

C. INFORMACJA O GŁÓWNYCH KIERUNKACH PRAC JEDNOSTKI

0. Główne kierunki badań naukowych i prac rozwojowych objęte co najmniej trzyletnim programem badań, w tym wiążące się z rządowymi programami gospodarczymi lub społecznymi albo międzynarodowymi programami współpracy naukowej i naukowo-technicznej.

Katedra Informatyki Stosowanej (poprzednio Katedra Metod Komputerowych) jest jednostką naukowo-dydaktyczną Uniwersytetu Mikołaja Kopernika podejmującą **interdyscyplinarne** programy badawcze w dziedzinach, które wykorzystują wyrafinowane metody informatyczne. Organizujemy specjalistyczne wykłady i seminaria dotyczące zastosowań informatyki w naukach ścisłych (fizyce i chemii), naukach o życiu (biologia, medycyna), naukach technicznych 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 metody informatyki 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 złożeńiach jak bioinformatics, neuroinformatics, medical informatics czy chemical informatics; w terminologii polskiej najbardziej odpowiednim terminem wydaje się „informatyka stosowana”. Jesteśmy więc jednostką zorientowaną na problemy, a nie rozwój określonego działu nauki.

Problematyka badawcza KIS skoncentrowana jest wokół kilku głównych tematów:

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

Profil naszej jednostki w klasyfikacji KBN najbliższy jest sekcji T11F (metody komputerowe w nauce) oraz T11C (informatyka stosowana).

W 2001 roku rozwijaliśmy następujące tematy:

I. **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 (zakończone w 2001 roku) na badania dotyczące zastosowań systemu nerorozmytego 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 czy też wyjaśnienia struktury danych, wykraczające poza analizy statystyczne. Zajmowaliśmy się przede wszystkim metodami ekstrakcji reguł logicznych z danych treningowych za pomocą drzew decyzji i sieci neuronowych. Prace te zostały rozszerzone na stronę innych metod rozumienia danych, metod opartych na wizualizacji i analizie prototypów. Stosujemy w tym celu kilka różnych podejść opisanych dokładniej poniżej. Najnowsze podejście oparte na analizie prototypów prowadzi do reguł bardziej ogólnych niż reguły logiki rozmytej, chociaż nie udało się tego na razie udowodnić w ogólnym przypadku. Badanie powiązań pomiędzy metodami opartymi na podobieństwie a metodami logiki rozmytej, oraz rola kontekstu w definiowaniu zmiennych lingwistycznych używanych w regułach, wydają się być bardzo obiecujące.

Wyniki prac nad wyjaśnianiem struktury danych prezentowane były w licznych pracach napisanych zarówno do najlepszych pism w dziedzinie inteligencji obliczeniowej jak i rozdziałów do książek. Wyniki prezentowane były w czasie tutoriali na najważniejszych konferencjach naukowych: 2 i 4-godzinne tutorialie przedstawiono na dwóch najbardziej prestiżowych konferencjach międzynarodowych dotyczących sieci neuronowych (International Conference on Artificial Neural Networks w Wiedniu, International Joint Conference on Neural Networks w Waszyngtonie). O poziomie tych tutoriali świadczyć może fakt zaproszenia do ich wygłaszania od kilku lat na obydwu tych konferencjach, oraz zaproszenie do wykładania na międzynarodowych szkołach w tej dziedzinie. W. Duch został zaproszony do napisania artykułu dla *Proceedings of IEEE*, najbardziej prestiżowego pisma IEEE.

Kontynuowano prace nad ontogenicznymi sieciami neuronowymi i innymi algorytmami budowy i adaptacji sieci neuronowych. N. Jankowski napisał na ten temat monografię, która została złożona do druku w 2002 roku. Zorganizowano sesję specjalną na temat systemów heterogenicznych (na European Symposium on Artificial Neural Networks, w Brugge, Belgia). Heterogeniczne modele neuronowe tworzą końcowe rozwiązanie z różnych elementów – wszystkie dotychczasowe modele oparte są na powielaniu elementów tego samego typu. W efekcie końcowy model ma szansę odkryć najprostsze struktury w danych. Przeprowadzono eksperymenty z wyborem różnych funkcji transferu w czasie dodawania nowych węzłów do sieci. W połowie 2001 roku ukończona została praca doktorska R. Adamczaka, w ramach której zbudowano neurorozmytą sieć ontogeniczną i wykonano eksperymenty z różnymi funkcjami transferu, tworząc model heterogeniczny. Ideę systemów heterogenicznych rozszerzono na systemy oparte na podobieństwie i drzewa decyzji.

Ponieważ liczba rozważanych przez nas modeli uczących się jest duża pracowaliśmy nad integracją różnych metod uczenia maszynowego i sieci neuronowych w oparciu o ocenę podobieństwa przypadków referencyjnych (precedensów). Z jednej strony rozwinięto dalej teorię takiego podejścia, wskazując na jej możliwe zastosowania do zagadnień klasyfikacji złożonych struktur i powiązania z algorytmami szukania rozwiązań w sztucznej inteligencji. Ocena podobieństwa struktur złożonych może być w prostych przypadkach wykonana za pomocą algorytmów programowania dynamicznego. Tego typu metody będą bardzo przydatne w wielu dziedzinach, od bioinformatyki do ekonomii. Jest to temat pracy doktorskiej mgr M. Marczaka. Z drugiej strony rozwinięto znacznie komputerowe oprogramowanie realizujące wiele wersji metod opartych na podobieństwie. W przestrzeni modeli o wzrastającym stopniu złożoności, które można wygenerować w ramach tego schematu, automatycznie poszukiwany jest najlepszy model ze względu na dokładność i jego prostotę. Jest to przykład metauczenia.

W ramach badań nad alternatywnymi metodami uczenia stosowano modne obecnie algorytmy rojowe (particle swarm optimization) w uczeniu sieci MLP (przy współpracy z Swinburne University of Technology w Melbourne, Australia, gdzie ukończono na początku 2002 roku pracę doktorską na ten temat; jej recenzentem był W. Duch). 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). Jest to temat intensywnie obecnie rozwijany przez mgr M. Kordosa, nowego doktoranta.

Zagadnienia bioinformatyczne charakteryzują się często wielką liczbą cech, z których należy wybrać cechy istotne dla opisu danego problemu. Rozpoczęliśmy (przy współpracy z dr J. Biesiadą z Politechniki Śląskiej) testy wielu metod opartych na teorii informacji i alternatywnych indeksach oceny jakości cech. Rezultatem jest zestaw programów realizujących liczne znane metody, oraz rozwój kilku nowych, bardzo obiecujących metod, które będziemy szeroko wykorzystywać do analizy danych bioinformatycznych. Opracowano również (dr N. Jankowski) nową metodę skalowania cech dla metod

opartych na podobieństwie. Badano również metody transformacji cech symbolicznych na przykładzie ciągów DNA (problem szukania SNP i promotorów).

Rozwijano nadal metody interaktywnej wizualizacji wielowymiarowych danych korzystając z procedur minimalizacji miar zgodności topograficznej przestrzeni danych i niskowymiarowych przestrzeni docelowych, czyli skalowania wielowymiarowego. Dla dużych zbiorów danych połączono ją z procedurami klasteryzacji, pozwalającymi na odwzorowanie globalne położenia klastrow, oraz procedurą względnego mapowania, pozwalającą na szybkie umiejscowienie nowych przypadków w otoczeniu przypadków znanych. 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 i obroniono ją we wrześniu na AGH (A. Naud). Wymyślono niezwykle interesujące połączenie metod hierarchicznej klasteryzacji ze skalowaniem wielowymiarowym, ale metoda ta nie została jeszcze zaprogramowana.

Najwięcej wysiłku poświęcono na budowę nowego systemu do dogłębnej analizy danych, nazwanego GhostMiner. System ten zawiera nowatorskie rozwiązania informatyczne zarówno w zakresie metod inteligencji obliczeniowej (modele sieci neuronowych IncNet, systemu neurorozmytego FSM, drzewa SSV, metody ważonych najbliższych sąsiadów i wizualizacja za pomocą skalowania wielowymiarowego), jak i inżynierii oprogramowania (drzewo projektów, na którym umieszczane są modele i procedury testowania). System ten powstaje przy współpracy z firmą FQS z Krakowa (oddział firmy Fujitsu), która zamierza w połowie 2002 roku prowadzić szeroko zakrojone działania marketingowe. Współpracowaliśmy też z firmą Kopernik.pl z Torunia, która stworzyła wortal zajmujący się nowymi technologiami internetowo-telekomunikacyjnymi.

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. Nawiązaliśmy w tej dziedzinie współpracę z Department of Pediatric Informatics, Children's Hospital Medical Center w Cincinnati, Ohio, USA. Dr J. Meller (adiunkt KIS) pracuje tam obecnie jako asisstant professor, a dr Rafał Adamczak jako research associate. Napisałiśmy wspólnie grant do National Institute of Health (NIH) dotyczący metod semantycznego szukania informacji w medycznych bazach danych, w 2002 roku pojedzie tam na dłuższy staż nasz doktorant, trwa procedura powołania prof. W. Ducha na stanowisko adjunct professor.

Firma Bayer Diagnostics (z centrum pod Nowym Jorkiem), zajmująca się produkcją różnorodnej aparatury do testów medycznych, poprosiła prof. W. Ducha o zorganizowanie sesji na temat zastosowania sieci neuronowych do wspomaganie danych medycznych. Sesja odbyła się w kwietniu 2002 roku na dorocznym zjeździe pracowników laboratoriów tej firmy w Berlinie. Planujemy zaangażowanie się w bardziej ścisłą współpracę z tą firmą w zakresie wspomaganie diagnoz oraz analizy danych hematologicznych w ramach VI programu ramowego UE, do którego zaprosili nas hematolodzy z Uniwersyte- tu w Rzymie.

W. Duch jest członkiem wielu komitetów naukowych i bierze regularnie udział w kilku największych konferencjach dotyczących inteligencji obliczeniowej (World Congress on Computational Intelligence, International Conference On Neural Information Processing, International Joint Conference on Neural Networks, International Conference on Artificial Neural Networks, European Symposium on Artificial Neural Networks, Engineering Applications of Neural Networks i innych), będąc zwykle jedynym lub jednym z nielicznych przedstawicielem naszego kraju na tym forum. Jest też od 2001 roku członkiem zarządu European Neural Network Society (ENNS), został poproszony do kandydowania na członka zarządu w International Neural Networks Society, jest członkiem redakcji IEEE Transactions on Neural Networks.

Temat ten rozwijany jest obecnie przy współpracy z kilkoma ośrodkami zagranicznymi:
Department of Computer Science, Meiji University, Tokyo, prof. T. Takagi i Y. Hayashi;
Department of Computer Science, National University of Singapore, prof. R. Setiono;
Department of Computer Science, Univ. of Louisville, Kentucky, USA, prof. Jackiem Żuradą;
Department of Life Sciences, Kyushu Institute of Technology, prof. M. Ishikawa;
Department of Pediatric Informatics, Cincinnati, Ohio, prof. John Pestian;
Max Planck Inst. of Astrophysics, Garching (Monachium), prof. G.H.D. Diercksen;

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.

II. Symulacje komputerowe i metody bioinformatyki w fizyce, chemii, biologii i naukach o życiu.

Prof. J. Wasilewski z współpracownikami prowadził badania nad strukturą energetyczną 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 bioinformatyki, w szczególności symulacji struktury białek, przewidywania struktur i funkcji białek, związania się białek, metod dopasowania sekwencji w biologii molekularnej, proteomice i genomice, oraz metodami rozpoznawania wzorców w zastosowaniu do danych reumatologicznych. Badania wykonywał w przy współpracy z ośrodkami zagranicznymi przebywając przez połowę 2001 roku w Computer Science Department, Cornell University, a następnie w Children's Medical Research Foundation w Cincinnati.

Przy współpracy z prof. Diercksem z Instytutu Astrofizyki Maxa Plancka (MPA) w Garching koło Monachium kontynuowano interdyscyplinarny projekt finansowany w 2001 roku w oparciu o umowę dwustronną pomiędzy Niemcami a Polską (IBMF-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 KIS jest kierownikiem tego projektu po stronie polskiej.

Z powodów formalnych (zgłoszenie nie dotarło w terminie do Brukseli) nie włączono się w zatwierdzony obecnie projekt COST, *Knowledge Exploration in Science and Technology*, chociaż prof. Duch zaangażowany był w jego tworzenie. Projekt dotyczy on zastosowania metod inteligencji obliczeniowej do odkrywania wiedzy w astronomicznych, fizycznych i chemicznych bazach danych. Przy współpracy z ekspertami z National Institute of Cancer, Heidelberg, Max Planck Institute for Astrophysics, Monachium, Computer Science Department, Univ. of Ulster (Irlandia), oraz Univ. of Tartu, Estonia, wystąpiliśmy o grant w ramach programu Future Emerging Technologies Unii Europejskiej, na badania procesów twórczych w sztucznych systemach. Grant nie został w obecnej postaci zatwierdzony i będzie jeszcze raz składany po poprawkach.

W. Duch został wiceprzewodniczącym sekcji Fizyki Komputerowej Komitetu Fizyki PAN (luty 2001).

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.

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

Kognitywistyka (nauki o poznaniu) budzi w Polsce coraz większe zainteresowanie, powoli rozwijając się w odrębną dyscyplinę badawczą. W maju 2001 roku na konferencji "Technologia informacyjna w zmieniającej się edukacji" rozpoczęliśmy proces tworzenia Polskiego Towarzystwa kognitywistyczne-

go (prof. Duch jest jedną z 3 osób zaangażowanych w proces rejestracji tego towarzystwa). We wrześniu 2002 roku planujemy zorganizowanie pierwszej krajowej konferencji Towarzystwa. Przy współpracy z logicznymi, filozofami, biologami, lingwistami i pedagogami liczymy na powołanie Centrum Kognitywistyki na UMK już w 2002 roku. 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.

W celu integracji środowiska osób interesujących się tą dziedziną w Polsce wydajemy 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. Otrzymaliśmy bardzo dobre recenzje z pierwszych lat działalności naszego pisma napisane przez wybitnych specjalistów z filozofii, biocybernetyki, pedagogiki, psychologii i neurobiologii.

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 korelacją 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. W 2001 roku W. Duch wygłosił na ten temat zaproszone referaty na 5 Congress of the Polish Neuroscience Society, oraz na zjeździe Polskiego Towarzystwa Fizycznego.

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). Utrzymujemy kontakty z Instytutem Biologii Eksperymentalnej im. M. Nenckiego w Warszawie. Na zaproszenie doc S. Kasickiego z tego Instytutu W. Duch napisał artykuł do Encyklopedii Multimedialnej PWN „Psychika a świadomość”. Kontynuujemy współpracę z Instytutem Neuropsychologii Maxa Plancka w Lipsku. Napisał też recenzję pracy habilitacyjnej z biocybernetyki dr Michała Żochowskiego (dla Rady Naukowej Instytutu Biocybernetyki i Inżynierii Biomedycznej PAN).

Dr N. Jankowski otrzymał stypendium NATO na 6 miesięcy oraz stypendium Marie Curie z V Programu Ramowego 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. Niestety wysokie koszty życia w Londynie spowodowały jego rezygnację z obydwu stypendiów już po niecałych 2 miesiącach. Projekt ten kontynuowany jest na razie w skromnym zakresie dzięki współpracy przez Internet.

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.

IV. Dydaktyka wspomagana metodami komputerowymi.

Badania w tym zakresie prowadzone są przez zatrudnionych w naszej Katedrze wykładowców i profesorów. Bierzymy 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.

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.

0. Informacja o zawartych i realizowanych przez jednostkę umowach dotyczących wykonywania zadań badawczych wspólnie z podmiotami krajowymi lub zagranicznymi, w tym zadań w ramach programów ramowych Unii Europejskiej.

Nie prowadzimy badań w oparciu o takie umowy.

0. Informacja o umowach zawartych z innymi podmiotami o stałe lub wieloletnie świadczenie na ich rzecz badań naukowych i prac rozwojowych lub usług naukowych.

Nie prowadzimy badań w oparciu o takie umowy.

D. INFORMACJA ROCZNA O MERYTORYCZNYCH I FINANSOWYCH WYNIKACH DZIAŁALNOŚCI STATUTOWEJ JEDNOSTKI W ROKU POPRZEDZAJĄCYM ROK ZŁOŻENIA WNIOSKU

- 0. Syntetyczny opis merytoryczny zrealizowanych zadań wg planu zadaniowo-finansowego, w tym:**
- 0) wykonanych badań naukowych i prac rozwojowych,**
 - 0) najważniejszych osiągnięć poznawczych,**
 - 0) najważniejszych zastosowań praktycznych, w tym opracowanych nowych: technologii, materiałów, wyrobów,**
 - 0) wdrożeń dokonanych poza jednostką,**

Opis merytoryczny realizowanych prac w 2002 roku

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 za pomocą metod inteligencji obliczeniowej.

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

- Opublikowaliśmy bardzo obszerną pracę na temat rozwijanych przez nas algorytmów; spotkała się ona z dużym uznaniem, czego wyrazem była propozycja napisania artykułu do Proceedings of IEEE, najbardziej prestiżowego pisma IEEE (współautorami mają być R. Setiono, Singapore i J. Żurada, Louisville).

- Ulepszono metody ekstrakcji reguł oparte na kryterium separowalności (SSV), prowadzące do sprawnego algorytmu typu drzewa decyzyjnego. Jest to część praca doktorskiej Krzysztofa Grąbczewskiego, która powinna zostać zakończona w 2002 roku.
- Rozwinęliśmy znacznie metody oparte na szukaniu charakterystycznych prototypów, wykorzystujące nowe miary podobieństwa. Pozwala to na wprowadzenie nowego rodzaju reguł opartych na podobieństwie do prototypów. Są to reguły bardziej ogólne niż te, które można otrzymać za pomocą reguł rozmytych. W szczególności różne funkcje odległości dają się wyrazić przez funkcje przynależności logiki rozmytej, ale niektóre z tych funkcji, np. probabilistycznie określone miary odległości, prowadzą do zupełnie nowych funkcji przynależności a inne nie dają się wcale wyrazić w języku logiki rozmytej.
- Kontynuowano współpracę z firmą FQS Poland (Fujitsu Group) zainteresowaną stworzeniem nowego systemu do dogłębnej analizy danych (data mining), opartego na naszych algorytmach. System ten jest już w pierwszej wersji na ukończeniu. Pozwoli nam to na łatwiejsze porównywanie i integrację przyszłych algorytmów, ułatwiając korzystanie z poszczególnych, rozwijanych dotychczas niezależnie programów.
- W. Duch wygłosił szereg tutoriali na najpoważniejszych konferencjach w tej dziedzinie, np. "Extraction of knowledge from data using computational intelligence methods" (2 g.) na International Joint Conference on Neural Networks, 14-19.07.2001, Washington D.C., i na International Conference on Artificial Neural Networks (ICANN), Vienna, 21-25.08.2001.
- 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 został zintegrowany z innymi w systemie GhostMiner.
- Rozwijano nową wersję programu realizującego metodę MLP2LN 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. Poprzednio do eksperymentów komputerowych wykorzystywaliśmy zmodyfikowany symulator sieci neuronowych SNNS.
- Pracowano nad zastosowaniem metod nieużywających gradientów do uczenia sieci neuronowych. Metody takie powinny być szczególnie przydatne w poszukiwaniu ostrych reguł logicznych, gdy obszar nierozwiniętych gradientów kurczy się do zera i sieci z wsteczną propagacją błędów nie uczą się. Testowaliśmy i rozwijaliśmy metody generacji reguł oparte na zastosowaniu algorytmów szukania wiązką lub szukania typu „pierwszy najlepszy” dyskretnych wektorów parametrów opisujących sieć neuronową. Prace te ulegną w 2002 znacznemu przyspieszeniu ze względu na zaangażowanie nowego doktoranta w ten temat.
- Do szukania reguł logicznych używaliśmy opracowane przez nas 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 metodą „najpierw najlepszy węzeł” lub bardziej kosztowną metodą uwzględniającą szukanie wiązką, ulepszono algorytmy upraszczania drzewa poprawiającego generalizację w oparciu o wyniki krosvalidacji. Program SSV zintegrowano z systemem GhostMiner dodając wizualizację. Zastosowano go do generowania reguł logicznych otrzymując dla kilku baz danych najprostsze i najdokładniejsze ze znanych reguł.
- Ekstrakcja reguł jest jedynie pierwszym krokiem w tworzeniu systemów wspomagania decyzji. Rozwinęto 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. Założenie o gaussowskim rozkładzie błędu pomiarowego prezentowanych wektorów treningowych pozwala na użycie gradientowych metod optymalizacji dla bardzo

dużej liczby parametrów opisujących zmienne lingwistyczne w zestawach reguł. Pracujemy nad uwzględnieniem wszystkich aspektów przy optymalizacji końcowych reguł wykorzystując krzywe ROC (Receiver Operator Curves).

- Opracowano nowe podejście do rozumienia struktury danych, oparte na regułach oceniających podobieństwo do prototypów. 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 podobieństwie. Ponieważ te ostatnie nie były dotychczas używane do generacji reguł logicznych opracowaliśmy metodę wybierania najlepszych prototypów wykorzystującą algorytm najbliższego sąsiada. Można go 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. 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.
- Dokonałmy przeglądu systemów data mining (w ramach pracy licencjackiej).

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

Publikacje związane z tym tematem:

0. 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
0. Duch W, Adamczak R, Grąbczewski K, Grudziński K, Jankowski N, Naud N, *Extraction of Knowledge from Data using Computational Intelligence Methods*. In: International Conference on Artificial Neural Networks (ICANN), Vienna, 21-25.08.2001 (tutorial, 63 str).
0. Duch W, Grąbczewski K, Adamczak R, Grudziński K, Hippe Z.S. *Rules for melanoma skin cancer diagnosis*. Komputerowe Systemy Rozpoznawania, KOSYR, Wrocław 2001, pp. 59-68
0. Duch W, Grudziński K. *Prototype based rules - new way to understand the data*. Int. Joint Conference on Neural Networks, Washington D.C. 14-18.07. 2001, pp. 1858-1863
0. 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

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.

1.2. Rozwój i zastosowania systemów neurorozmytych.

Rozwijany przez nas od kilku lat 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 punktu widzenia, jako sieć neuronową, system logiki rozmytej korzystający z zależnych od kontekstu funkcji przynależności, system oparty na podo-

bieństwie (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.

Inspiracją do stworzenia tego modelu były poszukiwania empirycznej teorii umysłu dającej odpowiedzi na szczególne 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. Dotychczas zrealizowano tylko niewielką część pierwotnych założeń modelu, głównie w aspekcie zastosowań do ekstrakcji reguł i klasyfikacji. Na realizację czeka zastosowanie tego modelu do zagadnień heteroasocjacji, aproksymacji, dopełniania wzorców, uzupełniania wartości brakujących i jako heurystyki w procesach szukania.

Kontynuowano prace nad ulepszaniem modelu FSM. W szczególności:

- Przystosowano oprogramowanie systemu FSM do wymogów opracowanego w naszej grupie pakietu programów GhostMiner, służącego do dogłębnej analizy danych. Wymagało to opracowania odpowiedniej struktury klas w języku C++ i interfejsów do dostępnych funkcji pakietu GhostMiner, np. dotyczących tworzenia komitetów sieci czy sposobów testowania.
- Rozwinięto też oprogramowanie w języku C++ realizujące model FSM działające pod kontrolą systemów Unixowych (Solaris, Linux) wprowadzając liczne udoskonalenia. Pomimo dużych możliwości system neurorozmyty FSM można zastosować bez manipulacji parametrami do prawie każdej bazy danych osiągając dobre wyniki.
- Przeprowadzono eksperymenty numeryczne przy użyciu mieszanych funkcji transferu w modelu FSM.
- Mgr. R. Adamczak ukończył i obronił (czerwiec 2001) pracę doktorską, której tematem było zastosowanie modelu FSM do analizy danych doświadczalnych.
- Od października 2001 dr Adamczak rozpoczął pracę nad zastosowaniami metod inteligencji obliczeniowej w zagadnieniach bioinformatyki jako stażysta podoktorancki w Children's Hospital Research Foundation, Cincinnati, USA. Program FSM wykorzystywany jest obecnie przez niego do zagadnień estymacji gęstości rozkładów prawdopodobieństw.

Ostatnie publikacje związane z tematem to:

0. 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
0. Duch W, Grąbczewski K, Adamczak R, Grudziński K, Hippe Z.S. Rules for melanoma skin cancer diagnosis. Komputerowe Systemy Rozpoznawania, KOSYR, Wrocław 2001, pp. 59-68
0. 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
0. R. Adamczak, *Zastosowanie sieci neuronowych do klasyfikacji danych doświadczalnych*. Praca doktorska, KMK UMK, Toruń 2001.

I.3. Ontogeniczne i heterogeniczne sieci neuronowe.

Sieci ontogeniczne dopasowują swoją złożoność do danych pozwalając na znalezienie nieobciążonych modeli klasyfikatorów o minimalnej wariancji. Systemy heterogeniczne używają różnych elementów w celu odkrycia najprostszyc struktur w danych. Naszym celem jest połączenie możliwości tych dwóch rodzajów sieci w celu stworzenia modeli działających automatycznie, bez konieczności doboru architektury sieci, tworzących modele o minimalnej złożoności.

Rozwijane przez nas modele systemu neurorozmytego FSM i sieci neuronowej IncNet można rozszerzyć w kierunku sieci heterogenicznych. Model FSM dodaje i usuwa nowe jednostki w miarę potrzeb, korzystając z ocen statystycznej przydatności. Sieć typu IncNet dodaje, usuwa i łączy neurony używając różnych funkcji transferu. Sieć ta używa zarówno pełnej jak i uproszczonej (szybkiej) wersji ucze-

nia sieci opartej na filtrze Kalmana. Dla obu typów sieci, FSM i IncNet, możliwe jest obracanie granic decyzji w wielowymiarowych przestrzeniach cech.

W ramach prac nad tymi zagadnieniami:

- Udoskonaliliśmy naszą taksonomię funkcji 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.
- Pokazaliśmy, że w odpowiednio dobrane funkcje transferu pozwalają na redukcję złożoności sieci z $O(N^2)$ do $O(N)$ parametrów dla N -wymiarowych danych.
- 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, na której przedstawiliśmy 3 referaty.
- Ideę heterogenicznych sieci neuronowych wykorzystujących funkcje transferu różnego typu rozwinęliśmy szerzej opisując heterogeniczne drzewa decyzji i systemy oparte na podobieństwie. Przeprowadzono wstępne testy dla heterogenicznych drzew decyzji osiągając bardzo obiecujące wyniki. Jest tu nadal dużo wyzwań i otwartych problemów, niemniej wstępne wyniki są bardzo zachęcające.
- Opracowano wersję sieci FSM optymalizującą funkcje transferu po dodaniu kolejnego neuronu i uzyskano wstępne rezultaty numeryczne.
- Przeprowadzono pierwsze testy z siecią OTF (Optimal Transfer Function network), opartą na algorytmie sieci IncNet, wykorzystującą neurony o bogatej parametryzacji, specjalizujące się w wyniku uczenia.
- Dr Jankowski przygotował monografię na temat sieci ontogenicznych, która zostanie wydana w 2002 roku.

Publikacje związane z tym tematem:

0. Duch W, Jankowski N, *Transfer functions: hidden possibilities for better neural networks*. 9th European Symposium on Artificial Neural Networks (ESANN), Brugge, Belgium. De-facto publications 2001, pp. 81-94
0. Jankowski N, Duch W, *Optimal transfer function neural networks*. 9th European Symposium on Artificial Neural Networks, Brugge, Belgium. De-facto publications 2001, pp. 101-106
0. 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, Belgium. De-facto publications 2001, pp. 107-112
0. R. Adamczak, *Zastosowanie sieci neuronowych do klasyfikacji danych doświadczalnych*. Praca doktorska, KIS UMK, Toruń 2001, 124 str.

I.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 najprostszyc opisów danych. W roku 2001 przeanalizowaliśmy wiele różnych medycznych i psychometrycznych baz danych.

- Korzystając z publicznie dostępnych baz danych porównywaliśmy wiele systemów klasyfikujących dane jak i systemów dokonujących ekstrakcji danych. Wyniki tych badań są ciągle uzupełniane i udostępniane naszych stronach internetowych.
<http://www.phys.uni.torun.pl/KIS/projects/datasets.htm>

- Otrzymaliśmy liczne nowe rezultaty dla kilku nowych danych medycznych, również dla danych zbieranych w Polsce dotyczących chorób cukrzycy i czerniaka oraz danych otrzymanych z różnych ośrodków zagranicznych. Dane te wymagają często uzupełnień i wyjaśnień, co w niektórych przypadkach zajmuje długi okres czasu. Niektóre z otrzymanych przez nas danych, np. dane psychometryczne z Seoulu, dotyczące różnych form schizofrenii, nie zawierały pożądaných informacji; skutkiem naszych analiz była konieczność zastosowania innego rodzaju testów, które powinny pozwolić na lepszą dyskryminację. Otrzymaliśmy szereg nowych danych, które są obecnie analizowane: dane dotyczące bioprzyswajalności z Japonii, dane archeologiczne z Austrii.
- Odkryte przez nas reguły są proste i posługują się niewielką liczbą ważnych diagnostycznie testów; w kilku przypadkach udało się odkryć najprostszą znaną strukturę danych. Porównanie z innymi metodami uczenia maszynowego, w tym z metodami generującymi reguły rozmyte, pokazuje jednoznacznie wyższość proponowanych przez nas metod. Odkryte przez nas reguły te podane są na stronie:

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

- Nasz psychometryczny system doradczy, oparty na zoptymalizowanych regułach logicznych z FSM został udoskonalony i obecnie korzysta z reguł opracowanych za pomocą naszego drzewa decyzji SSV. System ten używany jest do wspomagania diagnostyki zaburzeń psychologicznych i psychiatrycznych w pracowni psychologicznej Przychodni Akademickiej UMK. Trwają prace nad oficjalną adaptacją testów psychologicznych MMPI do warunków polskich. Po ich zakończeniu będziemy go rozpowszechniać na inne ośrodki.
- Oprócz danych z kwestionariuszy i testów medycznych analizowaliśmy również obrazy medyczne, wspierając przy współpracy z grupą fizyki medycznej Instytutu Fizyki UMK budowę bazy danych dotyczących zdjęć siatkówki.
- Nasza działalność w tym zakresie została zauważona przez firmę Bayer Diagnostic z Terrytown, Nowy Jork, która zaproponowała nam współpracę i organizację workshopu o zastosowaniu sieci neuronowych w diagnostyce medycznej. Firma ta jest szczególnie zainteresowana opracowaniem systemu wspomagania diagnostyki dla swoich urządzeń Advia 120 wykonujących testy hematologiczne. Liczymy na szeroki dostęp do danych i rozwój tej współpracy w najbliższych latach.
- W 2001 roku zatwierdzony został projekt *Knowledge Exploration in Science and Technology*, złożony w 1999 roku przy współpracy z prof. Diercksenem z Instytutu Astrofizyki Maxa Plancka w Garching koło Monachium do biura COST Unii Europejskiej. 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. Chociaż nie brałiśmy udziału w pierwszym spotkaniu ze względu na zbyt późne przesłanie formalnego zgłoszenia do Brukseli zamierzamy analizować zgromadzone w tym projekcie dane.

Publikacje związane z tym tematem:

0. 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

1.5. Integracja metod inteligencji obliczeniowej i nowe modele systemów uczących się.

Znanych jest obecnie wiele metod inteligencji obliczeniowej, wyrastających z różnych dziedzin: uczenia maszynowego, sieci neuronowych, algorytmów ewolucyjnych, logiki, rozpoznawania wzorców, statystyki. Każde środowisko 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 staty-

stycznych metod rozpoznawania obiektów z metodami typu sieci neuronowych, opracowanie nowych metod, wynikających z takiego zintegrowanego ujęcia, oraz automatyzacja tworzenia optymalnych modeli do konkretnych zastosowań.

W tym celu w ostatnich latach 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 położenia, 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.

W 2001 roku rozpoczęliśmy pracę (w ramach nowej pracy doktorskiej M. Marczaka) 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 opisanego za pomocą ustalonych cech. Pozwoli to na dalszą integrację metod inteligencji obliczeniowej z opartymi na procesach szukania metodami używanymi w sztucznej inteligencji. Wykorzystując programowanie dynamiczne napisano program na znajdowanie transformacji jednego obiektu w drugi w oparciu o ciągi przekształceń o zmiennych kosztach. Niestety w ogólnym przypadku jest to proces obliczeniowo NP-trudny, dlatego skupiono się nad znalezieniem przybliżonych rozwiązań. Schemat SBM idealnie nadaje się do współpracy z tego typu metodami bo nie wymaga reprezentacji w przestrzeni wektorowej, a tylko macierzy podobieństw lub odmienności. Pierwsze wyniki dotyczące zastosowań tego schematu do analizy sekwencji DNA w poszukiwaniu promotorów zostały już wysłane do druku.

Ponieważ nie istnieje jeden system, który zawsze najlepiej działa na wszystkich możliwych danych, należy w każdym przypadku szukać najlepiej działającej metody wśród tych, które można wygenerować w schemacie metod opartych na podobieństwie. Opracowaliśmy wstępny **algorytm meta-uczenia**, czyli 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.

- Praca doktorska Karola Grudzińskiego na temat systemów opartych na podobieństwie i meta-uczenia jest w końcowej fazie.
- Opracowano (Norbert Jankowski) nowy algorytm skalowania cech dla metod opartych na podobieństwie; działa ona w oparciu o procedury szukania, początkowo zmieniające wartości współczynników skalujących o 1, potem o 0.5 itd, powtarzając obliczenia w zrandomizowany sposób celem uniknięcia lokalnych minimów; algorytm ten został zaimplementowany w systemie Ghostminer.
- Realizacja sieci opartych na schemacie SBM pozostaje niezbadana, ale pierwsze takie sieci w oparciu o nasze prace zaczęły tworzyć inne grupy badawcze.

Rozwijaliśmy też metody integracji różnych modeli w oparciu o ideę komitetów modeli. Jest to obecnie duża poddziedzina metod inteligencji obliczeniowej, organizowane są konferencje, numery specjalne a nawet towarzystwa, zajmujące się tylko tym tematem. Celem jest nie tylko poprawa wyników dla złożonych problemów z którymi nie radzi sobie pojedynczy model, ale i zmniejszenie wariancji wyników modelu. W 2001 roku:

- w systemie Ghostminer opracowano ogólny mechanizm pozwalający na tworzenie komitetu z dowolnych modeli dostępnych w tym systemie; pozwala to na kombinację dowolnej liczby modeli jednego typu (np. zawierających elementy stochastycznego uczenia), różnych typów (np. sieci neuronowych i drzew decyzji) jak i tworzenie komitetów komitetów. Na razie zastosowano tylko głosowanie większościowe.

- Komitety metod opartych na podobieństwie i uśrednianie wyników różnych modeli opartych na podobieństwie zaimplementowano w programie Similarity Based Learner;
- opracowano nową, bardzo obiecującą wersję komitetów „lokalnie kompetentnych modeli”, testowaną w ramach pracy magisterskiej (Ł. Itert).

Publikacje związane z tym tematem:

0. Duch W, Grudziński K, *Ensembles of Similarity-Based Models*. Advances in Soft Computing, Physica Verlag, Springer 2001, pp. 75-85
0. Duch W, Grudziński K. *Meta-learning: searching in the model space*. Proc. of the Int. Conf. on Neural Information Processing, Shanghai, 2001, Vol. I, pp. 235-240
0. Duch W, Grudziński K, *Meta-learning via search combined with parameter optimization*. Intelligent Information Systems 2002
0. Marczak M, Duch W, Grudziński K, Naud A. *Transformation Distances, Strings and Identification of DNA Promoters*. International Conference on Neural Networks and Soft Computing (wystąpienie)
0. Duch W, Itert L, *Competent undemocratic committees*. International Conference on Neural Networks and Soft Computing (ICNSC)

Kolejnym krokiem będzie rozszerzenie możliwości programu SBL 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.

I.6. Wizualizacyjna eksploracja wielowymiarowych danych.

Wizualizacja służy dwóm celom: wstępnej eksploracji danych i zrozumieniu struktury wielowymiarowych danych dzięki tworzeniu ich wizualnych reprezentacji, oraz próbie zmniejszenia wymiarowości danych. Podejście oparte na minimalizacji miar zachowania topograficznego sąsiedztwa wielowymiarowych danych, czyli skalowanie wielowymiarowe (MDS) oraz odwzorowanie Sammona, daje ciekawsze rezultaty niż samoorganizująca się mapa Kohonena, ale jest bardzo kosztowne obliczeniowo. W tym zakresie w 2001 roku:

- Zakończono i obroniono pracę doktorską (Antoine Naud) na temat metod wizualizacji danych.
- Zaadoptowano stworzony wcześniej program do systemu Ghostminer, rozszerzono jego możliwości pozwalając na mapowanie do dowolnej liczby wymiarów i oglądanie w tak powstałych przestrzeniach 2-wymiarowych rzutów.
- Opracowano bardzo ciekawe połączenie MDS z hierarchiczną klasteryzacją, mamy nadzieję na implementację tego programu w 2002 roku.
- Program zastosowany został do analizy danych medycznych i psychometrycznych
- Ulepszono algorytmy minimalizacji dla MDS pozwalające na szybkie określenie pozycji pojedynczego wektora w stosunku do istniejącej mapy (mapowanie relatywne) i zastosowano je w programie Ghostminer Analyzer.
- W przypadku dużej liczby danych zaproponowano połączenie algorytmu relatywnego mapowania z klasteryzacją; przeprowadzono obliczenia dla bazy danych liczącej ponad 4000 wektorów pokazując, że połączenie takiego podejścia (do klasteryzacji użyto metody LVQ) nie powoduje znaczących różnic w końcowej mapie, pozwalając na wizualizację za pomocą MDS bardzo dużych zbiorów danych.
- Badanie zależności prawdopodobieństwa klasyfikacji od niepewności pomiaru pokazuje, na ile dany przypadek jest typowy, jak blisko jest granicy decyzji i jakie zaufanie można mieć do jego klasyfikacji. Na razie umożliwia to tylko system wspomaganie diagnoz psychometrycznych. Probabilistyczne przedziały ufności pozwalają na szczegółową eksplorację okolic podawanych do diagnozy danych i śledzenie zmian trajektorii zachowania w czasie dzięki interpolacji wartości pomiędzy poszczególnymi badaniami. Planujemy wbudować podobne możliwości w program Ghostminer Analyzer.

- Trwają prace nad wizualizacją danych dynamicznych, np. trajektorii w układach dynamicznych (w ramach pracy magisterskiej), ale z powodu podjęcia pracy przez magistranta postęp jest powolny.
- 0. A. Naud, *Neural and statistical methods for multidimensional data visualization*. PhD Thesis, KIS UMK Toruń 2001, str. 110
- 0. Naud A, Duch W, *Visualization of large data sets using MDS combined with LVQ*. International Conference on Neural Networks and Soft Computing (ICNSC, wysłane)

I.7. Pozostałe tematy.

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

- Opracowano w ramach pracy magisterskiej (S. Skrzynecki) prostą metodę poprawek *a posteriori* do prawdopodobieństw klasyfikacji, mogącą znaleźć szerokie zastosowanie dla metod opartych na podobieństwie, drzew decyzyj i metod uczenia maszynowego. Metoda jest bardzo prosta obliczeniowo a w kilku zbadanych przypadkach dała znaczącą poprawę wyników.
- Zastosowano metodę zamiany wartości symbolicznych na numeryczne do licznych baz danych, osiągając w przypadku łańcuchów DNA bardzo znaczącą poprawę wyników.
- 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. FET sponsoruje projekty o dużym stopniu ryzyka i dużym potencjale poznawczym lub praktycznym. Nasz projekt zakłada stworzenia symulatora sztucznego środowiska i agentów programowych o różnym poziomie złożoności, które posiadając lokalną wiedzę i wymieniając pomiędzy sobą informację wykażą własności emergentne, łącznie z twórczymi zachowaniami. Chociaż nie został on zakwalifikowany i jest obecnie oprawiany jego wynikiem jest wysłana do druku publikacja na temat przyszłości metod inteligencji obliczeniowej.
- W ramach badań nad inteligentnym szukaniem informacji ogłoszono 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.
- Zamierzamy rozwinąć szerszą działalność w tej dziedzinie, w szczególności w zastosowaniach metod inteligencji obliczeniowej do problemów szukania semantycznego. W 2001 roku prowadziliśmy wstępne przygotowania a w maju 2002 napisaliśmy wspólnie z ekspertami z Department of Pediatric Informatics, Children's Hospital Research Foundation, Cincinnati, podanie o grant na prowadzenia takich badań do NIH (National Institute of Health). Głównym celem ma być wspomaganie odkryć naukowych przez korelację informacji zawartej w zapiskach klinicznych i genomicznych bazach danych.
- 0. Duch W, Itert Ł, *A posteriori corrections to classification methods*. International Conference on Neural Networks and Soft Computing (ICNSC)
- 0. S. Skrzynecki, *Optimalizacja prawdopodobieństw apriorycznych w zastosowaniu do klasyfikacji danych doświadczalnych*. (KIS UMK, Toruń 6/2001)
- 0. Duch W, Mańdziuk J, *Quo vadis, computational intelligence?* Springer Lecture Notes in Soft Computing (wysłane)
- 0. Duch W, *Publikacje naukowe o sieciach neuronowych w Internecie*. EBIB, Elektroniczny Biuletyn Informacyjny Bibliotekarzy 1 (2001) 19

II. Symulacje komputerowe i metody bioinformatyki w fizyce, chemii, biologii i naukach o życiu.

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*.

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

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

Publikacje związane z tym tematem:

1. S. Zelek, L. Cyrnek, J. Wasilewski: Anharmonic effects in vibrational states of SO₂ molecule, Book of Abstracts od Austrian-Czech-Polish-Slovak Symposium on Quantum Chemistry, Ustroń-Jaszowiec, 30.09.2001.
 2. S. Zelek, L. Cyrnek, J. Wasilewski: Lower vibrational states of SO₂. Density Functional and Discrete Variable Representation Approach. – w przygotowaniu do publikacji
- Kontynuowano badania teoretyczne niższych stanów elektronowych gliksalu (C₂O₂H₂) przy zastosowaniu różnych wariantów metody funkcyjałów gęstości (DFT). Do obliczeń energii przejścia elektronowego S₀ – T₁ zastosowano, z dobrym wynikiem, modyfikowany funkcyjałów hybrydowy typu B3. 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 laserowo indukowanej fluorescencji" (LIF – Laser Induced Fluorescence). Wyniki te wchodzi w zakres pracy doktorskiej mgr S. Zelka, część jest już opublikowana.

Publikacje związane z tym tematem:

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

II.2. Opracowanie nowych metod opisu efektów korelacji elektronowej.

Prowadzone były badania układów modelowych w ramach nowych wersji wieloreferencyjnych metod sprzężonych klasterów (MRCC - Multi-Reference Coupled Clusters) w sformułowaniach walencyjnie-universalnym, stanowo-universalnym i stanowo-specyficznym. Badania dotyczyły wpływu bazy 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.

Publikacje związane z tym tematem:

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

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

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

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

Publikacje związane z tym tematem:

0. M. Walda, *Badania kwantowo-mechaniczne struktury i oscylacyjnych widm w podczerwieni analogów krzemowych etylenu*, praca magisterska (obrona: 6. 2001)
0. R. Zieliński, *Teoretyczne badania widma elektronowo-oscyłacyjnego pirazyny metodami funkcjonałów gęstości*, praca magisterska (obrona przewidziana 6.2002)

II.5. Bioinformatyka i nauki o życiu.

W ramach współpracy z grupa prof. Rona Elbera z Cornell University, gdzie dr Meller przebywał na stażu do połowy 2001 roku, oraz współpracy 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 J Meller objął w Department of Pediatric Informatics stanowisko assistant professor, kontynuowano badania w zakresie bioinformatyki i nauk o życiu. Od października 2001 roku bierze w nich udział były doktorant KIS, Rafał Adamczak, trwa procedura powołania prof. Ducha na stanowisko *adjunct professor* w tej instytucji.

Początkowo badania te dotyczyły głównie metod chemii kwantowej w zastosowaniu do białeczek, następnie metod symulacyjnych typu dynamiki molekularnej oraz zastosowania tych algorytmów do symulacji białek (peptydów) na wielką skalę. W 2001 roku pracowano nad następującymi tematami:

- Wiele wysiłku włożono w opracowanie nowych potencjałów do przewidywania struktury białek. Nowe algorytmy zostały zaimplementowane w kolejnych wersjach pakietu obliczeniowego LOOPP (Learning, Observing and Outputting Protein Patterns). Rozpoznaje on struktury białek (fold recognition). Wykorzystano techniki threading, dopasowania sekwencji (sequence alignment), techniki optymalizacji liniowej i analizy statystycznej struktur białkowych oraz tworzenia 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. Serwer LOOPP umożliwia automatyczną anotację sekwencji genomicznych. Bierze on udział w ocenie metod automatycznych będąc sklasyfikowanym na jednym z czołowych miejsc w kategorii najtrudniejszych do przewidzenia struktur. Można go znaleźć pod adresem:
<http://www.tc.cornell.edu/reports/NIH/resource/CompBiologyTools/loop/>
 - Przy współpracy z R. Elberem z Cornell University zaproponowano i rozwinięto szereg nowatorskich metod bioinformatycznych. W szczególności opracowano nowe, efektywne i dokładne, metody rozpoznawania trzeciorzędowych struktur białkowych, nowe algorytmy porównywania sekwencji aminokwasów (problem jednowymiarowy) oraz nowe algorytmy porównywania topologii białek (problem trójwymiarowy).
 - Pracowano nad problemem diagnostyki artretyzmu dziecięcego za pomocą analizy profili macierzy ekspresji genów z tkanki maziowej.
 - Opublikowano rozdział na temat dynamiki molekularnej w monumentalnej encyklopedii nauk o życiu.
 - Rozpoczęto pracę nad wieloma innymi zagadnieniami nauk o życiu wykorzystując metody modelowania molekularnego i metody bioinformatyki; przewidujemy znaczny rozwój
0. Meller J, Encyclopedia of Life Sciences, <http://www.els.net> (on-line), ISBN 0-333-72621-9 (print), Nature Publishing Group, 2001 Macmillan Publishers Ltd
 0. Meller J, Elber R, *Protein recognition by sequence-to-structure fitness: Bridging efficiency and capacity of threading potentials*. Advances of Chemical Physics (w druku)
 0. Meller J, Elber R. *Linear Optimization and a Double Statistical Filter for Protein Threading Protocols*, Proteins Struct. Funct. Gen., 45: 241 - 261 (2001)
 0. Meller J, Elber R, Protein Recognition by Sequence-to-Structure Fitness: Bridging Efficiency and Capacity of Threading Models, Computational Methods for Protein Folding: A Special Volume of Advances of Chemical Physics (rozdział), edytor R. Friesner, w druku
 0. Meller J, Wagner M, Elber R, *Maximum Feasibility Guideline to the Design and Analysis of Protein Folding Potentials*, Journal of Computational Chemistry, 23: 111 - 118 (2002)
 0. Scola MP, Thompson SD, Brunner HI, Adamczak R, Meller J, Glass DN, Synovial Tissue Expression Profiles in JRA Onset Types: Analysis of Discriminating Factors by Pattern Recognition Methods, przygotowana do wysłania do Journal of Rheumatology
 0. Wagner M, Meller J, Elber R, Large Scale Linear Programming Techniques for the Design of Protein Folding Potentials, Mathematical Programming (wysłana)

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

Kognitywistyka powoli rozwija się w Polsce jako odrębna dyscyplina badawcza. Nasze prace w tym zakresie zmierzają w kierunku empirycznie uzasadnionej teorii umysłu w oparciu o modele sieci neuronowych oraz filozoficzne próby zrozumienia koncepcji umysłu i zagadnień dotyczących świadomości. Teoria powinna nie tylko być pomocną w rozwiązaniu podstawowych problemów nauk o poznaniu, lecz również prowadzić do nowych konstrukcji systemów uczących się. Zarysy takiej teorii, w postaci hipotez określających prawdopodobne związki pomiędzy zdarzeniami w mózgu i ich korelacji z percepcją, wyższymi czynnościami poznawczymi i treścią świadomości, zostały już nakreślone w kilku pracach i wystąpieniach konferencyjnych. Matematyczne metody opisu zdarzeń mentalnych wiążą się z teorią układów złożonych w zastosowaniu do sieci neuronowych z rekurencją.

W 2001 roku realizowano tu dwa tematy:

III.1. Neuroinformatyka.

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

III.2. Modelowanie kognitywne.

- Na zaproszenie doc. S. Kasickiego z Instytut Biologii Eksperymentalnej PAN, W. Duch napisał artykuł „Psychika i Świadomość” dla encyklopedii multimedialnej PWN „Człowiek”, która ukazała się w 2001 roku.
- Prof. Duch przewodniczył komitetowi naukowemu utworzonego przy współpracy z logiczami, filozofami i pedagogami z UMK pisma, „Kognitywistyka i media w edukacji”. W 2001 ukazały się dwa numery (razem około 500 stron), w tym jeden całkowicie w języku angielskim. Pismo to ma na celu integrację środowiska osób interesujących się kognitywistyką w Polsce.
- Wspólnie z ekspertami z National Institute of Cancer, Heidelberg, Max Planck Institute for Astrophysics, Monachium, Computer Science Department, Univ. of Ulster (Irlandia), oraz Univ. of Tartu, Estonia, wystąpiliśmy o grant w ramach Unii Europejskiej w programie Future Emerging Technologies, na badania procesów twórczych w sztucznych systemach. Grant nie został w obecnej postaci zatwierdzony i będzie jeszcze raz składany po poprawkach. Jednakże wiele wąt-

ków kontynuowanych jest w ramach projektu COST Action 292 'Knowledge Exploration in Science and Technology', w którym bierzemy udział.

- Razem z prof. B. Siemienieckim z Inst. Pedagogiki i Prof. U. Żegleń z Inst. Filozofii UMK powołaaliśmy Polskie Towarzystwo Kognitywistyczne. Zebranie założycielskie odbyło się w maju 2001 roku, trwa proces rejestracji sądowej.
- Wygłoszono szereg referatów na temat prowadzonych w tej dziedzinie badań:
Duch W, Polskie Towarzystwo Filozoficzne, UAM Poznań, 5.02.2001. Referat: *Neurofilozoficzne rozwiązanie trudnego problemu świadomości.*
Duch W, Inst. Filozofii i Socjologii PAN, Warszawa, 9.06.2001. Referat: *Szkic teorii umysłu i neurofizjologiczne rozwiązanie trudnego problemu świadomości.*
Duch W, Towarzystwo Dynamiki Informacyjnej i Układów Otwartych, Toruń, 11.06.2001. Referat: *Modele umysłu i neurobiologia.*
Duch W, Czwarty Festiwal Nauki, Wrocław, 22.09.2001. Referat: *Jak działa mózg i skąd bierze się umysł?* Wykład i dyskusja.
- Duch W, Zjazd Polskiego Towarzystwa Fizycznego, Toruń, 17-20.10.2001, Referat plenarny: *Fizyka umysłu.*

Badania te znajdują już pewien oddźwięk, o czym mogą świadczyć zaproszenia do wygłoszenia referatów w ośrodkach zagranicznych (Starlab), na konferencjach specjalistycznych (KTH Sztokholm, 2002), i wykładach plenarnych (Zjazd PTF). Ostatnie publikacje związane z tematem to:

0. Duch W, Synchronicity, Mind and Matter. *International Journal of Transpersonal Studies* 21 (2002) 155-170.
0. Duch W, *Psychika i świadomość*. Encyklopedia Multimedialna „Człowiek”, PWN, 2001 (7 p).
0. Duch W, *Fizyka umysłu*. *Postępy Fizyki*, w druku.
0. Duch W (2001) *Sceptycyzm wobec sceptycyzmu (kontynuacja dyskusji o AI)*. *Kognitywistyka i Media w Edukacji*, w druku.

III.3. Prace nad popularyzacją kognitywistyki.

W 2001 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 te przyłączone są obecnie do wielu stron internetowych, 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 wspomaganą metodami komputerowymi

W 2001 roku wykonano następujące prace:

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

Sieci neuronowe, badania nad mózgiem i statystyka:

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

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

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

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

Oprogramowanie i bazy danych do testów metod inteligencji obliczeniowej

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

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

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

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

Duch W, Wykłady wstępne o komputerach i oprogramowaniu, Studium Podyplomowe.

Duch W, *Wstęp do kognitywistyki* (wykład monograficzny).

Duch W, *Mózg, umysł i zachowanie* (wykład monograficzny).

Duch W, *Sztuczna inteligencja* (wykład monograficzny).

Duch W, *Inteligencja obliczeniowa* (wykład monograficzny).

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

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

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

Ostatnia publikacja związana z tym tematem to:

0. 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.

D1.5) Uzyskane nagrody o znaczeniu międzynarodowym i ogólnokrajowym.

Dr Norbert Jankowski:

1. Otrzymał stypendium NATO na 6 miesięcy.
2. Otrzymał stypendium Marie Curie Unii Europejskiej na 2 lata.

D1.6) Inne ważniejsze osiągnięcia.

Prof. Włodzisław Duch był członkiem z wyboru i brał udział w:

1. Radzie redakcyjnej pisma *Computer Physics Communications* (Elsevier, North Holland), jako "Special Editor".
2. Radzie redakcyjnej pisma *IEEE Transaction on Neural Networks*, jako „books and media editor”.
3. Radzie redakcyjnej pisma *International Journal of Transpersonal Studies* (Panigada Press, Honolulu).
4. IEEE Neural Network Council Technical Committee (członek, spotkanie w Waszyngtonie, USA, lipiec 2001)
5. European Neural Network Society (ENNS), jako członek zarządu (spotkanie odbyło się w sierpniu w Wiedniu, wybór na lata 2001-2003). Jako przedstawiciel tej organizacji brał udział w spotkaniu Asia-Pacific Neural Network Assembly w Szanghaju, listopad 2001.
6. International Neural Network Society (INNS), zaproszony w listopadzie 2001 do zarządu tej organizacji.
7. Panelu "Life Sciences", oceniającym projekty programu stypendiów indywidualnych Marie Curie i inne, w ramach V Programu Ramowego EU (4 spotkania w Brukseli).
8. Był przez kolejny rok członkiem komitetu technicznego IEEE Neural Network Council (spotkanie rady odbyło się w Waszyngtonie, lipiec 2001), najważniejszej organizacji międzynarodowej skupiającej ekspertów w dziedzinie sieci neuronowych.
9. Był członkiem Zespołu „Sieci Neuronowe i Logiki Rozmyte” komitetu Automatyki i Robotyki PAN, 1999-2002.
10. Został wiceprzewodniczącym sekcji Fizyki Komputerowej Komitetu Fizyki PAN (luty 2001).
11. Był członkiem zarządu Międzynarodowego Towarzystwa Układów Otwartych i Dynamiki Informacyjnej, kolejna kadencja 2000-2001.
12. Był członkiem zarządu Polskiego Towarzystwa Sieci Neuronowych, ponownie wybrany w czerwcu 2000 roku.
13. Był przewodniczącym rady naukowej nowego pisma „Kognitywistyka i media w edukacji” (Wyd. Adam Marszałek). W roku 2001 ukazał się czwarty i piąty numer tego pisma (razem ok. 500 stron). Jest to jedyne pismo w tej dziedzinie nauki w naszym kraju i w krajach Europy Centralnej.
14. Był członkiem-założycielem Polskiego Towarzystwa Kognitywistycznego (w trakcie rejestracji).
15. Został zaproszony do udziału w grantie National Science Foundation, USA, w zakresie mereotologii, (prof. Barry Smith).
16. Doprowadził do podpisania umowy o współpracy z Graduate School of Life Science and Systems Engineering, Kyushu Institute of Technology, Kitakyushu, Japonia, umowa o współpracy.

17. Napisał recenzję pracy habilitacyjnej z biocybernetyki dr Michała Żochowskiego; kolokwium odbyło się w styczniu 2001 w Instytucie Biocybernetyki i Inżynierii Biomedycznej PAN, Warszawa.
18. Napisał dla National Science Foundation, USA, recenzję jednego grantu.
19. Napisał dla National Science & Engineering Research Council, Kanada, recenzję jednego grantu.
20. Napisał dla KBN recenzję jednego grantu zamawianego i 4 grantów zwykłych.
21. Napisał recenzje wydawnicze dla takich wydawnictw jak Kluwer i WNT.
22. W 2001 roku napisał recenzje prac dla takich pism jak Neural Networks, Neurocomputing, Neural Processing Letters, Biosystems, 14 recenzji na międzynarodowe konferencje i Wydawnictwa UMK.
23. Kontynuował współpracę z firmą FQS Poland (Fujitsu Group) zainteresowaną programami do dogłębnej analizy danych (data mining), inteligentnego wspomaganie podejmowania decyzji, analizy kwestionariuszy, oraz projektem kognitywnych zabawek (wniosek patentowy W. Ducha z 1997 roku, przyznany w 2001 roku).
24. Współpracował z firmą Kopernik.pl z Torunia, która stworzyła wortal zajmujący się nowymi technologiami internetowo-telekomunikacyjnymi.
25. Został zaproszony do komitetów 13 międzynarodowych konferencji, które odbędą się w 2002 roku, w kilku z nich jako jeden z przewodniczących konferencji (conference chairs).
26. Został zaproszony do napisania artykułu do Proceedings of IEEE, najbardziej prestiżowego pisma IEEE.
27. Zespół w składzie W. Duch, K. Grąbczewski i N. Jankowski otrzymał wyróżnienie rektora za działalność naukowo-badawczą.
28. Wspólnie z ekspertami z National Institute of Cancer, Heidelberg, Max Planck Institute for Astrophysics, Monachium, Computer Science Department, Univ. of Ulster (Irlandia), oraz Univ. of Tartu, Estonia, wystąpił o grant w ramach Unii Europejskiej w programie Future Emerging Technologies, na badania procesów twórczych w sztucznych systemach (grant nie został w obecnej postaci zatwierdzony i będzie jeszcze raz składany po poprawkach).
29. Wspólnie z prof. Geerdem Diercksenem z Max Planck Institute for Astrophysics, Monachium, wysłał wniosek o grant w ramach współpracy Polsko-Niemieckiej (BMBF-KBN), jest to kontynuacja wspólnych badań z lat 1998-2001.
30. Szereg wykładów W. Ducha nagrano na taśmę video:
"Jak działa mózg", Inst. Filozofii UAM Poznań, marzec 2001 (10 godzin);
wykład „Towards a better understanding of genomic data: computational approaches”, Children's Hospital Research Foundation, Cincinnati, Ohio, 23.07.2001 (30 min);
wykład "Przyszłość technologii informacyjnych i przyszłość książki" 19-20.11.2001 (30 min).

Dr Jarosław Meller:

1. Został zatrudniony jako *assistant professor* w zakresie bioinformatyki w Department of Pediatric Informatics, Children's Hospital Research Foundation, Cincinnati, USA.

Profesor Jan Wasilewski:

1. Pełnił funkcję prodziekana ds. reformy studiów na Wydziale Fizyki i Astronomii.
2. Kierownictwo pracy doktorskiej mgr S. Zelka, *Zastosowanie technik wielociałowych w teoretycznych badaniach oscylacji molekularnych*. Ustalono szczegółowy plan i tytuł pracy: Teoria funkcjonalności gęstości i reprezentacja zmiennej dyskretnej w zastosowaniu do badania oscylacji molekularnych; praca jest przygotowana w ponad 50%

3. Współkierownictwo seminarium naukowego *Metody komputerowe w badaniach układów wieloatomowych*, uczestniczą głównie doktoranci fizyki i chemii teoretycznej (prowadzone wspólnie z Wydziałem Chemii UMK)
4. Koordynacja prac redakcyjnych nad Wydziałowym Informatorem ECTS - *Studia na Wydziale Fizyki i Astronomii i Informatyki Stosowanej UMK w roku akademickim 2000/2001*, ISBN 83-231-1324-6, str. 384, Wydawnictwo UMK, Toruń, 2001 (skład i łamanie: mgr H. Małek z UMK).
5. W ramach działalności jako prodziekan ds. kształcenia Wydziału Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej UMK koordynował prace nad powołaniem i wdrożeniem na Wydziale nowego kierunku **fizyka techniczna** (w tym specjalności technologie informatyczne), oraz powołaniem nowej formy kształcenia nauczycieli – Międzywydziałowego Studium Matematyczno-Przyrodniczego UMK.

2. Informacja o upowszechnianiu i popularyzacji wyników działalności jednostki.

Pracownicy KIS udzielili szeregu wywiadów telewizyjnych i radiowych i brał udział w przygotowywaniu programów popularnonaukowych:

- dla regionalnej telewizji TVB z okazji Festiwalu Nauki (W. Duch),
- dla Program IV PR (Radio Bis), 22.02.2001, g. 23.00 - 23.40, program o sztucznej inteligencji (W. Duch, N. Jankowski, K. Grąbczewski i R. Adamczak);
- dla Radia PiK, 8.03.2001, program o sztucznej inteligencji, nagranie wystawione jest w Internecie (W. Duch, N. Jankowski, K. Grąbczewski i R. Adamczak);
- udział w programie "Lato z Internetem", prowadzonym przez Marka Hołyńskiego, nagrany 14.07.2001, pokazany w Programie I TVP (W. Duch);
- wywiad dla ORT radio, Wiedeń, 21.08.2001, z okazji konferencji ICANN wywiad w PC World Komputer, dostępny w wersji on-line (W. Duch).

Referaty wygłoszone za granicą

1. Duch W, Starlab Laboratory, Brussels, Belgia, 8.05.2001 (dr Erol Sahim).
Mind from brain: psychological spaces and neuroscience.
2. Duch W, Max Planck Institute for Astrophysics, Munich, 28.08.2001 (Prof. G. Diercksen).
Some new ideas in computational intelligence.
3. Duch W, Chinese University of Hong Kong, Hong Kong, 12.11.2001 (Prof. I. King).
Hybrid neural/global minimization methods of feature selection and logical rule extraction from the training data.

Referaty wygłoszone w kraju

1. Adamczak R, Inst. Fizyki UMCS, Lublin 28.05.2001
Referat: Zastosowanie sieci neuronowych do analizy danych doświadczalnych.
2. Duch W, Polskie Towarzystwo Filozoficzne, UAM Poznań, 5.02.2001.
Referat: Neurofilozoficzne rozwiązanie trudnego problemu świadomości.
3. Duch W, Komitet Fizyki PAN, Sekcja Fizyki Komputerowej, Warszawa 14.02.2001.
Referat: O symulacjach dynamicznych sieci neuronowych, modelach pamięci i jej zaburzeń.

4. Duch W, Polskie Towarzystwo Akustyczne i Polskie Towarzystwo Fizyczne, UAM Poznań, 23.03.2001.
Referat: Pamięć i jej neuronowe modele.
0. Duch W, Instytut Fizyki UMK, Toruń, 29.03.2001.
Referat: Symulacje ludzkiej pamięci.
0. Duch W, Instytut Filozofii UAM, Poznań, 6-7.04.2001.
Referat: Jak działa mózg? 10 godzin wykładów.
0. Duch W, Inst. Filozofii i Socjologii PAN, Warszawa, 9.06.2001.
Referat: Szkic teorii umysłu i neurofizjologiczne rozwiązanie trudnego problemu świadomości.
0. Duch W, Towarzystwo Dynamiki Informacyjnej i Układów Otwartych, Toruń, 11.06.2001.
Referat: Modele umysłu i neurobiologia.
0. Duch W, Czwarty Festiwal Nauki, Wrocław, 22.09.2001.
Referat: Jak działa mózg i skąd bierze się umysł? Wykład i dyskusja.
0. Naud A, Instytut Informatyki, Akademia Górniczo-Hutnicza, Kraków.
Referat: *Neural and statistical methods for multidimensional data visualization.*

Artykuły popularne:

0. Duch W, Pływanie pod prąd, Głos Uczelni, 4/2001
0. Duch W, *Straszenie przyszłością*, Głos Uczelni, 4/2001, str. 3
0. Duch W (2001) *Nieuctwo szkodzi bardziej* Głos Uczelni, 6/2001, p.1
0. Duch W (2001) *Smutne refleksje z Brukseli* Głos Uczelni, 7/2001, p. 1
0. Duch W (2001) *Droga do piekła* Głos Uczelni, 9/2001, p. 10
0. Duch W (2001) Sympleksy w wielu wymiarach. do katalogu "Komplex symplexu" Jerzego Olka i Witolda Szymańskiego, Wrocław 2001

Udział w międzynarodowych konferencjach naukowych.

A. Referaty zaproszone, sesje specjalne, panele dyskusyjne, tutoriali, komitety naukowe konferencji międzynarodowych.

0. Duch W, 9th European Symposium on Artificial Neural Networks (ESANN), Brugge, Belgia, 25-27.04.2001. Członek komitetu naukowego, organizator sesji specjalnej, współautor 3 prac.
0. Duch W, 5th Congress of Societas Humboldtiana Polonorum, "Information Society", Wrocław 23-24.06.2001, invited talk "Future of the information society and information technology".
0. Duch W, International Conference on Computational Intelligence for Modelling, Control and Automation - CIMCA'2001, 9-11.07.2001, Las Vegas. Członek komitetu naukowego.
0. Duch W, International Conference on Intelligent Agents, Web Technologies and Internet Commerce - IAWTIC'2001, 9-11.07.2001, Las Vegas. Członek komitetu naukowego.
0. Duch W, International Joint Conference on Neural Networks, 14-19.07.2001, Washington D.C. Tutorial: "Extraction of knowledge from data using computational intelligence methods" (2 h).
0. Duch W, International Conference on Artificial Neural Networks (ICANN), Vienna, 21-25.08.2001. Członek komitetu naukowego, tutorial (2h) "Extraction of Knowledge from data using Computational Intelligence Methods".
0. Duch W, 7th International Conference on Engineering Applications of Neural Networks (EANN), Cagliari, Włochy, 16-18 July 2001. Członek komitetu naukowego

8. Duch W, Towards a better understanding of genomic data: computational approaches. Children's Hospital Research Foundation, Cincinnati, Ohio, 23.07.2001.
Referat plenarny na zaproszenie: „Understanding medical data”.
9. Duch W, 5th Congress of the Polish Neuroscience Society, 6-9.09.2001.
Referat zaproszony: “Creation of topographical maps and modeling of brain plasticity”.
10. Duch W, International Conference on Neural Information Processing (ICONIP), Shanghai, 14-18.11.2001. Członek komitetu naukowego, przewodniczący sesji.
11. Duch W, Medical Information Technologies, Ustroń, 8-10.11.2001. Członek komitetu naukowego.
12. Meller J, Towards a better understanding of genomic data: computational approaches. Children's Hospital Research Foundation, Cincinnati, Ohio, 23.07.2001. Referat plenarny na zaproszenie: The Role of Protein Structure Prediction in the Post-Genomic Era.
13. Meller J, Tenth SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, Portsmouth, USA, March 2001.
Organizacja mini-symposium: Large Scale Optimization Problems in Protein Structure and Dynamics i referat: The Design of Potential Functions for Protein Folding by Solving Huge Linear Programming Problems.

B. Pozostałe referaty na konferencjach międzynarodowych.

1. Adamczak R,
9th European Symposium on Artificial Neural Networks (ESANN), Brugge 2001.
Constructive density estimation network based on several different separable transfer functions.
2. Duch W, 9th European Symposium on Artificial Neural Networks (ESANN), Brugge 2001.
Referat: *Transfer functions: hidden possibilities for better neural networks.*
3. Duch W, Proc. of the Int. Conf. on Neural Information Processing, Shanghai, 2001.
Referat: *Meta-learning: searching in the model space.*
4. Duch W, Int. Joint Conference on Neural Networks, Washington D.C. 14-18.07.2001.
Referat: *Prototype based rules - new way to understand the data.*
5. Grudziński K,
The Tenth International Symposium on Intelligent Information Systems, Zakopane 18-22.06.2001.
Referat: *Ensembles of Similarity-Based Models.*
6. Jankowski N,
9th European Symposium on Artificial Neural Networks (ESANN), Brugge 2001.
Referat: *Optimal transfer function neural networks.*
7. Zelek S, Wasilewski J, Austrian-Czech-Polish-Slovak Symposium on Quantum Chemistry, Theoretical analysis of electronic-vibrational spectra of glyoxal molecule, poster, Ustron-Jaszowiec, Poland, September 2001
8. Zelek S, Cyrnek L, Wasilewski J, Austrian-Czech-Polish-Slovak Symposium on Quantum Chemistry, Anharmonic effects in vibrational states of SO₂ molecule, poster, Ustron-Jaszowiec, Poland, September 2001

C. Udział w krajowych konferencjach naukowych.

1. Duch W, Komputerowe Systemy Rozpoznawania, KOSYR 2001, 28-31.05.2001.
Członek komitetu programowego.
2. Duch W, II Krajowa Konferencja "Technologia informacyjna w zmieniającej się edukacji", Toruń, 14-16.05.2001. Wykład plenarny "Zastosowania kognitywistyki".

3. Duch W, Polskie Towarzystwo Fizyczne, Toruń, 17-20.10.2001. Wykład plenarny „Fizyka umysłu”.
0. Duch W, Podsumowanie programu "Librarius", Biblioteka Główna UMK, Toruń 19-20.11.2001. Wykład plenarny „Przyszłość technologii informacyjnych i przyszłość książki”.
0. Maniakowski F, XVII Konferencji Informatyka w Szkole, 19-22.09.01 Mielec, bez ref.
0. Maniakowski F, Zjazd Polskiego Towarzystwa Matematycznego, 11-14.09.01, Nowy Sącz, bez ref.

D. Staże i wyjazdy zagraniczne.

0. Prof. Duch W, w Max Planck Institut für Astrophysik, Garching, Niemcy, 15.08-5.09.2001 (prof. Geerd H.F. Diercksen).
0. Mgr Grąbczewski K, Max Planck Institut für Astrophysik, Garching, Niemcy, 1.08-1.09.2001 (prof. Geerd H.F. Diercksen).
0. Dr Jankowski N, Max Planck Institut für Astrophysik, Garching, Niemcy, Niemcy, 1.08-1.09.2001 (prof. Geerd H.F. Diercksen).
0. Dr Jankowski N, King's College London, Center for Neural Networks, stypendium podoktoranckie, 1.10-15.12.2001
0. Dr Meller J, Cornell University, do 1.05.2001, staż podoktorancki.
0. Dr Meller J, Children's Hospital Research Foundation, od 1.05.2001, assistant professor.