowaniami.

I.9.5. W ramach badań nad inteligentnym szukaniem informacji wygłoszono szereg referatów i napisano artykuł przeglądowy o metodach szukania prac dotyczących sieci neuronowych w Internecie. Artykuł ten został przetłumaczony w piśmie zajmującym się informacją naukową.

1. Duch W (2000) Neural networks papers on the Internet. IEEE Transactions on Neural Networks Vol. 11 (No. 6), 2000, 1509-1511
2. Duch W, *Publikacje naukowe o sieciach neuronowych w Internecie*. EBIB, Elektroniczny Biuletyn Informacyjny Bibliotekarzy 1 (2001) 19

I.9.6. W. Duch był współredaktorem książki zawierającej przegląd zagadnień dotyczących sieci neuronowych.

1. Duch W, Korbicz J, Rutkowski L, Tadeusiewicz R, red. (2000) Biocybernetyka 2000: *Sieci neuronowe*. (Akademicka Oficyna Wydawnicza, Warszawa, 850 str.)

II.1 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 *Zastosowanie technik wielociałowych w badaniach oscylacji molekularnych*.

II.1.1. 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. Program został rozwinięty w kierunku graficznym i współpracy z modułami napisanymi w systemie Mathematica.

II.1.2. Kontynuowano badania teoretyczne niższych stanów elektronowych gliksalu (C₂O₂H₂) przy zastosowaniu różnych wariantów metody funkcjonałów gęstości (DFT). Do wyznaczenia powierzchni otwartopółkowego 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 najnowszej techniką „zwolnionej fluorescencji” (slow fluorescence). Wyniki te wchodzi w zakres pracy doktorskiej mgr S. Zelka, część jest już opublikowana.

1. Zelek S, Wasilewski J, Heldt J (2000) *Density functional study of the S₀ (X ¹A_g) and T₁ (a ³A_u) states of the glyoxal molecule*. Computers & Chemistry 24:263-274

II.1.4. 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), prowadziła 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. Większość prac prowadzona była w zespole prof. Staemmlera na Wydziale Chemii Uniwersytetu w Bochum (Niemcy), gdzie mgr Wierzbowska przebywała łącznie 13 miesięcy na stypendium Romana Herzoga (administrowanym przez Fundację Alexandra von Humboldta). Wynikiem jest praca doktorska, Obroniona przed Radą Instytutu Fizyki w czerwcu 2000, komunikat konferencyjny oraz publikacja; dalsze publikacje są w planie.

1. W. Zhao, M. Asscher, M. Wilde, K. Al.-Shamery, H.-J. Freund, V. Staemmler, M. Wierzbowska *Phys. Rev.* **B62** 7527-7534 (2000)
2. M. Wierzbowska, *Ab initio Calculations for the Adsorption of Oxygen and Potassium on the $\text{Cr}_2\text{O}_3(0001)$ Surface*, praca doktorska, Toruń, 1999 (obroniona 6.07.2000)

II.2. 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. Ducha w ramach badań statutowych.

II.2.1. Prowadzone były badania układów modelowych w ramach nowych wersji wieloreferencyjnych metod sprzężonych klastrów (MRCC - Multi-Reference Coupled Clusters) w sformułowaniach walencyjnie-universalnym, stanowo-universalnym i stanowo-specyficznym. Badania dotyczyły wpływu bazy jednoczątkowej (formy orbitali molekularnych) na zbieżność rozwinięcia klastrowego dla stanów podstawowych i wzbudzonych, ze szczególnym uwzględnieniem występowania tzw. stanów obcych („intruderów”). Prof. Wasilewski jest aktywnym uczestnikiem seminarium naukowego dotyczące teorii korelacji elektronowej.

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

II.2.2. Przy współpracy z grupą prof. H. Nakatsuji z Kyoto University ukończono pracę dotyczącą stanów wzbudzonych furanu i pyrrolu obliczonych za pomocą metody spinowo zaadaptowanych klastrów w połączeniu z metodą oddziaływania konfiguracyjnego.

Przy współpracy z grupą z Laboratoire Physique Quantique, Paul Sabatier Universite, rozwijano kilka wersji rozszerzeń metody CI korygujących jej ekstensywność w sposób zbliżający ją do metod sprzężonych klastrów.

Publikacje

1. Jian Wan, **Jarosław Meller**, Masahiko Hada, Masahiro Ehara and Hiroshi Nakatsuji, *Electronic excitation spectra of furan and pyrrole: Revisited by the symmetry adapted cluster-configuration interaction method*. *Journal of Chemical Physics* (2000) 113: 7853-7866
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)

II.3. Symulacje komputerowe w fizyce, chemii i biologii

Prowadzono prace rozpoznawcze i studialne w następujących kierunkach:
oddziaływanie tlenu molekularnego z atomami i małymi cząsteczkami;
zastosowanie różnego typu funkcjonałów mieszanych w metodzie DFT;
zastosowanie metod DFT do opisu stanów otwartopowłokowych;

zastosowanie reprezentacji zmiennej dyskretnej (DVR - Discrete Variable Representation) do numerycznego wyznaczania poziomów oscylacyjno-rotacyjnych małych cząsteczek.

W ramach obszernego studium porównawczego metod DFT i MP2 zbadano struktury przestrzenne i stany oscylacyjne krzemowych analogów etylenu. Wyniki są podstawą do dalszych badań i przyszłej publikacji.

2. M. Walda, *Badania kwantowo-mechaniczne struktury i oscylacyjnych widm w podczerwieni analogów krzemowych etylenu* (KMK UMK, Toruń 6/2001)

II.5. Bioinformatyka i nauki o życiu.

W ramach współpracy z grupa prof. Rona Elbera z Cornell University, gdzie dr Meller przebywał na stażu przez cały rok 2000, oraz współpracy z Centrum Fritza Habera Uniwersytetu Hebrajskiego w Jerozolimie, kontynuowano badania w zakresie bioinformatyki i nauk o życiu. Początkowo badania te dotyczyły głównie metod chemii kwantowej w zastosowaniu do białek, następnie metod symulacyjnych typu dynamiki molekularnej oraz zastosowania tych algorytmów do symulacji białek (peptydów) na wielką skalę. Nawiązano nowe kontakty z jedną z wiodących instytucji amerykańskich w dziedzinie nauk o życiu i ich klinicznych zastosowań, Children's Hospital Medical Center, gdzie od maja 2001 roku dr Meller objął w Department of Pediatric Informatics stanowisko assistant professor. W związku z tym planujemy rozwój tematów o charakterze bioinformatycznym, takich jak analiza danych genomicznych z mikromacierzy i metody przewidywania struktury białek.

II.5.1. Opracowanie nowych potencjałów przydatnych do przewidywania struktury białek.

Wiele wysiłku włożono w opracowanie nowych potencjałów do zwijania białek:

1. Meller J, Elber R, *Protein recognition by sequence-to-structure fitness: Bridging efficiency and capacity of threading potentials*. Advances of Chemical Physics (w druku)
2. Meller J, Wagner M, Elber R, *Maximum Feasibility Guideline to the Design and Analysis of Protein Folding Potentials*, Journal of Computational Chemistry (przyjęte)
3. Meller J, Elber R, *Linear Optimization and a Double Statistical Filter for Protein Threading Protocols*, Proteins Structure Fun. Gen. (wystane)

II.5.2. Przewidywanie struktury trzeciorzędowej białek.

Nowe potencjały i algorytmy optymalizacji zostały zaimplementowane w kolejnych wersjach pakietu obliczeniowego Learning, Observing and Outputting Protein Patterns (LOOPP). Służy on do rozpoznawania struktur białkowych (fold recognition) przy wykorzystaniu techniki threading i dopasowania sekwencji (sequence alignment), opracowywania nowych potencjałów przy wykorzystaniu technik optymalizacji liniowej i analizy statystycznej struktur białkowych oraz tworzeniu bibliotek unikalnych fragmentów białek za pomocą porównywania struktura-struktura przy zastosowaniu metod programowania dynamicznego. Potencjały zawierają parametry adaptacyjne a procedura uczenia się uwzględnia istniejące struktury natywne białek i wygenerowane struktury sztuczne, nie istniejące w przyrodzie. Program jest dostępny w postaci serwera sieciowego umożliwiającego automatyczną anotację sekwencji genomicznych.

<http://www.tc.cornell.edu/reports/NIH/resource/CompBiologyTools/looppp/>

Serwer LOOPP bierze udział w ocenie metod automatycznych będąc sklasyfikowanym na jednym z czołowych miejsc w kategorii najtrudniejszych do przewidzenia struktur, Asilomar, USA, 12/2000.

Dzięki zastosowaniu takich metod zidentyfikowano podobieństwa pomiędzy nowo odkrytymi genami, kontrolującymi fenotypowe zróżnicowanie pomidorów (wielkość owoców), a ludzkimi białkami typu Ras p21, których zaburzenia funkcji prowadzą do niekontrolowanego mnożenia się komórek i w rezultacie do chorób nowotworowych. Artykuł na ten temat trafił do 'highlights' prestiżowego pisma *Science*. Jest to pierwszy przykład powiązania pomiędzy genami a ilościowo mierzalnymi cechami organizmu. Dr Meller wygłosił na temat stosowanych przez siebie metod referat na University of California

San Francisco, oraz na Rockefeller University, New York w czasie publicznej prezentacji nowego projektu współpracy pomiędzy Cornell University, Rockefeller University i Sloan Cancer Research Center.

1. Anne Frary, T. Clint Nesbitt, Amy Frary, Silvana Grandillo, Esther van der Knaap, Bin Cong, Jiping Liu, **Jaroslav Meller**, Ron Elber, Kevin B. Alpert, Steven D. Tanksley (2000) *fw2.2: A Quantitative Trait Locus Key to the Evolution of Tomato Fruit Size*. Science 289: 85-88
2. Meller J, Elber R. *Towards large scale, statistically significant, threading experiments. Choice of energies and statistical verifications* (wysłane)
3. Meller J, Elber R. (2000) LOOPP 2000 - Learning, Observing and Outputting Protein Patterns, a public domain package for protein recognition and designing folding potentials, NIH resources at Cornell Theory Center, Ithaca 2000
4. **Meller J**, Critical Assessment of Protein Structure Prediction 4, Asilomar, USA, 12/2000

II.5.3. Opublikowano rozdział na temat dynamiki molekularnej w monumentalnej encyklopedii nauk o życiu.

1. Meller J (2000), Molecular Dynamics. Encyclopedia of Life Sciences, <http://www.els.net> (on-line), ISBN 0-333-72621-9 (print) Nature Publishing Group, 2001 Macmillan Publishers Ltd

II.5.4. Przy współpracy z Katedrą Chemii Syntetycznej Uniwersytetu w Kyoto dokończono pracę nad zastosowaniem metod oddziaływania konfiguracyjnego do opisu stanów wzbudzonych cząsteczek o znaczeniu biologicznym. Dr Meller przebywał tam na stażu na tym uniwersytecie do końca 1998 roku.

1. 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 (wysłana do Journal of American Chemical Society)

III. Kognitywistyka, neuroinformatyka, komputerowe modele procesów poznawczych i filozofia umysłu

Nasze prace w ramach kognitywistyki 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 ostatnich latach w kilku pracach i wystąpieniach konferencyjnych. Matematyczne metody opisu zdarzeń mentalnych wiążą się z teorią układów złożonych w zastosowaniu do sieci neuronowych z rekurencją i innych układów dynamicznych.

W. Duch przewodniczył komitetowi naukowemu pisma „Kognitywistyka i Media w Edukacji”, utworzonego i wydawanego przy współpracy z logicznymi, filozofami i pedagogami z UMK pisma. W 2000 roku ukazał się tom trzeci (około 250 stron) a trzeci i czwarty (numer specjalny, po angielsku) wydane zostały w pierwszej połowie 2001 roku. Oprócz pisma „Kognitywistyka” nadanie tożsamości tej nowej dziedzinie wymagać będzie organizacji konferencji i powołania Towarzystwa Kognitywistycznego, do czego doszło w maju 2001 roku. Prace nad podręcznikiem - wstępem do kognitywistyki, dyskutującym problemy związane z tworzeniem teorii umysłu, począwszy od problemów filozoficznych i modeli historycznych, przez teorie psychologiczne i badania nad mózgiem, do modeli matematycznych, uległy pewnemu spowolnieniu ze względu na brak czasu.

W. Duch kilkakrotnie odwiedził Instytut Biologii Eksperymentalnej PAN na zaproszenie prof. Andrzeja Wróbla, kierownika pracowni badań układu wzrokowego. Oprócz udziału w panelu dyskusyjnym na zakończenie tygodnia mózgu W. Duch wygłosił na VII Wiosennej Szkole Neurobiologii Polskiego Towarzystwa Badań Układu Nerwowego (PTBUN) „Integracyjne mechanizmy kory mózgowej” (maj 2000) referat „Consciousness and the dynamic models of the brain”. Wygłosił również kilka referatów na tematy dotyczące mechanizmów działania mózgu, np. 1.5-godzinny referat „How does the brain work” w Tokyo University, Japonia, oraz podobny referat na konferencjach 5th Conference on Neural Networks and Soft Computing i Intelligent Information Systems IX.

III.1. Modele umysłu oparte na neurobiologii.

Jednym z największych problemów kognitywistyki jest przepaść pomiędzy badaniami nad mózgiem a psychologią. Ponieważ bezpośredni opis neurodynamiki możliwy jest tylko w bardzo prostych sytuacjach eksperymentalnych należy poszukiwać 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.

W 2000 roku dokonano przeglądu prostych modeli sieci z rekurencją w zastosowaniu do modelowania chorób psychicznych i zaburzeń neuropsychologicznych. Modele neuronowe zaburzeń pamięci pozwalają również wyciągać wnioski dotyczące kierunków terapii w chorobie Alzheimera. Takie podejście do chorób psychicznych spotkało się z zainteresowaniem psychiatrów, którzy zaprosili W. Ducha z referatem na spotkanie Pomorsko-Kujawskiego Towarzystwa Psychiatrycznego. Dokonano również przeglądu opartych o sieci neuronowe modeli działania mózgu przydatnych do zrozumienia zagadnień związanych ze świadomością.

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). Nawiązaliśmy kontakty z prof. Johnem R. Taylorem, dyrektorem Center for Neural Networks, King's College w Londynie. Wspólnie z nim dr N. Jankowski napisał projekt badawczy dotyczący modelowania procesów uwagi i porównania rezultatów badań psychologicznych i neurofizjologicznych z symulacjami komputerowymi. Na rozpoczęcie realizacji tego projektu dr Jankowski otrzymał 6-miesięczne stypendium NATO. W. Duch został członkiem IEEE Special Interest Group on Mental Function and Dysfunction.

1. 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. 589-616
2. Duch W (2000) *Świadomość i dynamiczne modele działania mózgu*. Neurologia i Neurochirurgia Polska, Maj 2000, pp. 69-84
3. Duch W, *Therapeutic applications of computer models of brain activity for Alzheimer disease*. J. Medical Informatics and Technologies 5 (2000) 27-34

III.2. Filozofia umysłu i neurofilozofia.

Zrozumienie podstawowych zagadnień dotyczących umysłu wydaje się bardzo istotne z punktu widzenia określenia kierunku i granic rozwoju tej dziedziny. Szczególnie niejasne są zagadnienia związane z naturą wrażeń świadomych i możliwością stworzenia systemów sztucznych doznających takich wrażeń. W latach 90. ukazało się wiele książek dotyczących filozofii umysłu, dyskutujących

zwłaszcza zagadnienie psychofizyczne w jego nowej postaci, znane jako „trudny problem świadomości”. W. Duch wziął udział w kilku konferencjach filozoficznych i psychologicznych, wygłosił szereg referatów na temat filozofii umysłu podkreślając rolę badań nad mózgiem i naturalistyczny punkt widzenia. Został też zaproszony do rady naukowej pisma „The International Journal of Transpersonal Studies” (Panigada Press, Honolulu, USA).

Rozważania na temat tego, jaka teoria umysłu nas w pełni zadowoli i na temat granic rozwoju modeli opartych na obliczeniach wysłane zostały do dwóch pism specjalistycznych. Rozważania te zaliczyć można do wprowadzonego przez Patrycję Churchland nurtu zwanego neurofilozofią, czyli filozofią umysłu zgodną z wiedzą o działaniu mózgu, w odróżnieniu od czysto spekulatywnej, tradycyjnej filozofii umysłu. Przeprowadzono również szczegółową analizę historycznego rozwoju pojęć związanych z umysłem, duszą i duchem pokazując, że niektóre problemy w filozofii umysłu mają swoje źródła w dawno już wygasłych potrzebach zrozumienia ruchu i odróżnienia organizmów żywych od martwych.

W opracowaniu są artykuły, które rozwiązują problem psychofizyczny (zagadnienie stosunku umysłu do ciała), jednakże minie zapewne wiele lat zanim rozwiązanie to zostanie zaakceptowane. Właściwe rozumienie tego zagadnienia otwiera drogę do budowy świadomych artefaktów.

1. Duch W, *Jaka teoria umysłu w pełni nas zadowoli?* Kognitywistyka i Media w Edukacji 3(1) (2000) 29 - 53
2. Duch W, *Debata: Sztuczny mózg, sztuczna inteligencja.* Kognitywistyka i Media w Edukacji 3(1) (2000) 95-98.

Na temat filozofii umysłu wygłoszono szereg referatów na różnych konferencjach, które dostępne są w archiwum Internetowym pod adresem <http://www.phys.uni.torun.pl/~duch/ref.html>

1. Duch W, *Neurophilosophical solution to the hard problem of consciousness.* University of Konstanz, Germany, 20.07.2000
2. Duch W, *Czy można zbudować świadomy komputer?* Inst. Fizyki, IF UMK, 9.03.2000.
3. Duch W, *Koncepcja duszy i umysłu w świetle neurobiologii.* Seminarium kognitywne, UMK, 2.03.2000, <http://www.phys.uni.torun.pl/~duch/ref.html>
3. Duch W, *Neurofilozoficzne rozwiązanie trudnego problemu świadomości.* Polskie Towarzystwo Filozoficzne, Poznań 5.02.2001
4. Duch W, *Czy umysł może zrozumieć sam siebie? Uwagi o percepcji muzyki.* Toruń 20.05.2000

III.3. Prace nad popularyzacją kognitywistyki.

W 2000 roku oprócz wydawania pisma „Kognitywistyka i media w edukacji” opracowano i udostępniono w Internecie notatki do wykładu będącego wstępem do kognitywistyki. Pierwszy semestr obejmował zagadnienia dotyczące filozofii umysłu widzianej z obecnej perspektywy, a drugi głównie zagadnień budowy i sposobu działania mózgu. Materiały znajdują się pod adresem

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

Udostępniono również wiele tekstów referatów wygłoszonych na konferencjach i na zaproszenie ośrodków polskich i zagranicznych. Można je znaleźć pod adresem:

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

Spekulacje na temat rozwoju technologii i społeczeństwa w dłuższej perspektywie, umieszczone na tej stronie, spotkały się z dużym oddźwiękiem i doprowadziły do pewnych opracowań o charakterze futurologicznym w 2001 roku.

IV. Badania w zakresie dydaktyki wspomaganej metodami komputerowymi

Badania w zakresie komputerowego wspomaganie edukacji kontynuowane są przez pracujących w Katedrze Metod Komputerowych wykładowców i profesorów.

IV.1. W ramach eksperymentów z nauczaniem na odległość udostępniłmy wiele stron Internetowych z notatkami do kilku wykładów, np.

Duch W, Wykłady wstępne o komputerach i oprogramowaniu, Studium Podyplomowe Programowania i Zastosowań Komputerów, UMK.
<http://www.phys.uni.torun.pl/~duch/Wyklady/index.htm>

IV.2. Dokonałmy przeglądu specjalistycznych serwisów usługowych WWW pomagających wyszukiwać informacje bibliograficzne, prace, programy, indeksować bazy danych. Są to programy działające na dużą skalę, indeksujące setki tysięcy dokumentów. Chociaż skupiliśmy się nad zagadnieniami związanymi z sieciami neuronowymi i uczeniem maszyn podobne programy powinny wkrótce powstać i dla innych gałęzi nauki.

Duch W, *Publikacje naukowe o sieciach neuronowych w Internecie*. EBIB, Elektroniczny Biuletyn Informacyjny Bibliotekarzy 1 (2001) 19

IV.3. Bierzymy udział zarówno w restrukturyzacji programów nauczania w zakresie specjalizacji komputerowych i przedmiotów o charakterze informatycznym na Wydziale Fizyki i Astronomii UMK. Realizowany jest autorski program kształcenia komputerowego na latach 1-3 dla studentów fizyki i astronomii, którego głównym autorem jest J. Wasilewski. Przeprowadzono zasadniczą reformę programu kształcenia dla specjalności (podstawowej lub dodatkowej) fizyka komputerowa, która realizowana jest od roku akademickiego 1998/9, i kilku innych programów. Prowadzono rozważania nad dalszą reformą edukacji w obliczu zmian w sposobie wykorzystania komputerów.

Publikacja:

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

IV.4. Pomagamy w tworzeniu nowych programów nauczania, np. w zakresie kształcenia lekarzy z naszego regionu w używaniu komputerów i Internetu. Prof. Duch jest od 1998 roku koordynatorem projektu MedUni dotyczącego tego tematu. Projekt został zakończony w połowie 2000 roku. Dopuszczaliśmy do powstania nowego kierunku studiów w zakresie „technologii informatycznych” oraz do zmiany nazwy Wydziału na „Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej”, sankcjonującej nasz kierunek rozwoju.

IV.5. Utrzymujemy i rozszerzamy strony WWW dotyczące wszystkich spraw związanych z komputerami, fizyką komputerową, sieciami neuronowymi, sztuczną inteligencją, kognitywistyką, badaniami nad mózgiem. Ze stron tych korzysta bardzo wiele osób.

Sieci neuronowe, badania nad mózgiem i statystyka:

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

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

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

Sztuczna inteligencja i uczenie maszynowe,

<http://www.phys.uni.torun.pl/~duch/ai-ml.html>

Oprogramowanie i bazy danych do testów metod inteligencji obliczeniowej
<http://www.phys.uni.torun.pl/~duch/software.html>

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

IV.6. Utrzymujemy również strony WWW dotyczące zagadnień związanych z komputerami i oprogramowaniem. Dziedzina ta, zwana w krajach anglojęzycznych „*information science*”, nie wyodrębniła się jeszcze w Polsce.

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

INFORMACJA

o działalności naukowej i zatrudnieniu w jednostce w I półroczu roku
złożenia wniosku wg. stanu na dzień 30 czerwca 2001

I. Działalność naukowa

1. liczba publikacji:

oryginalne	monograficzne	przeglądowe	ogółem
35	1	0	59

2. liczba publikacji w recenzowanych czasopismach i wydawnictwach o zasięgu światowym 12

3. konferencje:

- 1) liczba pracowników jednostki uczestniczących w konferencjach naukowych: ogółem 26, w tym z referatami 21, przewodniczących sesjom 8
- 2) liczba pracowników jednostki uczestniczących w konferencjach naukowych międzynarodowych: ogółem 21, w tym z referatami 19, przewodniczących sesjom 8
- 3) liczba konferencji zorganizowanych przez jednostkę:

krajowe	0	międzynarodowe	0
---------	---	----------------	---

4. seminaria w ośrodkach zamiejscowych:

liczba referatów wygłoszonych na zaproszenie
ogółem 14
w tym seminaria międzynarodowe 7
w tym seminaria w ośrodkach zagranicznych 7

II. Zatrudnienie (łącznie z uczestnikami Studium Doktoranckiego Fizyki i Chemii)

1. Liczba pracowników ogółem w przeliczeniu na pełne etaty: 8.5 etatów + 3 doktorantów
w tym: z tytułem prof. 1, ze stopniem dr hab. 1, dr 2
2. Liczba pracowników z tytułem profesora i stopniem naukowym dr hab.
zatrudnionych w niepełnym wymiarze czasu pracy: 0
3. adiunktów 2 w tym ze stopniem doktora 0
4. asystentów 2, osób pobierających stypendia doktoranckie 3
osób mających otwarte przewody doktorskie 2
5. pracowników inżynieryjno-technicznych 0
6. bibliotekarzy, archiwistów 0
7. pracowników administracyjnych 0
8. Innych pracowników: 2.5, w tym
1 starszy wykładowca (dr matematyki),
1 wykładowca (mgr fizyki),
½ wykładowca (mgr inż. elektroniki)

Jedna osoba (adiunkt) w 2000 roku była na urlopie bezpłatnym.

Data

Kierownik jednostki

1 sierpnia 2001

/podpis i pieczęć/

Nie prowadzimy wymiany w oparciu o podpisane umowy, tylko o długoletnią współpracę nieformalną z krajami Unii Europejskiej, Izraelem, Japonią i USA.

Projekt „Knowledge Exploration in Science and Technology”, wysłany w 1999 roku, współpraca w ramach programu COST Unii Europejskiej, zatwierdzony w 2001 roku:

Austria	Austrian Research Institute for Artificial Intelligence, Vienna
Estonia	Department of Chemistry, University of Tartu, Tartu
Finlandia	Department of Computer Science, University of Helsinki, Helsinki
Francja	Acknosoft, Paris; Observatoire Astronomique de Strasbourg, Strasbourg; Département Electronique et Traitement de l'Information, Ecole Supérieure de Chimie Physique Electronique (CPE) de Lyon, Lyon; Laboratoire Lorrain de Recherche en Informatique et ses Applications, Vandoeuvre-Les-Nancy Action AID, The French National Institute for Research in Computer Science and Control (INRIA), Sophia Antipolis
Niemcy	European Southern Observatory (ESO) Science Archive Group, ESO Headquarters, Garching; Space Telescope European Coordinating Facility, European Southern Observatory (ESO) Headquarters, Garching; Fraunhofer-Einrichtung für Experimentelles Software Engineering, Kaiserslautern; Max-Planck-Institut für Astrophysik, Garching; Institut für Pharmazeutische Chemie, Phillips-Universität Marburg, Marburg; Artificial Intelligence Research Division, German National Research Center for Information Technology (GMD), Sankt Augustin
Irlandia	Department of Computer Science, University College Dublin, Dublin
Włochy	Laboratory of Environmental Pharmacology and Toxicology, Istituto di Ricerche Farmacologiche "M Negri", Milano; Dipartimento di Elettronica e Informazione, Politecnico di Milano, Milano; Dipartimento di Informatica e Sistemistica, Università di Roma "La Sapienza", Roma
Norwegia	Department of Informatics, Norwegian University of Science and Technology, Trondheim
Hiszpania	Institut d'Investigació en Intelligència Artificial, Spanish Scientific Research Council CSIC, Bellaterra, Catalonia
W. Brytania	Faculty of Informatics, University of Ulster, Newtownabbey, Northern Ireland; Department of Computer Science, Queen's University of Belfast, Belfast, Northern Ireland; Department of Computer Science, University of York, York; Computer Based Learning Unit, The University of Leeds, Leeds

kraj:	RFN, okres trwania umowy: od 1979
nazwa placówki:	Uniwersytet w Bochum, Wydział Chemii (prof. dr V. Staemmler)
tematyka:	zagadnienia struktury energetycznej atomów i cząsteczek w stanach otwartopowłokowych, w tym teoretyczny opis stanów lokalnych i procesów adsorpcji na powierzchniach kryształów jonowych.
Inne:	wieloletnia współpraca nieformalna, staże naszych pracowników

kraj: RFN, okres trwania umowy: od 1984
nazwa placówki: Instytut Astrofizyki Maxa Plancka w Garching k. Monachium
tematyka: rozwój i zastosowania metody SGGA-CI i innych metod obliczeniowych fizyki molekularnej; systemy ekspertowe w fizyce molekularnej.
Inne: Wspólne rozwijanie dużych systemów programów komputerowych, nieformalna długoletnia umowa, wspólni doktoranci i magistranci.

Ostatnio współpracujemy w ramach projektu „*Similarity-based reasoning systems with applications in science and medicine*”, IBMBF (Internationale Büro (IB) das Bundesministerium für Bildung und Forschung)-KBN POL-040-98 na lata 1999-2001

kraj: USA, okres trwania umowy: 1999
nazwa placówki: Cornell University,
Department of Computer Science
tematyka: bioinformatyka, nauki o życiu, genomika i proteonomika
Inne: 2.5 roczny staż dr J. Mellerera

kraj: Japonia, okres trwania umowy: 2000
nazwa placówki: Meiji University,
Department of Computer Science
tematyka: metody inteligencji obliczeniowej
Inne: visiting professor, W. Duch, kwiecień 2000

Jesteśmy w trakcie podpisywania umowy z Kysuhu Institute of Technology, Kitakysuhu, Japonia.