

## C. INFORMACJA O GŁÓWNYCH KIERUNKACH PRAC JEDNOSTKI

1. 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 (KIS) jest jednostką naukowo-dydaktyczną Uniwersytetu Mikołaja Kopernika (UMK) podejmującą **interdyscyplinarne** programy badawcze w dziedzinach, które wykorzystują wyrafinowane metody informatyczne. Profil naszej jednostki w klasyfikacji KBN najbliższy jest sekcji T11F (metody komputerowe w nauce) oraz T11C (informatyka stosowana) i mieści się w głównym nurcie prac związanych z tworzeniem społeczeństwa informacyjnego i gospodarki opartej na wiedzy. W terminologii anglojęzycznej nasza działalność odpowiada pojęciu „informatics”, występującym w takich złożeniach jak bioinformatics, neuroinformatics, medical informatics, czy chemical informatics. Stąd w języku angielskim używamy nazwy „Department of Informatics”.

KIS prowadzi badania i organizuje specjalistyczne wykłady i seminaria dotyczące zastosowań informatyki w naukach ścisłych (fizyce i chemii), naukach o życiu (biologia, medycyna), naukach ekonomicznych, 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.

Problematyka badawcza KIS skoncentrowana jest wokół czterech głównych tematów:

1. Zagadnień inteligencji obliczeniowej (computational intelligence), a w szczególności szeroko pojętych zagadnień neuroinformatyki i metod uczenia maszynowego.
2. Kognitywistyki (*cognitive sciences*), włączając w to neuroinformatykę, informatykę kognitywną, komputerowe modele procesów poznawczych i filozofię umysłu.
3. Informatyki stosowanej do rozwiązywania problemów fizyki, chemii i biologii molekularnej (*life sciences*).
4. Dydaktyki wspomagananej metodami komputerowymi.

W 2004 roku rozwijaliśmy następujące kierunki badań:

### I. Teoria i zastosowania metod inteligencji obliczeniowej.

Jest to obecnie najważniejszy kierunek naszych badań; prace dotyczą teorii i zastosowań modeli typu sieci neuronowych, logiki rozmytej, drzew decyzji, algorytmów opartych na podobieństwie oraz fundamentalnych mechanizmów działania struktur adaptujących się. Nazwy „Computational Intelligence” używaliśmy od wielu lat; IEEE Neural Network Society zmieniło niedawno nazwę na IEEE Computational Intelligence Society. Prace w tej dziedzinie wspierane są przez oddział firmy Fujitsu w Polsce, FQS Poland, pomagający w integracji opracowanych przez nas algorytmów, zawartych w naszym systemie programów do data mining o nazwie GhostMiner, w innych narzędziach, np. systemach bankowych. KBN przyznała nam dwa granty na rozwój teorii i metod meta-uczenia i selekcji informacji na lata 2005-2007.

**Metody rozumienia danych** (data understanding), czy też wyjaśnienia struktur danych, to coś więcej niż statystyczne modele których celem jest osiągnięcie wysokiej dokładności. Badania te są obecnie

jedną z najważniejszych rozwiniętych przez nas specjalności w ramach tej grupy zagadnień. Należą do nich metody ekstrakcji reguł logicznych z danych treningowych za pomocą drzew decyzji i sieci neuronowych, metody oparte na wizualizacji danych i na regułach wykorzystujących podobieństwo do prototypów. Badanie powiązań pomiędzy metodami opartymi na podobieństwie, a metodami logiki rozmytej, oraz rola kontekstu w definiowaniu zmiennych lingwistycznych używanych w regułach, jest bardzo obiecującą dziedziną. Odkryte reguły można wykorzystać w procesie rozumowania. W 2004 roku długa praca na ten temat ukazała się w Proceedings of IEEE, najważniejszym piśmie tej organizacji. Praca ta umieszczona została na okładce pisma i wysunięta w 2005 roku do prestiżowej nagrody im. Donalda Finka.

**Geometryczne metody uczenia i teoria podobieństwa** powinny pozwolić na integrację różnych metod inteligencji obliczeniowej w ramach jednego schematu. Jest on oparty o składanie transformacji wektorowych, w szczególności transformacji opartych o ocenę podobieństwa do przypadków referencyjnych (SBL, Similarity Based Learning). Pozwala to na nowy sposób rozumienia danych przez analizę ich podobieństwa do wyróżnionych prototypów, przy optymalizacji funkcji podobieństwa, selekcji cech ze względu na które oceniane jest podobieństwo, oraz optymalizacji położenia samych prototypów (jest to temat pracy doktorskiej mgr M. Blachnika). Poprzednie podejście SBL zostało tu uogólnione przez wprowadzenie kolejnych transformacji w przestrzeniach, w których oceniane są podobieństwa podobieństw. Pokazaliśmy też, że metody optymalizacji prototypów mogą być konkurencją dla systemów neurorozmytych, pozwalając na tworzenie funkcji przynależności dla danych dowolnego typu. Nowy algorytm aktywnego uczenia SVNN (Support Vector Neural Networks) opracowany przez W. Ducha pozwolił na znaczną poprawę wyników uzyskiwanych przez sieci neuronowe dla trudnych, dużych baz danych, wyszukując niewielką liczbę wektorów brzegowych, które pozostają w końcowej fazie uczenia bardzo ją przyspieszając. Przeanalizowano też relacje pomiędzy niepewnością pomiarów a typami funkcji transferu w sieciach neuronowych, wprowadza nowe, bardzo obiecujące funkcje transferu. Praca ta pozwala zrozumieć relacje pomiędzy wielowarstwowymi perceptronami a systemami logiki rozmytej, otwierając nowe perspektywy przed modelowaniem rozmytym. 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, niestety trudno jest znaleźć dobre dane, na których można je testować – danych nie zbierano, gdyż nikt dotychczas nie potrafił takich problemów rozwiązywać.

**Systemy heterogeniczne** wprowadzają nową jakość do algorytmów inteligencji obliczeniowej. W ostatnich latach opracowaliśmy kilka systemów tego rodzaju. Należą do nich ontogeniczne sieci neuronowe, czyli algorytmy budowy i adaptacji sieci neuronowych zmieniających swoją strukturę. Wszystkie dotychczasowe modele sieci neuronowych powielają elementy przetwarzające (neurony) tego samego typu. Heterogeniczne modele neuronowe tworzą końcowe rozwiązanie z różnych elementów, zależnie od potrzeb wynikających z analizowanych danych; w efekcie końcowy model ma szansę odkryć najprostsze struktury w tych danych. Dr Jankowski napisał na ten temat monografię. Eksperymenty z wyborem różnych funkcji transferu w czasie dodawania nowych węzłów do sieci były bardzo udane, obecnie poszukujemy (jest to temat pracy magisterskiej, rozpoczętej w 2004 roku) efektywnych algorytmów uczenia tego typu sieci. Prace te obejmują heterogeniczne drzewa decyzji, sieci neuronowe i systemy oparte na podobieństwie. Celem jest lepsze zrozumienie struktur danych za pomocą prostszych systemów uczących się. Idea systemów heterogenicznych dobrze pasuje do geometrycznych metod uczenia opartych na złożeniach transformacji.

**Meta-uczenie**, czyli automatyczne tworzenie optymalnych i jak najprostszyc modeli, oparte jest na procesach szukania w przestrzeni modeli o wzrastającym stopniu złożoności. Modele takie można wygenerować w ramach spójnego schematu tworzenia metod opartych na podobieństwie, lub tworzyć z elementów systemów heterogenicznych. Mając do dyspozycji wiele różnorodnych opracowanych przez nas algorytmów próbujemy zastosować te idee do automatycznego wyboru najlepszego modelu, włączając w to wszystkie etapy jego tworzenia: transformację i selekcję danych, krosvalidację, uśrednianie wyników i wybór samego modelu i jego parametrów. Meta-uczenie jest kolejnym krokiem w stronę rozumienia danych przez automatyzację odkrywania jak najprostszyc struktur.

**Metody uczenia oparte na algorytmach szukania** są znacznie prostsze od analitycznych metod minimalizacji gradientowej. Dotychczas w zastosowaniach do sieci neuronowych rozwijano tylko stochastyczne metody szukania, podczas gdy algorytmy wykorzystujące szukanie deterministyczne

(SMLP, Search-based MLP) i gradienty numeryczne są znacznie szybsze i dają doskonałe rezultaty. Nie nakłada to żadnych ograniczeń na rodzaj funkcji transferu sieci, jest to więc bardzo ogólne podejście do optymalizacji systemów uczących się. Algorytm szukania o zmiennym kroku okazał się szybszy i dokładniejszy od tak wyrafinowanych metod jak metoda skalowanych gradientów sprzężonych i metoda Levenberg-Marquard (znana metoda drugiego rzędu). W 2004 roku napisano kilka prac na temat efektywności takich algorytmów używanych do uczenia sieci MLP i do odkrywania reguł klasyfikacyjnych za pomocą sieci neuronowych. Praca doktorska mgr M. Kordosa na ten temat została zakończona i będzie bronią w połowie 2005 roku przez komisją Instytut Informatyki Wydziału Automatyki, Elektroniki i Informatyki Politechniki Śląskiej w Gliwicach.

**Komitety systemów klasyfikujących** to popularne zagadnienie w uczeniu maszynowym. Pracujemy tu nad dwoma zagadnieniami: integracją modeli uzyskanych na różnych partycjach w krosvalidacji (optymalizacja parametrów i sposobu ich głosowania), oraz komitetach uwzględniających kompetencję głosujących członków. Takie komitety inspirowane są przez sposób działania mózgu, które włączają tylko te moduły do oceny danych, które mogą się do tego przydać, obniżając aktywność pozostałych modułów. Członkowie komitetu – różne modele klasyfikujące – oddają swoje głosy, które skalowane są przez czynniki kompetencji w danym obszarze przestrzeni cech. Uzyskano bardzo dobre wyniki (w ramach pracy magisterskiej), metoda ta jest nadal rozwijana i zostanie zintegrowana z innymi w pakiecie programów GhostMiner.

**Selekcja cech i agregacja dostępnej informacji** jest niezbędnym krokiem we wszystkich metodach uczących się w złożonych domenach. Zagadnienia bioinformatyczne charakteryzują się często tysiącami a nawet setkami tysięcy cech, z których należy wybrać nieliczne cechy istotne dla opisu danego problemu. Badania metod selekcji cech i redukcji wymiarowości danych realizowane są przy współpracy z dr J. Biesiadą i dr A. Kachelem z Politechniki Śląskiej. Opracowano zestaw programów realizujących liczne metody typu filtrów, oraz metody selekcji wykorzystujące te filtry, oparte na algorytmach szukania. Badano nowe metody redukcji wymiarowości danych, oparte zarówno na projekcjach liniowych w oparciu o kryteria maksymalizacji miar teorio-informatycznych lub miar typu Fishera, oraz metod nieliniowych typu skalowania wielowymiarowego. W tej dziedzinie popełnia się często błędy metodologiczne, stosując metody selekcji dla całego zbioru danych, co nie zapewnia odpowiedniej generalizacji. Szereg nowych metod jest w opracowaniu, w druku są trzy rozdziały napisane na zamówienie do książki wydawanej po najważniejszym w tej dziedzinie międzynarodowym konkursie „NIPS 2003 Feature Selection Challenge”.

**Wizualizacja wielowymiarowych danych** jest kolejną metodą rozumienia danych. Opracowano nowe sposoby projekcji danych pozwalające zrozumieć relację w przestrzeniach o stosunkowo niewielkiej liczbie wymiarów (rzędu 8-10) za pomocą projekcji na siatkę wierzchołków hipersześcianu (lattice projection), oraz dwuwymiarowych projekcji wykorzystujących kryteria Fishera (W. Duch). Metody te zastosowano do analizy odwzorowań pobudzeń neuronów w przestrzeni wewnętrznej i wyjściowej typowych sieci neuronowych (MLP i RBF), co pozwala zrozumieć sposób ich działania. Wykorzystano je również do obserwacji trajektorii wielowymiarowych układów dynamicznych opisujących chaotyczne pamięci asocjacyjne (P. Matykwicz), co pozwala zaobserwować ich atraktory oraz ocenić ich baseny atrakcji. Nieliniowe mapowanie barycentryczne opracowane zostało przez współpracujących z nami studentów informatyki (F. Piękniewski, L. Rybicki). Projekcje na dwie składowe główne zastosowane zostały do analizy trajektorii parametrów adaptacyjnych (wag i progów) sieci neuronowych, co pozwoliło lepiej zrozumieć proces uczenia się w tych sieciach, dłuższa praca na ten temat jest w druku (M. Kordos). Skalowanie wielowymiarowe (MDS, multi-dimensional scaling) połączone z procedurami klasteryzacji typu LVQ (Learning Vector Quantization), dendrogramów lub metody k-średnich, pozwalającymi na zmniejszenie liczby centrów (codebook vectors) przeznaczonych do mapowania. Daje to mapę MDS dla położenia niewielkich klastrów, co w połączeniu z procedurą domapowywania pojedynczych wektorów pozwala na szybkie umiejscowienie nowych przypadków w otoczeniu przypadków znanych. Program pozwala na wierniejsze odwzorowanie wielowymiarowych danych niż bardzo popularny model samoorganizującej się sieci neuronowej (SOM) Kohonena.

**System GhostMiner do dogłębnej analizy danych** integruje większość rozwiniętych w naszej Katedrze algorytmów i zawiera nowatorskie rozwiązania informatyczne, zarówno w zakresie metod inteligencji obliczeniowej jak i inżynierii oprogramowania. W 2004 roku dokonano w tym pakiecie szeregu zmian, dodając nowe sposoby transformacji danych i selekcji informacji. Usprawniono zarządzanie

tworzeniem i testowaniem modeli, realizowane za pomocą drzewa projektów, na którym umieszczone są modele i procedury testowania. System powstał przy współpracy z firmą FQS Poland z Krakowa (oddział firmy Fujitsu), która wspomaga prace programistyczne. Od połowy 2002 roku firma FQS rozpowszechnia ten system komercyjnie i jest on stosowany w wielu miejscach do analizy danych o różnym charakterze, w 2005 roku powinna powstać wersja arabska. Korzystając z doświadczeń przy opracowaniu tego systemu oraz ze wsparcia grantami KBN planujemy stworzenie znacznie doskonalszej wersji wyposażonej w mechanizmy metauczenia, opartej na składaniu dowolnych transformacji wektorowych.

**Zastosowania naszych algorytmów** i wyników badań teoretycznych możliwe są w analizie danych dla potrzeb medycyny, nauk ścisłych i bioinformatyki. Ekstrakcja reguł logicznych z danych jest podstawą automatyzacji akwizycji wiedzy i konstrukcji systemów inteligentnego wspomaganie decyzji. Prowadzimy współpracę z Department of Biomedical Informatics, CHMC. Dr hab. J. Meller (adiunkt KIS) pracuje tam obecnie jako *associate professor*, dr Rafał Adamczak (nasz były doktorant) jako *research associate*, a mgr Łukasz Itert i mgr Paweł Matykiewicz (nasi doktoranci) przebywają tam na dłuższym stażu przed-doktoranckim. W 2004 roku ukazała się dłuższa praca na temat przewidywania uwodnienia białek za pomocą sieci neuronowych.

**Metody semantycznego szukania informacji** rozwijane są przy współpracy z Department of Biomedical Informatics (kierowanym przez Johna Pestiana), Children's Hospital Medical Center (CHMC) w Cincinnati, Ohio, USA, głównie pod kątem szukania informacji w zgromadzonych tam medycznych bazach danych. W 2004 roku prowadzono dalsze prace nad budową korpusu tekstów, na którym trenowane będą różne systemy uczące się. Z jednej strony do tekstów dodano nazwy kategorii gramatycznych (POS tagger), częściowo automatycznie a częściowo robiła to grupa lingwistów, a z drugiej strony szukano reguł pozwalających na osiągnięcie jednoznaczności skrótów i akronimów (potrzeba ponad 1000 takich reguł). Oprócz metod inteligencji obliczeniowej stosowane są również metody lingwistyczne. W kolejnym kroku robione będą automatyczne adnotacje tekstów przy wykorzystaniu ontologii Unified Medical Language System (UMLS) i XML (Xtended Markup Language). Opracowano wstępnie interesującą ideę połączenia metod analizy tekstów z modelami pamięci rozpoznawczej, semantycznej i epizodycznej. W pierwszym etapie usiłujemy określić, jak sklasyfikować dany fragment tekstu, co pozwala na rozwiązanie problemów z niejednoznacznością skrótów i akronimów. Wymagało to opracowania metody kategoryzacji tekstów, która uwzględnia wiedzę a priori. W projekcie pracuje dwóch doktorantów KIS, mgr Ł. Itert i P. Matykiewicz. Badania te należą częściowo do grupy badań kognitywnych. Przewidujemy znaczny rozwój tej problematyki: kilka tematów z tej grupy zaproponowaliśmy w projekcie utworzenia Centrum Doskonałości (przy Instytucie Podstaw Informatyki PAN), ale projekt ten nie został zatwierdzony.

**Działalność organizacyjna** w organizacjach międzynarodowych świadczy o pozycji naszej grupy w dziedzinie inteligencji obliczeniowej. W. Duch był w 2004 roku:

- członkiem Executive Board a od lipca prezydentem-elektem European Neural Network Society (ENNS),
- członkiem IEEE Computational Intelligence Society Technical Committee,

W 2004 roku był też członkiem redakcji wielu najważniejszych pism specjalistycznych w tej dziedzinie:

- Behavioral and Brain Sciences (BBS associate)
- IEEE Transactions on Neural Networks,
- International Journal of Computational Intelligence
- International Journal of Signal Processing
- International Journal of Computational Intelligence
- International Journal of Neural Systems (IJNS), World Scientific, Editorial Advisory Board
- International Journal of Signal Processing, editor, since 2004
- Machine Graphics and Vision

- Neural Information Processing Letters and Reviews
- The Journal of Mind and Behavior, assessing editor
- Computer Physics Communications (Elsevier, North Holland)

W. Duch bierze udział w kilku największych odbywających się regularnie konferencjach dotyczących inteligencji obliczeniowej i jest członkiem ich komitetów naukowych, w tym:

- World Congress on Computational Intelligence (WCCI 2002, 2006 jako technical-co-chair)
- International Conference on Artificial Neural Networks (ICANN 2005, general co-chair)
- International Conference On Neural Information Processing (ICONIP)
- International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN)
- European Symposium on Artificial Neural Networks (ESANN)
- Engineering Applications of Neural Networks (EANN)
- International Conference on Artificial Intelligence and Soft Computing (ICAISC)
- Intelligent Information Systems (IIS-IIPWM)
- International Conference on Intelligent Sensing and Information Processing (ICISPI)
- International Conference on Computational Intelligence for Modelling Control and Automation (CIMCA)

i wielu innych.

Tematy należące do tego kierunku rozwijane są obecnie przy współpracy z kilkoma ośrodkami zagranicznymi:

- Department of Biomedical Informatics, Cincinnati, Ohio, prof. John Pevsner;
- Department of Computer Science, Cornell University, Ithaca, prof. R. Elber.
- Department of Computer Science, National University of Singapore, prof. R. Setiono;
- Department of Computer Science, Univ. of Louisville, Kentucky, USA, prof. Jacek Żurada;
- Department of Computer Science, Meiji University, Tokyo, prof. T. Takagi i Y. Hayashi;
- School of Computer Engineering, Nanyang Technological University, prof. G-S. Ng, J. Rajaspake;

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

## II. Zastosowanie metod komputerowych do problemów fizyki, chemii i biologii molekularnej.

- 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-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.
- Dr hab. J. Meller prowadził badania nad zastosowaniem metod obliczeniowych typu dynamiki molekularnej oraz metod bioinformatyki do rozpoznawania struktur i funkcji białek, metod dopasowania sekwencji w biologii molekularnej i problemów genomiki. Prace te publikowane są w najlepszych pismach bioinformatycznych. W 2004 roku dr hab. Meller pracował jako *associate pro-*

fessor w Children's Hospital Research Foundation, zajmując się przede wszystkim bioinformatyką. Jego praca habilitacyjna z tej dziedziny została obroniona w połowie 2004 roku przed Radą Naukową Instytutu Biocybernetyki i Inżynierii Biomedycznej PAN w Warszawie.

- Prof. W. Duch prowadził badania nad zastosowaniem metod inteligencji obliczeniowej do analizy danych z mikromacierzy DNA oraz danych z proteomicznych widm spektrografów masowych. Dr Jankowski i dr Grąbczewski doskonalili metody analizy bardzo dużych zbiorów danych bioinformatycznych, rozpoczęte dla potrzeb konkursu metod selekcji cech na konferencji NIPS 2003.
- Dr A. Naud rozwijał współpracę z Obserwatorium Astronomicznym w Genewie, w celu analizy danych z baz OGLE, które zawierają pomiary fotometryczne gwiazd z wybranych obszarów nieba. Potrzebne są narzędzia wykrycia i automatycznej klasyfikacji gwiazd zmiennych. Jako przymiarę, zastosowaliśmy mapy Kohonena do wizualizacji i klasyfikacji podobnych danych z projektu ASAS. Złożono podanie o grant do KBNu na ten temat i sporządzono listę istniejących metod datamining nadających się do tego celu; lista dostępna jest pod adresem:

<http://obswww.unige.ch/~eyer/VSWG/listeComplnt.html>.

Nasza Katedra współorganizowała w 2004 roku po raz trzeci dwudniowe warsztaty ogólnopolskie z udziałem J. Mellera i kilku innych wykładowców z UMK i innych uczelni. Prace nad zastosowaniami naszych metod w bioinformatyce rozwijają się powoli, pomimo tego, że jedna z najważniejszych firm w tej dziedzinie, Abbott Laboratories (USA), zakupiła stworzony przez nas system GhostMiner.

**Słowa kluczowe i dyscypliny pokrewne:** bioinformatyka, proteomika, 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) powoli rozwija się w Polsce w odrębną dyscyplinę badawczą. Należy podkreślić, że interdyscyplinarne badania w tej dziedzinie należą do priorytetowych w ramach programów ramowych Unii Europejskiej. Niedorozwój tej dziedziny w Polsce związany jest ze złą organizacją nauki, uniemożliwiająca robienie doktoratów wymagających badań interdyscyplinarnych, które nie znajdują się na oficjalnej liście uprawianych u nas dziedzin nauki. W. Duch był w 2004 roku (i w latach poprzednich) recenzentem tego typu projektów w ramach VI Programu Ramowego, oraz brał udział jako jedna z 20 zaproszonych osób w zorganizowanej w Brukseli przez Unię Europejską konferencji dyskutującej priorytety w planowanym 7 Programie Ramowym (podobna konferencja odbędzie się też w czerwcu 2005 roku). Jesteśmy jedną z nielicznych jednostek w kraju, w której prowadzi się badania kognitywne.

W. Duch jest jednym z członków-założycieli i członków zarządu Polskiego Towarzystwa Kognitywistycznego. Przewodniczy też komitetowi naukowemu pisma „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. Jest to oficjalne pismo Polskiego Towarzystwa Kognitywistycznego. Ukazało się już 6 tomów. Otrzymaliśmy bardzo dobre recenzje z pierwszych lat działalności naszego pisma napisane przez wybitnych specjalistów z filozofii, biocybernetyki, pedagogiki, psychologii i neurobiologii. W październiku 2004 zorganizowaliśmy na UMK trzecią krajową Konferencję i Zjazd Towarzystwa, a w maju 2005 kolejną.

W 2003 roku trzy jednostki UMK, Katedra Informatyki Stosowanej, Zakład Technologii Kształcenia (Inst. Pedagogiki) i Zakład Teorii Poznania i Metodologii Nauk utworzył grupę inicjatywną i otrzymał grant JM Rektora UMK (na trzy lata) w celu utworzenia Centrum Kognitywistyki. Dążymy do powołania interdyscyplinarnego kierunku studiów doktoranckich w tej dziedzinie. W ramach tej inicjatywy organizujemy konferencje naukowe i planujemy badania eksperymentalne. Pracujemy nadal nad empirycznie uzasadnioną teorią umysłu w oparciu o modele funkcji mózgu na poziomie systemowym jak i na poziomie modelowania neuronowego. 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. Kontynuowaliśmy współpracę z filozofami umysłu w Polsce (UAM Poznań, IFiS PAN Warszawa) i za granicą, biorąc udział w konferencjach, seminariach i dyskusjach na temat fundamentalnych problemów dotyczących natury świadomości. Utrzymujemy też kontakty z Instytutem Biologii Eksperymentalnej im. M. Nenckiego w Warszawie.

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, zarówno o charakterze filozoficznym jak i bardziej technicznym. W 2005 roku ukaże się w *The Journal of Mind and Behavior* praca „Brain-inspired conscious computing architecture” na temat modelowania umysłu i świadomości w układach sztucznych. W pracy tej podano też hipotetyczny model procesu automatyzacji nabywania umiejętności, które początkowo wymagają świadomej uwagi. Przy współpracy z School of Computer Engineering, Nanyang Technological University (SCE NTU), Singapur planujemy opracowanie opartego na sieciach neuronowych modelu komputerowego tego procesu i jego zastosowanie do analizy danych dotyczących uczenia się jazdy samochodem (jest to temat wspólnego grantu, złożonego w Singapurze). W 2004 roku W. Duch napisał kolejny komentarz dla *Brain and Behavioral Science*, jednego z najważniejszych pism w tej dziedzinie.

Badania te powinny ulec znacznemu przyspieszeniu, gdyż wspólnie z grupą z King's College London, kierowaną przez prof. Johna Taylora, oraz National Center for Scientific Research “Demokritos” w Atenach, Foundation for Research and Technology – Hellas na Krecie, Universitätsklinikum Hamburg-Eppendorf, Università di Genova, Dipartimento di Informatica, Sistemistica, Telematica, oraz Technical University of Munich złożyliśmy podanie o grant pt. „Artificial Brain Architecture and Cognitive Control Understanding System” (ABACCUS), które jest obecnie oceniane. Jest to najbardziej ambitny z dotychczas sformułowanych na świecie projekt w dziedzinie neuroinformatyki, dotyczący globalnej symulacji całego mózgu.

Nowym tematem, realizowanym przy współpracy z SCE NTU (Singapur) jest rozwój zhumanizowanych interfejsów (HIT, Humanized InTerfaces) integrujących technologie awatarów (mówiącej głowy), syntezę i rozpoznawanie mowy, umożliwiającą naturalną interakcję ze stronami internetowymi. Planujemy testowanie najważniejszych architektur poznawczych, opartych na systemach SOAR, Shruti oraz IDA (Intelligent Distributed Agents), oraz Act-R, do kontroli głowy androida oraz głów symulowanych. Jest to duży projekt koordynowany przez W. Duchę. Ważnym jego elementem będą programy do analizy języka naturalnego, pozwalające w jak najmniejszej liczbie pytań ściśle sprecyzować polecenie lub sens zadanego pytania. Rozwiązanie tego zagadnienia wymaga tworzenia modeli pamięci semantycznej i uproszczonej reprezentacji zawartej w niej informacji, pozwalającej na ocenę ilości zdobywanej informacji. Jednym z zastosowań będą gry słowne, takie jak np. gra w 20 pytań. Gry słowne były niegdyś ważnym elementem zabaw sprzyjającym myśleniu analitycznemu. Rozpowszechnienie się podręcznych komputerów i inteligentnych telefonów będzie sprzyjać popularności tego rodzaju technologii. Zagadnienie to wiąże się również z badaniami nad strukturą przestrzeni semantycznej i jest tematem pracy dwóch doktorantów zaocznych W. Duchy (J. Szymańskiego i T. Sarnatowicza).

W. Duch podał zarys teorii współpracy złożonych sieci agentów programowych, 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.

**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 profesorów i wykładowców. Bierzymy udział zarówno w restrukturyzacji programów nauczania w zakresie specjalizacji komputerowych i przedmiotów o charakterze informatycznym na Wydziale Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej UMK (prof. Wasilewski), w tworzeniu nowych programów na uczelni przy współpracy z Centrum Kształcenia Komputerowego, programów studiów podyplomowych oraz w tworzeniu nowych programów nauczania dla regionu.

W 2004 roku prowadzono eksperymenty z nauczaniem na odległość; W. Duch będąc w Singapurze odbył szereg wideokonferencji, wygłaszając referat na konferencji Polskiego Towarzystwa Kognitywistycznego, występując jako recenzent pracy doktorskiej w UMCS w Lublinie, oraz prowadząc seminaria doktoranckie na UMK.

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 (liczba odwiedzających osiąga już prawie 100 osób dziennie). 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.



## **C2. 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 w tej chwili badań w oparciu o takie umowy; wystąpiliśmy natomiast w ostatnich latach o wsparcie dla następujących projektów:

- Projekt zintegrowany „Artificial Brain Architecture and Cognitive Control Understanding System” (ABACCUS) w ramach 6 Programu Ramowego Future Emerging Technologies (FET), wspólnie z grupą z King’s College London, National Center for Scientific Research “Demokritos” w Atenach, Foundation for Research and Technology – Hellas na Krecie, Universitätsklinikum Hamburg-Eppendorf, Università di Genova, Dipartimento di Informatica, Sistemistica, Telematica, oraz Technical University of Munich. Projekt złożono we wrześniu 2004 roku, uzyskał dobre oceny ale recenzenci domagali się pewnych poprawek, złożono go więc powtórnie w marcu.
- 3 duże projekty: HIT = Humanized InTerfaces, DREAM=Developmental Robot-Embedded Artificial Mind, oraz „Brain-Inspired Model of Skill Learning: from Conscious Cognition to Subconscious Action”, w których W. Duch jest współ-kierownikiem (co-Principal Investigator) zostały złożone w Singapurze pod koniec 2004 i na początku 2005 roku. Dwa pierwsze z tych projektów zostały napisane prawie w całości przez W. Ducha.
- W 2003 roku złożyliśmy wspólnie z 31 innymi grupami projekt w ramach „Excellence Network, 6FP” w zakresie informatyki medycznej, ale program ten nie został zakwalifikowany; trwają nadal rozmowy nad powtórным złożeniem tego projektu.
- W 2003 r. przyłączyliśmy się do wniosku grupy irlandzkiej (Univ. of Ulster) o finansowanie projektu „Breeding creative information societies” w ramach programu Unii Europejskiej „Future Emerging Technologies” (FET), ale nie został on zakwalifikowany.
- Firma DaimlerChrysler zwróciła się do nas z prośbą o udział w projekcie „One-shot learning”, który zarejestrowany został na stronie projektów FET serwera Unii Europejskiej. Bierze w nim udział tylko 4 partnerów (łącznie z nami), projekt jest nadal w przygotowaniu, gdyż zbierane są dane dotyczące segmentacji obrazów.
- Firma Bayer Diagnostics (z centrum w Terrytown pod Nowym Jorkiem), zajmująca się między innymi produkcją aparatury do testów hematologicznych, przysłała nam dane do analizy i utrzymuje z nami kontakt. Na razie nie udało się utworzyć sieci w ramach VI programu ramowego UE do gromadzenia i analiz danych hematologicznych, do której zaprosili nas hematolodzy z Uniwersytetu w Rzymie, ale sprawa jest w toku.
- Od 6 lat prowadzimy współpracę z firmą FQS Poland, która jest oddziałem Fujitsu w Polsce, finansującą rozwój narzędzi do data mining, opracowanych w naszej Katedrze.

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

1. Syntetyczny opis merytoryczny zrealizowanych zadań wg planu zadaniowo-finansowego, w tym:
  - 1) wykonanych badań naukowych i prac rozwojowych,
  - 2) najważniejszych osiągnięć poznawczych,
  - 3) najważniejszych zastosowań praktycznych, w tym opracowanych nowych: technologii, materiałów, wyrobów,
  - 4) wdrożeń dokonanych poza jednostką
  - 5) uzyskanych nagród o znaczeniu międzynarodowym i ogólnokrajowym,
  - 6) innych ważniejszych osiągnięć.

### Opis merytoryczny prac realizowanych w roku 2004

**Finansowanie:** działalność statutowa, badania własne, współpraca międzynarodowa. W ramach działalności statutowej pracowaliśmy nad następującymi tematami:

#### **I. Teoria i zastosowania metod inteligencji obliczeniowej.**

Kierownik prof. W. Duch, finansowanie – badania statutowe.

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 tematami opisanymi poniżej.

Główne osiągnięcia w tej grupie tematów to:

1. Praca W. Ducha, R. Setiono (Signapur) i J. Zurady (USA) ukazał się na okładce numeru majowego 2004 pisma *Proceedings of IEEE*, najbardziej prestiżowego pisma IEEE i została wysunięta do nagrody IEEE imienia Donalda Finka.
2. Przy współpracy z oddziałem firmy Fujitsu w Polsce, FQS Poland, N. Jankowski i K. Grąbczewski rozwinęli pakiet programów GhostMiner 3.0, oparty w większości o algorytmy do data mining opracowane w naszej Katedrze.
3. W lipcu 2004 złożyliśmy wniosek o grant KBN „Selekcja informacji i odkrywanie struktur w danych”, który został przyznany.
4. W lipcu 2004 złożyliśmy wniosek o grant KBN „Meta-uczenie w inteligencji obliczeniowej”, który został przyznany.
5. Napisaliśmy 3 rozdziały do książki zawierającej rezultaty z międzynarodowego konkursu „NIPS 2003 Feature Selection Challenge” selekcji cech dla zadań klasyfikacji, w którym nasz system programów GhostMiner zajął 3 miejsce (na 78 uczestników). NIPS, czyli Neural Information Processing Systems, jest najpoważniejszą konferencją w tej dziedzinie, rezultaty ogłoszono w 2004 roku.

6. Pokazano, że systemy szukające prototypów w przestrzeniach wektorowych można w pewnych przypadkach również przekształcić na systemy neurorozmyte i odwrotnie; stwarza to alternatywne podejście dla systemów neurorozmytych.
7. Przy współpracy z J. Biesiadą i A. Kachelem z Politechniki Śląskiej rozwinięto bibliotekę programów realizujący kilkanaście metod przydatnych do dyskretyzacji i selekcji cech.
8. Dokonano znacznego postępu w zrozumieniu mechanizmów działania sieci neuronowych dzięki wizualizacji aktywności warstwy ukrytej oraz wyjściowej w wielu wymiarach (W. Duch), oraz wizualizacji wielowymiarowych powierzchni błędów (M. Kordos).
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 (W. Duch).
10. 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.
11. 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 ontologię medyczną UMLS i automatycznego przekształcenie tekstu na XML, co pozwoli na inteligentne przeszukiwanie tekstów medycznych.

## I.1. Metody rozumienia struktur danych.

Jest to część bardzo modnej obecnie dziedziny, określanej jako „data mining”, czyli dogłębna analiza danych, lub „knowledge discovery in databases” (KDD), czyli odkrywania wiedzy w bazach danych. 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. W roku 2004 wykonaliśmy następujące prace:

I.1.1. W. Duch napisał przy współpracy z R. Setiono (NUS Singapur), i J. Żuradą (UoL, USA) obszerną pracę „Computational intelligence methods for rule-based data understanding” na zamówienie *Proceedings of IEEE*, najbardziej prestiżowego pisma IEEE. Praca ukazała się na okładce numeru majowego 2004 tego pisma.

1. Duch W, Setiono R, Zurada J, Computational intelligence methods for rule-based data understanding. Proc. of the IEEE 92(5) (2004) 771- 805.

I.1.2 Kryterium separowalności SSV (Separability Split Value) rozwinięte w pracy doktorskiej Krzysztofa Grąbczewskiego zostało zastosowane do dyskretyzacji danych dla różnych klasyfikatorów, wymagających probabilistycznych ocen rozkładu gęstości prawdopodobieństwa; uzyskano znaczną poprawę rezultatów metody Naive Bayes.

2. K. Grąbczewski, SSV Criterion based discretization for Naive Bayes Classifiers. Lecture Notes in Artificial Intelligence Vol. 3070 (2004) 574-579.

I.1.3 Rozwijaliśmy algorytmy uczenia sieci neuronowych oparte na deterministycznych metodach szukania optymalnych dyskretnych parametrów opisujących sieć neuronową (M. Kordos). Obecne testy pokazują, że będą to metody konkurencyjne ze względu na dokładność i szybkość działania w stosunku do najlepszych metod gradientowych, a jednocześnie znacznie prostsze w implementacji. Można za ich pomocą generować również reguły logiczne i udało się w ten sposób otrzymać interesujące, proste reguły. Ponieważ do oceny perturbacji parametrów wykorzystuje się tylko informację o liczbie błędów jest to podejście ogólne, szczególnie przydatne w poszukiwaniu ostrych reguł logicznych, gdy obszar niezerowych gradientów kurczy się do zera i sieci z wsteczną propagacją błędów nie uczą się.

3. M. Kordos, Duch W, Variable step size search algorithm for MLP training. The 8th IASTED International Conference on Artificial Intelligence and Soft Computing (ASC 2004), Sept. 1-3, 2004, Marbella, Spain, pp.215-220

I.1.4. W przypadku złożonych granic decyzji reguły logiczne mogą nie być wystarczająco dokładne lub wystarczająco proste. Alternatywnym sposobem rozumienia struktur danych jest użycie sieci neuronowej, pod warunkiem, że rozumiemy co ta sieć robi. Jest to możliwe dzięki wizualizacji aktywności jednostek wyjściowych i jednostek ukrytych. Wizualizacja aktywności jednostek wyjściowych pozwala poza tym poznać szczegółowe cechy mapowania, którego nauczyła się sieć, porównywać sieci o tych samych liczbach błędów, oceniać wiarygodność klasyfikacji, zdolność do generalizacji, efekty zbytniego dopasowania się do danych i niedostatecznej liczby neuronów, szanse na osiągnięcie zbieżności i wiele innych rzeczy. Dłuższa praca na ten temat znajduje się w przygotowaniu.

4. W. Duch, Visualization of hidden node activity in neural networks: I. Visualization methods. Lecture Notes in Artificial Intelligence Vol. 3070 (2004) 38-43
5. W. Duch, Visualization of hidden node activity in neural networks: II. Application to RBF networks. Lecture Notes in Artificial Intelligence Vol. 3070 (2004) 44-49
6. Duch W, Internal representations of multi-layered perceptrons. Book chapter, Exit (submitted 1/05)

I.1.5. Zbadano relacje pomiędzy niepewnością danych, funkcjami sigmoidalnymi w sieciach neuronowych i funkcjami przynależności systemów rozmytych. Doprowadziło to do zrozumienia przyczyn, dla których funkcje sigmoidalne pełnią tak ważną rolę w sieciach neuronowych, nowego spojrzenia na sieci jako systemy oceniające prawdopodobieństwo spełnienia pewnej reguły, a także wyprowadzenia nowych funkcji transferu.

7. Duch W (2005) Uncertainty of data, fuzzy membership functions, and multi-layer perceptrons. IEEE Transactions on Neural Networks 16(1): 10-23

I.1.6. Celem lepszego zrozumienia procesu uczenia się sieci neuronowych dokonano wizualizacji powierzchni błędów w dwóch składowych głównej macierzy kowariancji wag w kolejnych iteracjach i trajektorii obrazujących proces uczenia się na tych powierzchniach.

8. M. Kordos, Duch W, On Some Factors Influencing MLP Error Surface. Lecture Notes in Artificial Intelligence Vol. 3070 (2004) 217-222
9. Kordos M, Duch W, A Survey of Factors Influencing MLP Error Surface. Control and Cybernetics (w druku)

## I.2. Metody oparte na podobieństwie.

W ostatnich latach opracowaliśmy i rozszerzyliśmy ogólny schemat dla metod opartych na podobieństwie (Similarity-Based Methods, SBM), obejmujący jako szczególne przypadki większość znanych metod 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. Schemat ten jest dobrą podstawą do realizacji algorytmów meta-uczenia. Obecnie pracujemy nad jeszcze bardziej ogólnym geometrycznym modelem systemów uczących się opartym na składaniu wektorowych transformacji.

I.2.1 Pracowaliśmy dalej nad metodami pozwalającymi na zrozumienie danych w oparciu o charakterystyczne prototypy. Pozwala to na wprowadzenie nowego rodzaju reguł opartych na podobieństwie

do prototypów. Dokonano przeglądu algorytmów, implementacji i systematycznego porównania tych metod ze względu na ich liczbę i dokładność klasyfikacji.

1. N. Jankowski, M. Grochowski, Comparison of Instance Selection Algorithms. I. Algorithms Survey. Lecture Notes in Artificial Intelligence Vol. 3070 (2004) 598-603
2. M. Grochowski, N. Jankowski, Comparison of Instance Selection Algorithms. II. Results and Comments. Lecture Notes in Artificial Intelligence Vol. 3070 (2004) 580-585
3. N. Jankowski, M. Grochowski. Instances selection algorithms in the conjunction with LVQ. Artificial Intelligence and Applications, Ed. M.H. Hamza, pp. 636-641, 2005.

I.2.2 Opracowano metodę generacji funkcji przynależności logiki rozmytej odpowiadających różnym metrykom (M. Blachnik). Prowadzi to do tworzenia funkcji przynależności na podstawie danych, zamiast powszechnie stosowanej metody przyjmującej *a priori* proste funkcje przynależności, których parametry są następnie optymalizowane. 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. Można też wykorzystać probabilistycznie określone miary podobieństwa i znaleźć reguły dla danych symbolicznych, dla których metody logiki rozmytej nie działają. Reguły prototypowe można generować można będzie za pomocą wielu metod inteligencji obliczeniowej: sieci neuronowych, drzew decyzyj i metod opartych na podobieństwie. Kolejnym krokiem jest badanie możliwości optymalizacji prototypów przez optymalizację ich własności, oraz dualizmu pomiędzy metodami opartymi na hiperpłaszczyznach dyskryminujących i optymalizacją prototypów.

4. W. Duch, Blachnik M, Fuzzy rule-based systems derived from similarity to prototypes. Lecture Notes in Computer Science, Vol. 3316 (2004) 912-917.

I.2.3 Pracowaliśmy również nad połączeniem metod najbliższych sąsiadów z regularyzowanymi metodami oceny gęstości rozkładu prawdopodobieństwa, a więc pełną metodą Bayesa. Jest to temat pracy magisterskiej M. Szkulmowskiego zakończonej w 2004 roku. Rezultaty porządkują podejście do ocen rozkładów gęstości prawdopodobieństwa i oczekują na publikację.

4. Maciej Szkulmowski. Bayesowskie podejście do analizy danych. KIS UMK, Toruń 2004 (opiekun: W. Duch)

### **I.3. Integracja metod inteligencji obliczeniowej i uczenie geometryczne.**

Metody inteligencji obliczeniowej wyrastają z różnych dziedzin: uczenia maszynowego, sieci neuronowych, algorytmów ewolucyjnych, logiki klasycznej i romytej, rozpoznawania wzorców, statystyki. Każde środowisko ma inne tradycje stosuje własne metody, stąd stosunkowo niewielkie przenikanie się idei opracowanych w pokrewnych dziedzinach. Naszym celem jest integracja metod uczenia maszynowego (ML, machine learning) i statystycznych metod rozpoznawania obiektów z metodami typu sieci neuronowych, opracowanie nowych metod, wynikających z takiego zintegrowanego ujęcia, oraz automatyzacja tworzenia optymalnych modeli do konkretnych zastosowań.

I.3.1. 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. Dążymy do połączenie możliwości tych dwóch rodzajów sieci w celu stworzenia modeli działających automatycznie, bez konieczności doboru architektury sieci, tworzących modele o minimalnej złożoności.

W ramach prac nad tymi zagadnieniami w 2004 roku dr N. Jankowski opiekował się pracą magisterską (M. Wiśniewski) w ramach której rozwijano opublikowany przez niego wcześniej algorytm *Optimal Transfer Functions*. Praca powinna zostać ukończona w 2005 roku.

I.3.2. Systemy heterogeniczne (idea wprowadzona przez nasz zespół) to sieci neuronowe wykorzystujących funkcje transferu różnego typu, drzewa decyzyj oparte na różnych typach testów, oraz sys-

temy oparte na podobieństwie wykorzystujące różne funkcje podobieństwa dla różnych prototypów. Wstępne testy dla heterogenicznych drzew decyzji dały bardzo obiecujące wyniki. Jest tu nadal dużo wyzwań i otwartych problemów. Wiąże się to też z eksperymentami z użyciem nowych funkcji transferu, które prowadzimy od dłuższego czasu. Nowe funkcje transferu, wyprowadzone z rozważań o niepewności pomiarów i optymalnych funkcji estymujących prawdopodobieństwa, zostały wstępnie przetestowane w pracy studentów F. Piękniewskiego i L. Rybickiego.

5. Duch W (2005) Uncertainty of data, fuzzy membership functions, and multi-layer perceptrons. IEEE Transactions on Neural Networks 16(1): 10-23
6. F. Piękniewski, L. Rybicki, Visualizing and Analyzing Multidimensional Output from MLP Networks via Barycentric Projections. The 7th International Conference on Artificial Intelligence and Soft Computing (ICAISC), Zakopane, 6/2004. Lecture Notes in AI Vol. 3070 (2004) 247-252

I.3.3 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. Korzystając ze schematu metod opartych na podobieństwie rozwinęliśmy **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. Ponieważ złożoność takiego procesu szukania w przestrzeni modeli jest bardzo duża trzeba dobrze przemyśleć strategię rozwiązania. W 2004 roku opracowaliśmy założenia nowego algorytmu metauczenia, łączącego transformację danych, metody selekcji i metody klasyfikacji oraz optymalizację parametrów. Badania te ulegną przyspieszeniu w związku z grantem na temat meta-uczenia.

I.3.4 Sieci neuronowe uczone są prawie zawsze metodą wstecznej propagacji błędów. W metodzie tej gradienty ocenia się za pomocą analitycznych wzorów, działających dla funkcji o ciągłych pochodnych. Alternatywnym podejściem jest wymyślona przez nas metoda oceniająca gradienty w sposób numeryczny lub też prowadząca poszukiwania optymalnego zestawu wag metodą szukania ze zmiennym krokiem. Jej wielką zaletą jest prostota implementacji a rezultaty są bardzo obiecujące.

4. M. Kordos, Duch W, Variable step size search algorithm for MLP training. The 8th IASTED International Conference on Artificial Intelligence and Soft Computing (ASC 2004), Sept. 1-3, 2004, Marbella, Spain, pp.215-220

I.3.5. Metody wektorów wsparcia zdobyły wielką popularność. Podobne metody aktywnego uczenia można zastosować w klasycznych algorytmach sieci typu MLP lub RBF. Udało się dzięki temu zredukować liczbę wektorów uczących do mniej niż 1% wszystkich wektorów, co oczywiście przyspiesza wykonywanie obliczeń, wyostrzając znacznie granice decyzji. Dla dwóch trudnych zbiorów danych osiągnięto w ten sposób najlepsze dotychczas znane wyniki.

5. Duch W, Support Vector Neural Training. International Conference on Neural Networks, ICANN 2005 (w druku)

I.3.6 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. Opracowano nową, bardzo obiecującą wersję komitetów „lokalnie kompetentnych modeli” i dłuższa praca na ten temat jest w przygotowaniu. Testy dały bardzo dobre rezultaty. Inne podejście do tworzenia komitetu modeli (N. Jankowski, K. Grąbczewski, w przygotowaniu) wykorzystuje modele utworzone na różnych partycjach w procesie krosvalidacji.

I.3.7. Próba zrozumienia relacji pomiędzy metodami opartymi na prototypach a metodami wykorzystującymi funkcje dyskryminujące, oraz wizualizacje aktywności węzłów sieci neuronowych, doprowadziły do idei wektorowych transformacji z lokalnymi układami współrzędnych. Wszystkie metody liniowej dyskryminacji jak i modne obecnie metody kernelowe powinny mieć swoje odpowiedniki w metodach uczenia prototypów. Jest to bardzo ogólne i obiecujące podejście do zagadnień inteligencji obliczeniowej i obecnie intensywnie przez nas badane.

## I.4. Selekcja cech i agregacja informacji.

I.4.1 W konkursie selekcji cech dla zadań klasyfikacji międzynarodowego konkursu „NIPS 2003 Feature Selection Challenge”, który odbył się w grudniu 2003 roku, system programów GhostMiner, którego autorami są K. Grąbczewski i N. Jankowski zajęł 3 miejsce (na 78 uczestników). NIPS, czyli Neural Information Processing Systems, jest najpoważniejszą coroczną konferencją w tej dziedzinie, o wyjątkowo wysokim progu akceptacji (poniżej 20% nadesłanych prac). Bazy danych były bardzo duże, a liczba cech sięgała 100 tysięcy. Osiągnięcie dobrych wyników wymagało opracowania metodologii selekcji zorientowanej na generalizację traktując selekcję łącznie z klasyfikacją. W rezultacie napisaliśmy na zamówienie organizatorów trzy prace, dotyczące metod filtracji, metod klasyfikacji i naszego podejścia do danych w czasie konkursu. Przy okazji wyjaśniono niektóre problemy teoretyczne i postawiono problem relacji pomiędzy wskaźnikami Bayesowskimi a innymi, np. opartymi na teorii informacji.

1. Duch W, Filter Methods. In: Feature extraction, foundations and applications. Eds: I. Guyon, S. Gunn, M. Nikravesh, L. Zadeh, Springer 2004 (w druku),
2. N. Jankowski and K. Grąbczewski. Learning machines. In Isabelle Guyon, Steve Gunn, Masoud Nikravesh, and Lofti Zadeh, editors, Feature extraction, foundations and Applications. Springer, 2004 (w druku).
3. K. Grąbczewski and N. Jankowski. Mining for complex models comprising feature selection and classification. In Isabelle Guyon, Steve Gunn, Masoud Nikravesh, and Lofti Zadeh, editors, Feature extraction, foundations and Applications. Springer, 2004 (w druku).

I.4.2 Prowadziliśmy prace nad porównaniem różnych metodami rankingu cech, selekcji i agregacji dostępnej informacji w celu redukcji wymiarowości. Opracowano zestaw programów realizujących liczne znane metody. Rozwinięto kilka nowych metod selekcji w oparciu o alternatywne indeksy oceny jakości cech. Przeprowadzono bardzo wiele testów mających na celu określenie wpływu dyskretyzacji na wyniki, ustalenie błędów związanych z dyskretyzacją w oszacowaniu ilości informacji łącznej, warunkowej i wzajemnej, i innych wielkości. Szybkość zbieżności i oszacowania błędów są sprawą kluczową; okazało się, że wskaźniki Bayesowskie obarczone są zwykle dużym błędem i stąd ranking cech otrzymany tą metodą może nie być tak dobry co ranking dla wskaźników teorii informatycznych, które zbiegają się znacznie lepiej. Testy wykonano na modelu sztucznych danych, dla których można jednoznacznie porównać różne metody. Opracowano specjalną wersję programu do celów dyskretyzacji i pokazano, że informacja wzajemna (mutual information), obliczona pomiędzy klasami i cechami, jest dla realnych zbiorów danych ponad dwukrotnie większa niż w przypadku prostych metod dyskretyzacji, opartych na stałej liczbie wektorów lub wielkości przedziałów. Zamierzamy dalej rozwijać i udostępnić bibliotekę programów do selekcji i dyskretyzacji.

4. W. Duch, Wieczorek T, Biesiada J, Blachnik M, Comparison of feature ranking methods based on information entropy. Proc. of International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN), Budapest 2004, IEEE Press, pp. 1415-1420

I.4.3. Opracowano prosty i szybki filtr oparty na teście Kołmogorowa-Smirnowa. Jest on przydatny szczególnie dla danych o bardzo dużej liczbie cech i daje wyniki konkurencyjne z innymi metodami filtracji.

5. Biesiada J, Duch W, Feature Selection for High-Dimensional Data: A Kolmogorov-Smirnov Correlation-Based Filter Solution. CORES'05, 4th International Conference on Computer Recognition Systems (w druku)

## I.5. 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. Nasze badania zmierzają do zastosowania metod wizualizacji do obrazowania relacji podobieństwa w dowolnej liczbie wymiarów oraz do analizy zachowania się systemów wektorowych transformacji za pomocą wizualizacji obrazu danych treningowych.

I.5.1 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 przypadku dużej liczby danych skalowanie wielowymiarowe (MDS, multi-dimensional scaling) połączono z klasycznymi algorytmami klasteryzacji typu LBG (k-średnich), LVQ (Learning Vector Quantization) i innymi, pozwalającymi na zmniejszenie liczby centrów (codebook vectors) przeznaczonych do mapowania. Daje to mapę MDS dla położenia niewielkich klastrów, co w połączeniu z procedurą domapowywania pojedynczych wektorów pozwala na szybkie umiejscowienie nowych przypadków w otoczeniu przypadków znanych. Program pozwala na wierniejsze odwzorowanie wielowymiarowych danych niż bardzo popularny model samoorganizującej się sieci neuronowej (SOM) Kohonena. Takie podejście zaczęto stosować do analizy danych astronomicznych.

1. Naud A: Visualization of High-dimensional Data Using an Association of Multidimensional Scaling to Clustering. IEEE Conference on Cybernetics and Intelligent Systems (CIS'2004), pp. 252-255, Singapore, 1-3.12.2004.

I.5.2 Opracowano nowe sposoby projekcji danych pozwalające zrozumieć relację w przestrzeniach o stosunkowo niewielkiej liczbie wymiarów (rzędu 6-8) za pomocą projekcji na kratę wierzchołków hipersześcianu (lattice projection), oraz dwuwymiarowych projekcji wykorzystujących kryteria Fishera (W. Duch). Projekcje te zastosowano do analizy map obrazujących wyjścia sieci neuronowej. Zastosowano też rzut na rogi wielokąta i nieliniowe mapowanie barycentryczne. Takie mapy niosą wiele przydatnych informacji, pozwalając unikać modeli, które są zbyt „pewne siebie”, wybierając optymalne modele spośród kilku o tej samej dokładności, oceniając reprezentacje wewnętrzne, które powstają w sieciach neuronowych jak też i śledzić proces uczenia się.

2. W. Duch, Visualization of hidden node activity in neural networks: I. Visualization methods. Lecture Notes in Artificial Intelligence Vol. 3070 (2004) 38-43
3. W. Duch, Visualization of hidden node activity in neural networks: II. Application to RBF networks. Lecture Notes in Artificial Intelligence Vol. 3070 (2004) 44-49
4. Duch W, Internal representations of multi-layered perceptrons. Book chapter, Exit (w druku)
5. F. Piekiewicz, L. Rybicki, Visualizing and Analyzing Multidimensional Output from MLP Networks via Barycentric Projections. The 7th International Conference on Artificial Intelligence and Soft Computing (ICAISC), Zakopane, 6/2004. Lecture Notes in AI Vol. 3070 (2004) 247-252

I.5.4. Projekcje na kraty i współrzędne równoległe wykorzystano również do obserwacji trajektorii wielowymiarowych układów dynamicznych opisujących chaotyczne pamięci asocjacyjne (P. Matyke-wicz), co pozwala zaobserwować ich atraktory oraz ocenić ich baseny atrakcji. Jest to bardzo interesujące podejście pozwalające na analizę neurodynamiki, które zamierzamy rozwijać.

I.5.5. Projekcje na dwie składowe główne zastosowane zostały do analizy trajektorii parametrów adaptacyjnych (wag i progów) sieci neuronowych, co pozwoliło lepiej zrozumieć proces uczenia się w tych sieciach. Próbowaliśmy również zastosować tą metodę do skrócenia ostatnich etapów uczenia



się sieci neuronowych ale dokładność obrazowana trajektorii nei wydaje się dostatecznie dobra by to się udało.

6. M. Kordos, Duch W, *On Some Factors Influencing MLP Error Surface*. Lecture Notes in Artificial Intelligence Vol. 3070 (2004) 217-222
7. Kordos M, Duch W, *A Survey of Factors Influencing MLP Error Surface*. Control and Cybernetics (submitted 6/04, accepted 10/04, w druku)

I.5.6 Hierarchiczne podejście do skalowania wielowymiarowego na maszynach równoległych jest testowane przy współpracy z prof. B. Schmidtem z SCE NTU w Singapurze.

## I.6. Zastosowanie metod inteligencji obliczeniowej do analizy danych.

I.6.1 Kontynuowano współpracę z firmą FQS Poland (Fujitsu Group) zainteresowaną stworzeniem nowego systemu do dogłębnej analizy danych (data mining), opartego na naszych algorytmach. Wersja 3.0 systemu została ukończona i jest obecnie sprzedawana przez FQS, jest w niej wiele nowych elementów, dokumentacja do wersji 3.0 liczy około 300 stron a tutorial ponad 130 stron. Wersję demonstracyjną pobrało już bardzo wiele osób a program stosowany jest między innymi przez wiodącą firmę bioinformatyczną Abbott Laboratories (USA) oraz stał się częścią systemu do wykrywania podejrzanych transakcji bankowych, budowanego przez firmę FQS. W wersji 3.0 możliwe stało się dodawanie własnych modeli w postaci bibliotek DLL dzięki czemu system GhostMiner pozwolił członkom naszej grupy na łatwiejsze porównywanie i integrację nowych algorytmów, ułatwiając korzystanie z poszczególnych, rozwijanych dotychczas niezależnie programów. Niestety przy dużej liczbie modeli i transformacji, którą teraz mamy w systemie, jego używanie staje się coraz trudniejsze. Konieczne jest tworzenie serii transformacji w postaci używalnych modułów. Obecnie pracujemy nad całkowicie nowym systemem z myślą o meta-uczeniu; zręby tego systemu powinny powstać do końca 2005 roku.

1. N. Jankowski, K. Grąbczewski, and W. Duch. GhostMiner 3.0 User's Guide. FQS Poland, Fujitsu 2004, ok. 300 stron.
2. N. Jankowski, K. Grąbczewski, and W. Duch. GhostMiner 3.0 Tutorial. FQS Poland, Fujitsu 2004, ok. 130 stron.

I.6.2 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>

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 podane są na stronie:

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

Nasze reguły dotyczące klasyfikacji grzybów pojawiały się już w kilkudziesięciu encyklopediach internetowych.

I.6.3 Otrzymaliśmy ciekawe rezultaty dla analizy danych medycznych. Dr hab. J. Meller poszukiwał czynników pozwalających na odróżnienie różnych profili genetycznych dla reumatyzmu dziecięcego (JRA), a mgr T. Zalewski wykonał wstępne prace nad selekcją cech i metod szukania promotorów w sekwencjach DNA.

3. 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*, Journal of Rheumatology (wysłane)

4. T. Zalewski, Metody szukania promotorów w sekwencjach DNA. KIS UMK, Toruń 2004 (opiekun: W. Duch).
5. T. Zalewski, Selekcja cech jako wspomaganie procesu klasyfikacji danych bioinformatycznych (praca inżynierska), KIS UMK, Toruń 2004 (opiekun: W. Duch).

## **I.7. Metody analizy tekstów.**

I.7.1 Prowadzono badania nad metodami semantycznego szukania informacji w informatyce medycznej, a w szczególności w pediatrycznych anotacjach Children's Hospital Medical Center (CHMC) w Cincinnati, Ohio, USA. W 2004 roku zakończono prace nad budową korpusu tekstów, na którym trenowane będą różne systemy uczące się. Tworzeniem korpusu zajmował się mgr Ł. Itert (doktorant W. Duchy). Z jednej strony do tekstów dodano nazwy kategorii gramatycznych (POS tagger), częściowo automatycznie a częściowo robiła to grupa lingwistów, a z drugiej szukano reguł pozwalających na osiągnięcie jednoznaczności skrótów i akronimów (około 900 takich przypadków).

1. J. Pestian, Itert L, Duch W, Development of a Pediatric Text-Corpus for Part-of-Speech Tagging, Intelligent Information Processing and Web Mining, Eds. M.A. Kłopotek, S.T. Wierzchoń, K. Trojanowski. Advances in Soft Computing, Springer 2004, pp. 219-226

I.7.2 Bardzo ważnym zagadnieniem w informatyce medycznej jest usuwanie informacji osobistej, regulowane przepisami HIPAA. Zachowanie kontekstu w przypadku takiego usuwania informacji nie jest trywialnym zagadnieniem; częściowe rozwiązanie podane zostało w pracy:

2. Pestian J.P, Itert L, Andersen C, Wai Lei, Duch W, Anonymizing Clinical Annotations: Meeting HIPAA Requirements Without Losing Context. Journal of Database Management (w druku)

I.7.3 Pracujemy nad wektoryzacją symboli reprezentujących koncepcje tak, by zawierały przynajmniej najprostsze informacje o cechach opisujących te koncepcje. Takie „wektory opisujące koncepcje” nie dają się sprowadzić do wektorów kontekstowych. Szukamy algorytmów częściowo automatycznego ich tworzenia i analizy ilości informacji, jaką można zdobyć zadając konkretne pytanie w podprze-strzeni, która jest ograniczona przez już uzyskane odpowiedź lub podane słowa kluczowe. Słownik cech obiektów, który próbujemy stworzyć, będzie narzędziem o fundamentalnym znaczeniu dla komputerowych metod przetwarzania tekstów i semantycznego szukania informacji. Przewidujemy znaczny rozwój tej problematyki.

3. Duch W, Szymanski J, Sarnatowicz T, Concept description vectors and the 20 question game. Intelligent Information Processing and Web Mining 2005 (w druku)

I.7.4 Opracowano wstępnie interesującą ideę połączenia metod analizy tekstów z modelami pamięci rozpoznawczej, semantycznej i epizodycznej. Badania te należą częściowo do grupy badań kognitywnych.

## **II. Metody komputerowe w fizyce, chemii i naukach o życiu.**

Najważniejsze wyniki uzyskane w tej grupie tematów to:

1. Zakończenie badań nad efektywnością stosowania różnych wariantów teorii funkcjonalów gęstości (DFT) w opisie efektów anharmonicznych w widmach oscylacyjnych cząsteczek trój-

tomowych, na przykładzie stanu podstawowego cząsteczki  $SO_2$ . Przedmiotem badań było także porównanie wyników otrzymywanych metodami numerycznymi i zaburzeniowymi.

2. Prowadzono badania nad metodami uwzględniania korelacji elektronowej, w oparciu o konsystentne wymiarowo metody wieloreferencyjnego oddziaływania konfiguracyjnego (dr hab. Meller) oraz relację pomiędzy różnymi wariantami teorii funkcjonałów gęstości (DFT) a orbitalami Brucknera dla modelowych potencjałów korelacyjno-wymiennych.
3. Przeprowadzono szereg zaawansowanych symulacji procesów biologicznych, ściśle przy tym współpracując z doświadczalnikami. Zaproponowano nowe mechanizmy kontroli transkrypcji poprzez post-translacyjną degradację polimerazy RNA w wyniku wiązania z białkiem VHL. Dwa artykuły związane z tą tematyką zostały opublikowane w renomowanych czasopismach.
4. W oparciu o techniki modelowania komputerowego oraz data mining zaproponowano szereg hipotez dotyczących oddziaływań pomiędzy białkiem otoczki wirusa Norwalk i receptorami na powierzchni komórek nabłonka jelitowego. Komputerowo zidentyfikowany binding pocket został następnie potwierdzony doświadczalnie, otwierając drogę do racjonalnego projektowania inhibitorów hamujących infekcję powodowaną przez wirusy typu Norwalk. Praca opublikowana w Journal of Virology, następna praca w przygotowaniu. Jest to kluczowe zagadnienie dla zrozumienia sposobu wnikania wirusów przez błony komórkowe, potencjalnie bardzo ważny mechanizm biologiczny dla opracowania leków antywirusowych.
5. Pracowano nad problemem diagnostyki artretyzmu dziecięcego za pomocą analizy profili ekspresji genów z tkanki maziowej otrzymanych z użyciem mikromacierzy oraz innych metod pomiaru ekspresji genów, praca została wysłana do druku.
6. Opracowano nowe metody przewidywania dwurzędowych struktur białkowych oraz dokładne metody przewidywania (w oparciu o metody regresji liniowej, np. Support Vector Regression oraz regresji nieliniowej) stopnia uwodnienia (solvent exposure) aminokwasów w natywnych strukturach trzeciorzędowych. Trzy prace związane z tą tematyką zostały wydrukowane bądź są w druku. Nowe metody są dostępne w postaci serwera: <http://sable.cchmc.org>
7. Zastosowano różne metody selekcji cech dla wielu problemów bioinformatycznych, publikacje na ten temat są w druku.
8. Opracowano nowy algorytm klasyfikacyjny dla optymalizacji parametrów potencjałów oddziaływań białek, w oparciu o komitety słabych klasyfikatorów zoptymalizowanych w użyciem technik programowania liniowego i heurystyki Maximum Feasibility. 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.

## **II.1 Teoretyczne badania struktury energetycznej małych cząsteczek i uwzględniania efektów korelacji elektronowej.**

Badania te wykonywane były częściowo w ramach grantu KBN (kierowanego przez prof. K. Jankowskiego z Instytutu Fizyki UMK), w realizacji którego uczestniczy prof. Wasilewski,

**II.1.1.** Zakończenie badań nad efektywnością stosowania różnych wariantów teorii funkcjonałów gęstości (DFT) w opisie efektów anharmonicznych w widmach oscylacyjnych cząsteczek trójatomowych, na przykładzie stanu podstawowego cząsteczki  $SO_2$ . Przedmiotem badań było także porównanie wyników otrzymywanych metodami numerycznymi i zaburzeniowymi.

**II.1.2.** Prowadzono badania nad metodami uwzględniania korelacji elektronowej, oraz badano relacje pomiędzy przestrzeniami orbitalnymi i rozkładami gęstości elektronowej otrzymywanymi w różnych wariantach teorii funkcjonałów gęstości (DFT), a odpowiednimi wielkościami otrzymywanymi przy zastosowaniu orbitali Brucknera.

1. K. Jankowski, K. Nowakowski, J. Wasilewski, A comparative study of Kohn-Sham, Bruckner and Hartree-Fock orbitals, Chem. Phys. Letters, 389:393-399 (2004)
2. J. Wasilewski, K. Nowakowski, K. Jankowski, On the presumptive similarity of Kohn-Sham and Brueckner orbitals, Struct. Chem., 15:441-449 (2004)

## II.2. Symulacje komputerowe w fizyce i chemii

II.2.1. 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;
- komputerowe modelowanie procesów dekompozycji ozonu – w ramach pracy magisterskiej kierowanej przez dr S. Zelka.

1. A. Polanowska, Komputerowe modelowanie wybranych reakcji tworzenia i rozpadu cząsteczki ozonu. Praca magisterska, KIS UMK Toruń, 2004 (opiekun: S. Zelek)

## II.3. Bioinformatyka i nauki o życiu.

W ramach współpracy z jedną z wiodących instytucji amerykańskich w dziedzinie nauk o życiu i ich klinicznych zastosowań, Children's Hospital Research Foundation w Cincinnati, gdzie dr hab. J. Meller pracuje w Department of Biomedical Informatics jako assistant professor, kontynuowano badania w zakresie bioinformatyki i nauk o życiu. Bierze w nich udział były doktorant KIS, Rafał Adamczak.

W 2004 roku pracowano nad następującymi tematami:

II.3.1 Opracowano nowe metody przewidywania dwurzędowych struktur białkowych oraz dokładne metody przewidywania (w oparciu o metody regresji liniowej, np. Support Vector Regression oraz regresji nieliniowej) stopnia uwodnienia (solvent exposure) aminokwasów w natywnych strukturach trzeciorzędowych. Trzy prace związane z tą tematyką zostały wydrukowane bądź są w druku. Nowe metody są dostępne w postaci serwera: <http://sable.cchmc.org>

1. M.-D. Filippi, C. E. Harris, J. Meller, Y. Gu, Y. Zheng, A. Williams; Localization of Rac2 via the C terminus and aspartic acid 150 specifies superoxide generation, actin polarity and chemotaxis in neutrophils, Nature Immunology 5: 744-751 (2004)
2. R. Adamczak, A. Porollo, J. Meller, Accurate Prediction of Solvent Accessibility Using Neural Networks Based Regression. Proteins: Structure, Function and Bioinformatics 56(4): 753-67 (2004)
3. M. Wagner, R. Adamczak, A. Porollo and J. Meller; Linear Regression Models for Solvent Accessibility Prediction in Proteins, Journal of Computational Biology (w druku)

II.3.2 Pracowano nad problemem diagnostyki artretyzmu dziecięcego za pomocą analizy profili ekspresji genów z tkanki maziowej otrzymanych z użyciem mikromacierzy oraz innych metod pomiaru ekspresji genów:

4. 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, Journal of Rheumatology (wysłana)

5. J. Meller, R. Adamczak, M. Scola, M. Barnes, S. Thompson, M. Passo, H. Brunner, D. N. Glass and A. A. Grom, Pattern Recognition Analysis of Synovial Tissue Cytokine Expression Profiles Helps Identify Patients with Systemic Onset Juvenile Rheumatoid Arthritis, wysłana do Arthritis Research.

II.3.3 Przy współpracy z grupą eksperymentalną nowe mechanizmy kontroli transkrypcji poprzez post-translacyjną degradację polimerazy RNA w wyniku wiązania z białkiem VHL. Dwa artykuły związane z tą tematyką zostały opublikowane w renomowanych czasopismach.

6. M.F. Czyżyk-Krzeska, J. Meller; Von Hippel-Lindau Tumor Suppressor: Not Only HIF's Executioner. Trends in Molecular Medicine, 10 (4):146-9 (2004)

II.3.4 W oparciu o techniki modelowania komputerowego oraz data mining zaproponowano szereg hipotez dotyczących oddziaływań pomiędzy białkiem otoczki wirusa Norwalk i receptorami na powierzchni komórek nabłonka jelitowego. Komputerowo zidentyfikowany binding pocket został następnie potwierdzony doświadczalnie, otwierając drogę do racjonalnego projektowania inhibitorów hamujących infekcję powodowaną przez wirusy typu Norwalk. Jedna praca opublikowana została w Journal of Virology w 2003 roku, następną praca w przygotowaniu.

II.3.5 Opracowano nowy algorytm klasyfikacyjny w oparciu o komitety słabych klasyfikatorów zoptymalizowanych z użyciem technik programowania liniowego i heurystyki Maximum Feasibility; artykuł konferencyjny opublikowany, kolejny w przygotowaniu.

7. R. Adamczak, J. Meller; On the Transferability of Folding and Threading Potentials and Sequence-Independent Filters for Protein Folding Simulations, Molecular Physics, vol. 102 (11-12): 1291-1305 (2004)
8. R. Adamczak, A. Porollo, J. Meller, Accurate Prediction of Solvent Accessibility Using Neural Networks Based Regression. Proteins: Structure, Function and Bioinformatics 56(4): 753-67 (2004)
9. M. Wagner, J. Meller, R. Elber; Large-Scale Linear Programming Techniques for the Design of Protein Folding Potentials. Mathematical Programming, Volume 101 (2): 301-318 (2004)

II.3.6 Opracowano graficzny program do adnotacji strukturalnej i funkcjonalnej białek:

10. A. Porollo, R. Adamczak, J. Meller; *Polyview: A Flexible Visualization Tool for Structural and Functional Annotations of Proteins*. Bioinformatics, vol. 20 (15): 2460-62 (2004)

II.3.7 Przeprowadzono w ramach pracy magisterskiej i inżynierskiej wstępne badania metod poszukiwania promotorów i przydatności różnych metod selekcji cech w tym procesie.

11. T. Zalewski, Metody szukania promotorów w sekwencjach DNA. KIS UMK, Toruń 2004 (opiekun: W. Duch).
12. T. Zalewski, Selekcja cech jako wspomaganie procesu klasyfikacji danych bioinformatycznych (praca inżynierska), KIS UMK, Toruń 2004 (opiekun: W. Duch).

### **III. Kognitywistyka, neuroinformatyka, informatyka kognitywna i filozofia umysłu**

Nasze prace w tej dziedzinie zmierzają w kilku kierunkach. W 2004 roku pracowano nad następującymi zagadnieniami:

### III.1. Modele procesów poznawczych i zhumanizowane interfejsy.

Podjęliśmy próby stworzenia empirycznie uzasadnionej teorii umysłu w oparciu o modele sieci neuronowych. 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. Takie podejście napotyka jednak trudności praktyczne i może służyć jedynie uzasadnieniu możliwości przeprowadzenia pewnych redukcji do uproszczonych modeli. Szanse na zrozumienie tych procesów stwarzają metody wizualizacji układów neurodynamicznych, analiza neurodynamiki za pomocą rozmytych metod dynamiki symbolicznej, jak i metody upraszczania dynamiki takich układów.

**III.1.1** 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. Zaproponowano szkic takiej teorii, od najprostszycy sieci z węzłami o pojedynczym parametrze i liniowymi oddziaływaniami, przez sieci o złożonych elementach wewnętrznych z coraz większą lokalną wiedzą, sieci złożone z podsieci, sieci wyspecjalizowanych modułów, do sieci agentów wymieniających informację w symboliczny sposób. Nawiązano współpracę z prof. S. Franklinem, kierownikiem The "Conscious" Software Research Group (CSRG) w The University of Memphis, Institute of Intelligent Systems. Opracowana przez niego architektura Intelligent Distribution Agent (IDA) wzorowana jest na teorii B. Baarsa „Globalnej przestrzeni roboczej”, wyjaśniającej wiele własności umysłu, a jej zastosowania do analizy złożonych problemów negocjacji o pracę w marynarce wojennej są bardzo udane. Zamierzamy ją użyć (w projekcie złożonym z współpracownikami z SCE NTU w Singapurze) do sterowania głową androida wyposażoną w liczne mechanizmy percepcyjne. Jest to krok w stronę robotyki kognitywnej.

1. 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 Soft Computing, Springer Verlag, 2004, pp. 3-28

**III.1.2** Tworzenie uproszczonych modeli procesów poznawczych wiąże się z próbą stworzenia naturalnych, zhumanizowanych interfejsów programowych, z którymi można będzie porozumieć się przy pomocy głosu. Coraz więcej osób używa komputerów podręcznych typu PDA, coraz większe moce obliczeniowe są też w telefonach lub palmofonach komórkowych. Projekty zhumanizowanych interfejsów (HIT, Humanized InTerfaces) są dobrym polem do testowania różnych teorii kognitywistycznych oraz wymuszają integrację wielu technologii dotyczących rozpoznawania i syntezy mowy, prozodii wymowy, korelacji z emocjonalną treścią tekstu, dopracowania graficznej strony mówiącej głowy, synchronizacji ruchu ust z dźwiękiem i wielu innych zagadnień. Planujemy rozwiązać je w ramach współpracy z School of Computer Engineering, Nanyang Technological University (SCE NTU), Singapur. Złożono 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. Uzupełnieniem tych planów jest projekt DREAM (Developmental Robot-Embedded Artificial Mind), w którym podobne oprogramowanie użyte zostanie do sterownia głową androida i symulowanymi głowami. Projekt ten kładzie nacisk na testowanie ogólnych architektur poznawczych (SOAR, Shruti, IDA, Act-R) do sterowania



zachowaniem androida. Badania prowadzone będą przy współpracy z Brain Science Research Center (BSRC), Korea Advanced Institute of Science and Technology (KAIST), Univ. of Michigan, Ann Arbor, International Computer Science Institute, Berkeley i The University of Memphis). W 2004 roku W. Duch napisał w 2004 roku dwa wnioski o granty (projekt HIT i projekt DREAM) dla agencji A\*STAR i ARC w Singapurze. Jako pierwszy krok w stronę budowy takich zhumanizowanych interfejsów użyliśmy awatarów firmy Haptik, które mają bogate możliwości rozbudowy funkcji percepcyjnych i sterowania. Doktoranci mgr J. Szymański i mgr T. Sarnatowicz stworzyli, w oparciu o narzędzia Haptika i publicznie dostępne narzędzia Speech API Microsoftu do analizy mowy, aplikację pozwalającą na grę w 20 pytań przez rozmowę z awatarem Haptika, który odczytuje pojawiające się na stronie internetowej ([www.20q.net](http://www.20q.net)) pytania, zamienia otrzymane odpowiedzi na tekst i wpisuje je na stronie. Użytkownik widzi jedynie awatara służącego jako HIT, nie zdając sobie sprawy z tego, gdzie działa właściwa aplikacja.

2. J. Szymański, T. Sarnatowicz, W. Duch, Semantic memory for avatars in cyberspace (Cyberworlds 2005, wysłane).

**III.1.3** Opracowano założenia minimalnego systemu, który będzie wyrażał przekonanie, że jest świadomy – jest to nowy punkt widzenia, pozwalający uniknąć pułapek dyskusji filozoficznych związanych z definiowaniem świadomości. Artykuł 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.

3. Duch W, Brain-inspired conscious computing architecture. Journal of Mind and Behavior (w druku, lipiec 2005)

**III.1.4** Przy współpracy z pracownikami SCE NTU w Singapurze W. Duch napisał część wniosku do projektu „Brain-Inspired Model of Skill Learning: from Conscious Cognition to Subconscious Action”, dotyczącą modelowania nabywania automatyzacji umiejętności. Jest to pierwszy projekt proponujący prześledzenie procesu wymagającego początkowo świadomej uwagi, w końcowym etapie realizowany w pełni automatycznie, bez udziału świadomości. Projekt jest obecnie oceniany.

## **III.2. Gry słowne i analiza języka naturalnego.**

W ramach projektów HIT i DREAM planujemy wiele zastosowań, wymagających pewnego rozumienia poleceń i tekstów w ściśle określonym kontekście. Dialog w języku naturalnym z interfejsami HIT wymaga znacznego postępu w analizie języka naturalnego. W ramach badań własnych i badań statutowych wykonano szereg badań wstępnych w tym kierunku. Sformułowaliśmy różne projekty, łącząc zagadnienia lingwistyczne z teorią przestrzeni semantycznych, modelowaniem pamięci rozpoznawczej, semantycznej i epizodycznej.

**III.2.1** Podstawowym problemem systemów odpowiadających na pytania, botów prowadzących dialog z użytkownikiem, czy też systemów wyszukujących informację w Internecie, jest brak wiedzy o pojęciach, które pojawiają się w tekstach. Systemy wykonujące proste polecenia mogą działać w oparciu o rozpoznawanie wzorców wypowiedzi i związane z nimi reguły, ale systemy do dialogu w ten sposób daleko nie zajdą. Konieczne jest tworzenie pamięci semantycznych na dużą skalę. Nie ma niestety słowników, które by w tym pomagały. Dlatego podjęto analizę dostępnych ontologii (Sumo/Milo i innych), słowników typu Wordnet zawierających definicje różnych koncepcji, opisów encyklopedycznych i stwierdzeń zebranych w ramach projektu Open Mind, w celu automatycznego stworzenia pamięci semantycznej na dużą skalę. Jest to zagadnienie trudne i pomimo ograniczenia typów relacji semantycznych do kilku nie wydaje się by można było uniknąć żmudnej pracy ludzkiej, niemniej wstępne wyniki pokazują przydatność tak zebranej wiedzy.

4. J. Szymański, T. Sarnatowicz, W. Duch, Semantic memory for avatars in cyberspace (Cyberworlds 2005, wysłane).

**III.2.2** Jednoznaczne ustalenie sensu pytań lub stwierdzeń wymaga umiejętności zadawania właściwych pytań. Jest to szczególnie widoczne w grze w 20 pytań, w której początkowo nic nie wiadomo. Gry słowne były kiedyś ważnym elementem kształcenia myślenia analitycznego, zostały jednak wyparte przez gry komputerowe kształcące umiejętności innego typu. Do stworzenia dobrego systemu odpowiadającego na pytania potrzebna jest uproszczona pamięć semantyczna, pozwalająca na uproszczoną reprezentację pojęć w oparciu o wektorową reprezentację cech, które opisują daną koncepcję. Upraszczając wszystkie relacje, przechowywane w pamięci semantycznej do jednej - związane z – można utworzyć wektory opisujące koncepcje (Concept Description Vectors, CDV). Analiza rozkładu wartości różnych cech dla wszystkich koncepcji pozwala na ocenę, które pytanie może zawierać jak najwięcej informacji. Na tej podstawie napisano program do gry w 20 pytań, rozważając kilka algorytmów.

5. Duch W, Szymanski J, Sarnatowicz T, Concept description vectors and the 20 question game. Intelligent Information Processing and Web Mining, Advances in Soft Computing, Springer Verlag (w druku, 2005)

### **III.3. Filozofia umysłu.**

**III.3.1** Podejmujemy filozoficzne próby zrozumienia koncepcji umysłu i zagadnień dotyczących świadomości. 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.

6. 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 (w druku).

**III.3.2** Jednym z problemów jest rozumienie roli podobieństwa i reguł logicznych w procesach poznawczych. Psycholodzy patrzą na to zagadnienie coraz bardziej jako dwa bieguny tego samego zjawiska, jednak podejście psychologiczne prowadzi do wielu nieporozumień. Reguły progowe realizowane przez sieci neuronowe nie zawsze przekładają się w prosty sposób na reguły proporcjonalne. Do druku w Behavioral and Brain Sciences, najlepszym piśmie nauk behawioralnych i nauk o mózgu, przyjęto komentarz W. Ducha do pracy na ten temat:

7. Duch W, Rules, Similarity, and Threshold Logic. Commentary on Emmanuel M. Pothos, The Rules versus Similarity distinction. Behavioral and Brain Sciences (w druku)

**III.3.3** Współczesna literatura w filozofii umysłu nawiązuje często do empirycznie zorientowanej starożytnej filozofii indyjskiej, w której po raz pierwszy pojawiały się radykalne koncepcje holistyczne rozumienia natury. Ocenie tych koncepcji w świetle współczesnego rozumienia podstaw fizyki i naturalistycznego rozumienia umysłu poświęcona jest poniższa praca.

8. Duch W (2004) Madhyamika, nauka i natura rzeczywistości. Uwagi na marginesie książki: Matthieu Ricard i Trinh Xuan Thuan, Nieskończoność w Jednej Dłoni: Od Wielkiego Wybuchu do Oświecenia. Kognitywistyka i Media w Edukacji (w druku, 20 pp).

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>



## IV. Badania w zakresie dydaktyki wspomagananej metodami komputerowymi

W 2004 roku wykonano następujące prace:

**IV.1** Utrzymujemy i aktualizujemy strony WWW dotyczące wszystkich spraw związanych z inteligencją obliczeniową, sztuczną inteligencją, inteligentnym szukaniem i ekstrakcją informacji, kognitywistyką, badaniami nad mózgiem, neurobiologią teoretyczną, naukami informacyjnymi, fizyką komputerową. Ze stron tych korzysta bardzo wiele osób (rejestrujemy około 100 odsłon dziennie).

- o Inteligentne metody szukania informacji,  
<http://www.phys.uni.torun.pl/~duch/IR.html>
- o Inteligencja obliczeniowa, statystyka, układy dynamiczne  
<http://www.phys.uni.torun.pl/~duch/CI.html>
- o Sztuczna inteligencja i uczenie maszynowe,  
<http://www.phys.uni.torun.pl/~duch/ai-ml.html>
- o Modelowanie neuronowe, badania nad mózgiem i neurobiologia:  
<http://www.phys.uni.torun.pl/~duch/neural.html>
- o Kognitywistyka  
<http://www.phys.uni.torun.pl/~duch/cognitive.html>
- o Oprogramowanie i bazy danych do testów metod inteligencji obliczeniowej  
<http://www.phys.uni.torun.pl/~duch/software.html>
- o Fizyka komputerowa,  
<http://www.phys.uni.torun.pl/~duch/fiz-komp/index.html>  
AI w szukaniu informacji i przetwarzaniu tekstów
- o Nauka i jej peryferia para, trans, futuro i religio-logiczne  
<http://www.phys.uni.torun.pl/~duch/science.html>
- o Rezultaty - porównanie metod klasyfikacji i ekstrakcji reguł logicznych.  
<http://www.phys.uni.torun.pl/kmk/projects/datasets.html>

Przykładowo, w internetowej encyklopedii Wikipedia i kilkudziesięciu innych przytoczono reguły logiczne, które otrzymaliśmy analizując zbiór danych dla grzybów.

**IV.2** W ramach eksperymentów z nauczaniem na odległość udostępniliśmy i zaktualizowaliśmy 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).

**IV.3** Utrzymujemy strony WWW dotyczące zagadnień związanych z komputerami i oprogramowaniem. Dziedzina ta, zwana w krajach anglojęzycznych „*information science*“.

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

Ze stron tych korzysta bardzo wiele osób (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.

**IV.4** Prof. J. Wasilewski koordynował prace redakcyjne nad kolejnym wydaniem Wydziałowego Informatora ECTS – „Studia na Wydziale Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej UMK”, w roku akademickim 2004/05, ISBN 83-231-1576-1, str. 412, Uniwersytetu Mikołaja Kopernika, ISBN 83-231-1723-3, Toruń, 2004 (skład i łamanie: mgr H. Małek z KIS).

**IV.5** W 2004 roku prowadzono eksperymenty z nauczaniem na odległość; W. Duch będąc w Singapurze odbył szereg wideokonferencji, wygłaszając referat na konferencji Polskiego Towarzystwa Kognitywistycznego w październiku 2004, występując jako recenzent pracy doktorskiej na UMCS w Lublinie, oraz prowadząc kilkakrotnie seminaria doktoranckie na UMK.

### **D 1.5) Uzyskane nagrody o znaczeniu międzynarodowym i ogólnokrajowym.**

1. Praca na temat ekstrakcji reguł logicznych z danych empirycznych została umieszczona na okładce *Proceedings of IEEE*, najbardziej prestiżowego pisma IEEE (współautorami są R. Setiono, Singapore i J. Żurada, Louisville), numer z maja 2004, oraz wysunięta do nagrody im. Donalda Finka.

### **D1.6) Inne ważniejsze osiągnięcia.**

Opisane z załączniku 2b

### **D2. Informacja o upowszechnianiu i popularyzacji wyników działalności jednostki.**

Braliśmy udział w licznych konferencjach; szczegóły są w załączniku 2b.