

SPRAWOZDANIE Z DZIAŁALNOŚCI NAUKOWO-BADAWCZEJ KATEDRY METOD KOMPUTEROWYCH UMK W ROKU 2003

I. TEMATY BADAWCZE

1. Liczba realizowanych tematów.

- 14, w tym 9 w ramach działalności statutowej, 4 w ramach badań własnych, 1 w ramach grantu UMK.

2. Liczba tematów zakończonych: 0 - w planowanym terminie 0, - z opóźnieniem 0.

- Prowadzone badania mają w większości charakter długoterminowy.

3. Z liczby tematów zakończonych przekazano:

- do wykorzystania, - do wdrożenia.

4. Z liczby tematów przekazanych do wdrożenia, w 2003 r. wdrożono:

- ogółem 1, - w tym w resorcie edukacji narodowej 0.

- Wdrożenie dotyczy metod inteligencji obliczeniowej zawartych w pakiecie programów GhostMiner do data mining, opracowanym przy współpracy z firmą FQS Poland (oddział Fujitsu). Nie jest to temat zakończony, gdyż powstają kolejne wersje systemu w oparciu o nowsze badania.

5. Liczba tematów, których realizację zaniechano (w roku sprawozdawczym).

- nie zaniechano żadnego tematu.

Liczba realizowanych tematów ogółem		14
Działalność statutowa		9
Badania własne		4
Granty UMK		1
Liczba tematów zakończonych		
w tym	W planowanym terminie	0
	z opóźnieniem	0
z liczby tematów zakończonych przekazano	Do wykorzystania	0
	Do wdrożenia	0
z liczby tematów do wdrożenia, w 2003 wdrożono	Ogółem	1
	W tym w resorcie edukacji narodowej	0
Liczba tematów, których realizację zaniechano		0

II. CZĘŚĆ OPISOWA

II.1. Przyczyny zaniechania tematów prowadzonych i rozpoczętych w 2003 roku.

W 2003 roku nie zaniechaliśmy realizacji żadnego tematu.

II.2. Krótka charakterystyka i podsumowanie wyników uzyskanych w 2003 roku.

Problematyka badawcza Katedry Informatyki Stosowanej skoncentrowana jest wokół trzech grup tematycznych.

A) Inteligencja obliczeniowa (computational intelligence)

Zagadnienia inteligencji obliczeniowej dotyczą teorii i zastosowań modeli sieci neuronowych, logiki rozmytej, drzew decyzji, algorytmów opartych na precedensach (case-based), oraz fundamentalnych mechanizmów działania struktur adaptujących się, w tym również zagadnień związanych z działaniem mózgu i modelowaniem umysłu. Jest to część interdyscyplinarnego programu badawczego kierowanego przez prof. W. Ducha.

Główne osiągnięcia w tej grupie tematów to:

1. Zakończenie pracy doktorskiej przez Krzysztofa Grąbczewskiego, „Zastosowanie kryterium separowalności do generowania reguł klasyfikacji na podstawie baz danych”, Rozprawa doktorska. Instytut Badań Systemowych PAN, marzec 2003. Praca została obroniona w czerwcu 2003 roku.
2. Złożenie do druku monografii: Norbert Jankowski, Ontogeniczne sieci neuronowe. Kontrola złożoności sieci neuronowych. Akademicka Oficyna Wydawnicza, Warszawa 2003, str. 312.
3. W międzynarodowym konkursie „NIPS 2003 Feature Selection Challenge” system programów GhostMiner, którego autorami są K. Grąbczewski i N. Jankowski zajął 3 miejsce (na 78 uczestników) w konkursie selekcji cech dla zadań klasyfikacji. NIPS, czyli Neural Information Processing Systems, jest najpoważniejszą konferencją w tej dziedzinie.
4. Przy współpracy z oddziałem firmy Fujitsu w Polsce, FQS Poland, N. Jankowski i K. Grąbczewski rozwinęli pakiet programów GhostMiner 2.0, oparty w większości o algorytmy do data mining opracowane w naszej Katedrze.
5. Przy współpracy z J. Biesiadą z Politechniki Śląskiej opracowano pakiet programów realizujący kilkanaście metod przydatnych do dyskretyzacji i selekcji cech.
6. W. Duch napisał obszerną pracę na temat ekstrakcji reguł logicznych z danych empirycznych na zamówienie *Proceedings of IEEE*, najbardziej prestiżowego pisma IEEE (współautorami są R. Setiono, Singapore i J. Żurada, Louisville), która powinna się ukazać w kwietniu 2004.
7. Opracowano bardzo interesujący algorytm aktywnego uczenia, SVNN (Support Vector Neural Networks), który pozwolił na znaczną poprawę wyników uzyskiwanych przez sieci neuronowe dla trudnych, dużych baz danych.
8. Dokonano znacznego postępu w zrozumieniu mechanizmów działania sieci neuronowych dzięki wizualizacji aktywności warstwy ukrytej oraz wyjściowej w wielu wymiarach, oraz wizualizacji wielowymiarowych powierzchni błędów.
9. Przeanalizowano relacje pomiędzy niepewnością pomiarów a typami funkcji transferu w sieciach neuronowych; praca ta otwiera nowe perspektywy przed modelowaniem rozmytym, pozwala zrozumieć relacje pomiędzy wielowarstwowymi perceptronami a systemami logiki rozmytej, oraz wprowadza nowe, bardzo obiecujące funkcje transferu.
10. Opracowano duży korpus tekstów medycznych, które zostały opisane przez lingwistów, po czym zawarte w nich słowa są automatycznie opisywane (tagowane, czyli określane są części mowy), w

celu mapowania zawartości na ontologie medyczną UMLS i automatycznego przekształcenie tekstu na XML, co pozwoli na inteligentne przeszukiwanie tekstów medycznych.

11. Zredagowano numer międzynarodowego kwartalnika TASK Quarterly, Vol. 1/2003, „Artificial and Computational Intelligence” (W. Duch i D. Rutkowska).
12. W. Duch wygłosił 3-godzinny tutorial „Computational intelligence tools for data understanding”, na połączonych konferencjach International Conference on Artificial Neural Networks (ICANN), and International Conference on Neural Information Processing (ICONIP), Istanbul, Turkey; został wybrany na kolejną kadencję jako członek redakcji IEEE Transaction on Neural Networks oraz dwóch nowych pism: Machine Graphics and Vision, i Neural Information Processing Letters and Reviews.

Publikacje związane z tym tematem:

1. Duch, W, Coloring black boxes: visualization of neural network decisions. International Joint Conference on Neural Networks, Portland, Oregon, 2003, Vol. I, pp. 1735-1740
2. Duch, W, Complex Agents for Socio-Cognitive Engineering. First International Workshop on Socio-Cognitive Engineering Foundations (SCEF-2003), Rome, Italy, Sept 30 - Oct 1, 2003
3. Duch W, Uncertainty of data, fuzzy membership functions, and multi-layer perceptrons. IEEE Transactions on Neural Networks (submitted 11/03.)
4. Duch W, Support Vector Neural Training. IEEE Transactions on Neural Networks (submitted 11/03)
5. Duch W, Blachnik M, Deriving membership functions from similarity measures. (IJCNN 2004, submitted.)
6. Duch W, Itert L, Committees of Undemocratic Competent Models. International Conference on Artificial Neural Networks (ICANN) and International Conference on Neural Information Processing (ICONIP), Istanbul, June 2003, pp. 33-36
7. W. Duch, J. Mandziuk, Quo vadis, computational intelligence? In: Quo Vadis Machine Intelligence? The Progressive Trends in Intelligent Technologies. Eds: P. Sinčák, J. Vaščák, K. Hirota, Studies in Fuzziness and Softcomputing, Springer Verlag, 2004, pp. 3-28
8. Duch W, Setiono R, Zurada J, Computational intelligence methods for understanding of data. Proc. of the IEEE (w druku, wysłane 12/2002, przyjęte 12/2003.)
9. Duch W, Winiarski T, Grąbczewski K, Biesiada J, Kachel, A, Feature Ranking, Selection and Discretization. International Conference on Artificial Neural Networks (ICANN) and International Conference on Neural Information Processing (ICONIP), Istanbul, June 2003, pp. 251-254
10. Kordos M, Duch W, On Some Factors Influencing MLP Error Surface. The Seventh International Conference on Artificial Intelligence and Soft Computing (ICAISC), Zakopane, 7-11.06.2004 (submitted, 11/03)
11. Grąbczewski K, Jankowski N, Symbolic data transformations for continuous data oriented models. International Conference on Artificial Neural Networks, 2003.
12. Grudzinski K, Karwowski M, Duch W, Computational Intelligence Study of the Iron Age Glass Data. International Conference on Artificial Neural Networks (ICANN) and International Conference on Neural Information Processing (ICONIP), Istanbul, June 2003, pp. 17-20
13. Kordos M, Duch, W, Multilayer Perceptron Trained with Numerical Gradient. International Conference on Artificial Neural Networks (ICANN) and International Conference on Neural Information Processing (ICONIP), Istanbul, June 2003, pp. 106-109
14. Kordos M, Duch, W, Search-based training for logical rule extraction by Multilayer Perceptron. International Conference on Artificial Neural Networks (ICANN) and International Conference on Neural Information Processing (ICONIP), Istanbul, June 2003, pp. 86-89
15. N. Jankowski and K. Grąbczewski, Toward optimal SVM. In The Third IASTED International Conference on Artificial Intelligence and Applications, pp. 451-456, Anaheim, Calgary, Zurich, September 2003. The International Association of Science and Technology for Development, ACTA Press.

16. N. Jankowski. Discrete feature weighting and selection algorithm. 2003 International Joint Conference on Neural Networks, pages 636-641, Portland, USA, July 2003. The IEEE Neural Networks Society.
17. J. Pestian, L. Itert, W. Duch, Development of a Pediatric Text-Corpus for Part-of-Speech Tagging Trends in Intelligent Information Processing and Web Mining, 17-20 May, 2004

B) Metody komputerowe w fizyce, chemii i naukach o życiu.

Prof. J. Wasilewski z współpracownikami prowadził badania w ramach tematu: „Struktura energetyczna małych cząsteczek”, zajmując się zastosowaniami teorii funkcjonałów gęstości (DFT – Density Functional Theory) do obliczeń struktury energetycznej i widm elektronowo-oscyłacyjnych 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.

Dr J. Meller prowadził badania nad zastosowaniem metod obliczeniowych typu dynamiki molekularnej oraz metod bioinformatyki rozpoznawania struktur i funkcji białek, metod dopasowania sekwencji w biologii molekularnej i genomice. Od połowy 2001 roku dr Meller pracuje jako *assistant professor* w Children’s Hospital Research Foundation, zajmując się przede wszystkim bioinformatyką.

Najważniejsze wyniki uzyskane w tej grupie tematów to:

1. Zakończenie badań nad efektywnością stosowania różnych wariantów teorii funkcjonałów gęstości (DFT) w opisie efektów anharmonicznych w widmach oscyłacyjnych cząsteczek trójatomowych, na przykładzie stanu podstawowego cząsteczki SO_2 . Przedmiotem badań było także porównanie wyników otrzymanych metodami numerycznymi i zaburzeniowymi.
2. Prowadzono badania nad metodami uwzględniania korelacji elektronowej, w oparciu o konsyistentne wymiarowo metody wieloreferencyjnego oddziaływania konfiguracyjnego (dr Meller) oraz relację pomiędzy różnymi wariantami teorii funkcjonałów gęstości (DFT) a orbitalami Brucknera dla modelowych potencjałów korelacyjno-wymiennych.
3. Przeanalizowano możliwości transferu zoptymalizowanych parametrów potencjałów stosowanych w procesach związania się białek. Opracowano szereg nowych potencjałów do przewidywania struktury białek i zaimplementowano algorytmy w kolejnych wersjach serwera 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. W ocenie metod automatycznych jest on klasyfikowany na jednym z czołowych miejsc w kategorii najtrudniejszych do przewidzenia struktur. Program dostępny jest pod adresem:
<http://www.tc.cornell.edu/reports/NIH/resource/CompBiologyTools/loopp/>
4. Przeprowadzono szereg zaawansowanych symulacji procesów biologicznych, ściśle przy tym współpracując z doświadczalnikami. Doprowadziło to w szczególności do postępu w rozumieniu mechanizmów wiązania polimerazy RNA oraz sposobu wnikania wirusów przez błony komórkowe; jest to potencjalnie bardzo ważny mechanizm biologiczny i kluczowe zagadnienie dla opracowania leków antywirusowych.
5. Pracowano nad problemem diagnostyki artretyzmu dziecięcego za pomocą analizy profili mikro-macierzy ekspresji genów z tkanki maziowej, praca została wysłana do druku.

Publikacje związane z tą grupą tematyczną:

1. R. Adamczak and J. Meller; On the Transferability of Folding and Threading Potentials and Sequence-Independent Filters for Protein Folding Simulations, wysłana
2. R. Adamczak, A. Porollo and J. Meller, Accurate Prediction of Solvent Accessibility Using Neural Networks Based Regression. *Proteins: Structure, Function and Bioinformatics* (2004)
3. M. F. Czyzyk-Krzeska and J. Meller; Von Hippel-Lindau Tumor Suppressor: Not Only HIF's Executioner, *Trends in Molecular Medicine*, w druku (2004)
4. A. V. Kuznetsova, J. Meller, P. O. Schnell, J. A. Nash, Y. Sanchez, J. W. Conaway, R. C. Conaway and M. F. Czyzyk-Krzeska; VHL binds hyperphosphorylated large subunit of RNA Polymerase II through a proline hydroxylation motif and targets it for ubiquitination, *PNAS* vol. 100 (5), 2706-2711 (2003)
5. J. Meller, J. P. Malrieu and J. L. Heully; Size-consistent multireference CI through the dressing of the norm of determinants, *Molecular Physics*, vol. 101 (13), 2029-2041 (2003)
6. J. Meller, *Molecular Dynamics*, w: *Encyclopedia of the Human Genome*. Nature Publishing Group, Macmillan Publishers Ltd 2003.
7. A. Porollo, R. Adamczak, M. Wagner and J. Meller; Maximum Feasibility Approach for Consensus Classifiers: Applications to Protein Structure Prediction, *Proceedings of The Second International Conference on Computational Intelligence, Robotics and Autonomous Systems, Computational Intelligence, Robotics and Adaptive Systems*, Singapore, Dec. 2003
8. 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, wysłana do *Journal of Rheumatology*
9. M. Tan, P. Huang, J. Meller, W. Zhong, T. Farkas and X. Jiang; Mutations within P2 Domain of Norovirus Capsid Affect Binding to Human Histo-Blood Group Antigens: Evidence for a Binding Pocket, *Journal of Virology*, 77 (23): 12562-71 (2003)
10. M. Turowski, N. Yamakawa, J. Meller, K. Kimata, T. Ikegami, K. Hosoya, N. Tanaka and E.R. Thornton; Deuterium Isotope Effects on Hydrophobic Interactions. The Importance of Dispersion Interactions in the Hydrophobic Phase, *Journal of American Chemical Society*, 125: 13836-13849 (2003)
11. M. Wagner, J. Meller and R. Elber; Large-Scale Linear Programming Techniques for the Design of Protein Folding Potentials, *Mathematical Programming* (2004)
12. S. Zelek, L. Cyrnek, J. Wasilewski: Lower vibrational states of SO₂. Density Functional and Discrete Variable Representation Approach. – *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)*, 629:61-70 (2003)

C) Modelowanie kognitywne (cognitive modeling).

Kognitywistyka powoli rozwija się w Polsce jako odrębna dyscyplina badawcza. Nasze prace w tym zakresie zmierzają w kierunku empirycznie uzasadnionych 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.

Prof. Duch przewodniczy komitetowi naukowemu utworzonego przy współpracy z logikami, filozofami i pedagogami z UMK pisma, „Kognitywistyka i media w edukacji”. Pismo to ma na celu integrację środowiska osób interesujących się kognitywistyką w Polsce, jest jedynym tego typu pismem w Polsce i jest oficjalnym pismem Polskiego Towarzystwa Kognitywistycznego.

W 2003 roku pracowano nad następującymi zagadnieniami:

1. Opracowano założenia minimalnego systemu, który będzie wyrażał przekonanie, że jest świadomy – jest to nowy punkt widzenia, pozwalający uniknąć pułapek dyskusji filozoficznych związanych z problemem świadomości.
2. Znacznie rozszerzono i poprawiono wniosek patentowy dotyczący zabawek kognitywnych, mających na celu interakcje z niemowlętami i doskonalenie zdolności percepcyjnych, a w szczególności językowych oraz pojemności pamięci roboczej przez interakcję wymuszającą specyficzny rozwój mózgu. Przeprowadzono rozmowy z ekspertami w zakresie psychologii rozwojowej, którzy zamierzają testować takie zabawki, trwają negocjacje w celu komercjalizacji tego pomysłu.
3. W druku jest artykuł o neurokognitywnej teorii świadomości, który prezentuje realistyczne podejście do problemu zrozumienia natury świadomości i pokazuje, jak można stworzyć świadome komputery, chociaż jest to technicznie bardzo trudne, gdyż nie będą to urządzenia przypominające komputery.
4. Opracowano zarys teorii złożonych agentów, rozważając coraz bardziej złożone sieci oddziaływujących elementów. Przejście od prostych sieci neuronowych do sieci złożonych oddziaływujących agentów dokonać można zwiększając lokalną wiedzę i złożoność oddziaływań, dlatego warto konstruować systemy o pośredniej złożoności, których na razie brakuje.
5. Przygotowano podanie o grant na rozwój interfejsów (HIT, Humanized InTerfaces) integrujących technologie awatarów (mówiącej głowy), syntezę i rozpoznawanie mowy, oraz interakcję poprzez takie interfejsy ze stronami internetowymi. Jednym z zastosowań będą gry słowne, takie jak np. gra w 20 pytań.
6. Do druku w najlepszym piśmie nauk behawioralnych i nauk o mózgu (Behavioral and Brain Sciences, BBS) przyjęto komentarz do pracy o modelu „gestalt” subiektywnej świadomości; W. Duch został wpisany na listę BBS associates, i zaproszony do napisania kolejnego komentarza.
7. Artykuł o synchroniczności omawia realistyczne możliwości wyjaśnienia anomalii obserwowanych w eksperymentach prowadzonych od wielu lat w Princeton (zakładając, że nie ma w nich jakiegoś systematycznego błędu).

Publikacje związane z tym tematem:

1. Duch W, Brain-inspired conscious computing architecture. *Journal of Mind and Behavior* (submitted, Oct. 2003)
2. Duch W, Synchronicity, Mind and Matter. *Neuroquantology*, Vol. 1, January 2003, pp. 2-17
3. Duch, W, Complex Agents for Socio-Cognitive Engineering. First International Workshop on Socio-Cognitive Engineering Foundations (SCEF-2003), Rome, Italy, Sept 30 - Oct 1, 2003
4. Duch W, Neurokognitywna teoria świadomości. *Studia z kognitywistyki i filozofii umysłu* (red. W. Dziarnowska i A. Klawiter). Tom. I, Subiektywność a świadomość. Zysk i S-ka, Poznań 2003, str. 133-154.
5. Duch W, Just bubbles? Commentary on Steven Lehar, Gestalt Isomorphism and the Primacy of Subjective Conscious Experience: A Gestalt Bubble Model. *Behavioral and Brain Sciences* (2004)

III. PUBLIKACJE

III.1. W 2003 roku ukazały się ogółem 33 prace, w tym:

oryginalnych prac badawczych: 28, w tym
 w recenzowanych wydawnictwach międzynarodowych 18,
 w tym z listy Filadelfijskiego Instytutu Informacji Naukowej 6,
 w recenzowanych wydawnictwach krajowych 1;
 oraz 10 doktoratów, prac magisterskich, raportów i prac popularnonaukowych.
 podręczników i skryptów: 1
 publikacji naukowo-popularnych: 0
 redakcji książek naukowych, tłumaczeń: 0
 artykułów, recenzji: 4
 prac magisterskich: 2, doktorskich: 1, habilitacyjnych: 1

Liczba prac opublikowanych w 2003		28
w tym:	Oryginalne prace badawcze	19
	Monografie, podręczniki i skrypty	1
	Publikacje popularno-naukowe i dydaktyczne	0
	Redakcja książek naukowych, tłumaczenia	
	Artykuły, recenzje	8
Liczba prac przyjętych do druku w 2003		9

III.2. Liczba prac przyjętych do druku: 9

Prac wysłanych: 11

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

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