

SPRAWOZDANIE Z DZIAŁALNOŚCI NAUKOWO-BADAWCZEJ KATEDRY INFORMATYKI STOSOWANEJ UMK W ROKU 2009

I. TEMATY BADAWCZE

1. Liczba realizowanych tematów.

- W ramach 3 zadań (grup tematycznych) w 2009 roku realizowaliśmy 18 tematów.

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 0.

4. Z liczby tematów przekazanych do wdrożenia, w 2009 r. wdrożono:

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

- W tym roku nie wdrożono wyników nowych tematów, ale przewidujemy w niedługim czasie wdrożenie pakietu programów Intemi przeznaczonego do data mining, który powstaje w oparciu o prowadzone przez nas badania.

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

- nie zaniechano żadnego tematu.

6. Liczba realizowanych grantów MNiSW

- Nie realizujemy sami obecnie żadnego grantu MNiSW.
- Braliśmy udział w grantie KBN „Biblioteka InfoSel++ (Information Selection Library in C++) jako narzędzie wstępnego przetwarzania danych” kierowanym przez dr J. Biesiadę z Politechniki Śląskiej, zakończonym w 2009 roku.
- Otrzymaliśmy 4 granty marszałka woj. Kujawsko-Pomorskiego dla doktorantów KIS (2009), w sumie 120.000 zł.
- J. Meller J, P. Matykiewicz, R. Adamczak i W. Duch brali w 2009 roku udział w realizacji kilku grantów w Children’s Hospital Research Foundation w Cincinnati.
- Granty habilitacyjne pobierali: N. Jankowski i R. Adamczak

II. CZĘŚĆ OPISOWA

II.1. Przyczyny zaniechania tematów prowadzonych i rozpoczętych w 2009 roku.

W 2009 roku nie zaniechano realizacji żadnego tematu.

II.2. Krótka charakterystyka i podsumowanie wyników uzyskanych w 2009 r.

A) Inteligencja obliczeniowa (computational intelligence)

Przedstawiamy listę tematów i główne osiągnięcia z nimi związane:

1. **Meta-uczenie.** Prowadzono prace nad nowym pakietem Intemi, który stanowić będzie nową generację programów data mining, zdolnych do automatycznego odkrywania interesujących modeli danych w oparciu o meta-uczenie, automatyczny wybór najlepszych alternatywnych modeli dla danego punktu złożoności/dokładności. Do 38-ego konkursu grantów MNiSW K. Grąbczewski złożył wniosek o grant habilitacyjny pt. „Meta-uczenie w indukcji drzew decyzji”, zatwierdzony na początku 2010 roku. N. Jankowski złożył wniosek o grant zwykły, który nie został zatwierdzony pomimo bardzo dobrej oceny, poprawiona wersja złożona została w kolejnym konkursie w 2010 roku. Meta-uczenie było tematem tutorialu i zaproszonego referatu, który przedstawił W. Duch na 16th International Conference on Neural Information Processing (ICONIP 2009) w Bangkoku. Na tematy związane z meta-uczeniem i projektem Intemi napisaliśmy dłuższe prace, które zostały wysłane do czasopism międzynarodowych, na konferencje oraz zostaną opublikowane jako rozdziały w książce. Przygotowujemy zredagowaną książkę, dotyczącą różnych strategii meta-uczenia, przewidujemy jej publikację w 2010 roku w serii „Computational Intelligence” Springer.
 - Jankowski N, Grąbczewski K, Universal meta-learning architecture and algorithms. In Duch W, Grąbczewski K, Jankowski N, editors, *Meta-learning in Computational Intelligence*, Studies in Computational Intelligence, Springer, 2009 (przyjęte).
 - Grąbczewski K, Jankowski N, Efficient and friendly environment for computational intelligence. *Data & Knowledge Engineering*, 41 stron, 2009 (wysłane).
 - Jankowski N, Grąbczewski K, Increasing efficiency of meta-learning with complexity control. *Data Mining and Knowledge Discovery* (wysłane).
 - Jankowski N. and Grąbczewski K. Increasing efficiency of data mining systems by machine unification and double machine cache. In *Artificial Intelligence and Soft Computing, Lecture Notes in Computer Science* (wysłane).
 - Grąbczewski K. and Jankowski N. Task management in advanced computational intelligence system. In *Artificial Intelligence and Soft Computing, Lecture Notes in Computer Science* (wysłane).
 - Maszczyk T, Grochowski M, Duch W, Discovering Data Structures using Meta-learning, *Visualization and Constructive Neural Networks*, Book chapter, Springer (w druku).
2. **Algorytmy adaptacji.** Rozwijano dalej nowe algorytmy dla systemów uczących się, w szczególności algorytmy oparte na idei k-separowalności, które pozwalają na określenie nowego celu uczenia się sieci neuronowych i innych systemów adaptacyjnych, oraz charakteryzację problemów nieseparowalnych liniowo na klasy o różnej złożoności. Wprowadzono rozszerzenie tej idei na q-separowalność i zbadano przejście od sytuacji k-separowalnych do q-separowalnych. Temat ten związany jest z planowanym doktoratem M. Grochowskiego, którego przewód otwarty został w styczniu 2010 roku przed Radą Naukową Instytutu Podstaw Informatyki PAN. Nowe cele uczenia i nowe algorytmy pozwalają na uczenie się w przypadkach trudnych, odkrywając bardzo proste i dokładne modele i pozwalając na odkrywanie struktur danych i ich wizualizację. Obecnie realizowanych jest kilka wersji algorytmów dla k-separowalności. Opracowano również (wraz z T. Maszczykiem) bardzo interesującą metodę bazującą na przypadkowych projekcjach, które ma ciekawe neurobiologiczne uzasadnienie; liczymy na to, że stanie się ona równie ważna jak wsteczna propagacja.

- M. Grochowski and W. Duch. Constrained learning vector quantization or relaxed k-separability. *Lecture Notes in Computer Science*, 5768:151–160, 2009 (10 pt).
 - M. Grochowski, W. Duch. Constructive Neural Network Algorithms that Solve Highly Non-Separable Problems. W: *Constructive Neural Networks*, *Studies in Computational Intelligence*, vol. 258, str. 49–70, Springer, 2009 (10 pt).
 - W. Duch and T. Maszczyk. Almost random projection machine. *Lecture Notes in Computer Science*, 5768:789–798, 2009 (10 pt).
 - T. Maszczyk, M. Grochowski, W. Duch. Discovering data structures using meta-learning, visualization and constructive neural networks. In *Advances in Machine Learning, Studies in Computational Intelligence vol. 263*, Springer, 2010 (w druku).
 - W. Duch, T. Maszczyk, M. Grochowski, Discovering Data Structures using Meta-learning, Visualization and Constructive Neural Networks. *Studies in Computational Intelligence Vol. 262* (w druku).
3. **Selekcja informacji.** W grudniu 2009 roku zakończył się grant MNiSW na temat metod selekcji informacji, w którym braliśmy udział. Kierownikiem tego grantu jest dr J. Biesiada, głównym celem było opracowanie Biblioteka InfoSel++ (Information Selection Library in C++), która wraz z dokumentacją jest obecnie prawie gotowa do udostępnienia. Część tych algorytmów zostanie zintegrowana w systemie Intemi.
- Blachnik M, Duch W, Kachel A, Biesiada J. (2009). *Feature Selection for High-Dimensional Data: A Kolmogorov-Smirnov Class Correlation-Based Filter*. Symposium on Methods of Artificial Intelligence, 18-19 November 2009, Gliwice, Poland, str. 33-40.

Prace nad wyborem i selekcją cech doprowadziły nas do nowego, bardzo ciekawego pomysłu systemów uczących się, które uczą się nie tylko na własnych błędach ale też uczą się od innych, konstruując nowe, przydatne cechy na podstawie analizy powstałych modeli. W rezultacie w rozszerzonej przestrzeni cech prawie każdy algorytm osiąga dobre rezultaty. Pozwala to też spojrzeć na wyniki bardzo popularnych obecnie maszyn opartych na wektorach wsparcia (Support Vector Machines, SVM) z nowego punktu widzenia, który nie tylko pomaga w tworzeniu lepszych modeli danych ale pozwala na ich łatwą interpretację. W pierwszej pracy, którą zdążyliśmy opublikować na ten temat nową kategorię maszyn nazwaliśmy „Uniwersalnymi maszynami uczącymi”. Temat ten związany jest z planowanym doktoratem T. Maszczyka, którego przewód otwarty został w 2009 roku przed Radą Naukową Instytutu Podstaw Informatyki PAN.

- W. Duch and T. Maszczyk. Universal learning machines. *Lecture Notes in Computer Science*, 5864:206–215, 2009 (10 pt).
4. **Analiza układów dynamicznych.** W pracach z Krzysztofem Doboszem rozwinęliśmy rozmytą dynamikę symboliczną, nowe podejście do wizualizacji trajektorii w układach dynamicznych, po raz pierwszy możemy zobaczyć krajobraz atraktorów realistycznych symulacji neurodynamicznych i scharakteryzować ich własności. Praca na ten temat prezentowana była na konferencji „2nd International Conference on Cognitive Neurodynamics” w Hangzhou, 11/2009, udział prof. Ducha wsparty został grantem z „Tamagawa-Riken Dynamic Brain Project”, Japonia, na przelot do Chin i udział w spotkaniu redakcji pisma „Cognitive Neurodynamics” (Springer). W ramach współpracy COST metody te będą stosowane do analizy wielowymiarowych sygnałów, w tym sygnałów EEG. Opublikowany został dłuższy artykuł w czasopiśmie „Neural Networks”, w którym oprócz analizy sygnałów EEG nowa metoda została wykorzystana do analizy złożonych układów neurodynamicznych, w tym sztucznych modeli neuronowych zaimplementowanych w symulatorze Emergent. W szczególności przebadany został model dysleksji, w którym skupiliśmy się na wizualizacji dynamiki atraktorowej przy użyciu nowej metody. Badania te stały się podstawą do opublikowania wstępnego artykułu na temat analizy dynamiki atraktorowej układów neurodynamicznych, w szczególności badania wielkości oraz głębokości basenów atrakcji powstałych w procesie uczenia sztucznych, biologicznie inspirowanych modeli. Pracujemy nad rozszerzeniem tego wstępnego artykułu, który docelowo ma zostać opublikowany w czasopiśmie „Cognitive Neurodynamics”. W szczególności planowane jest wprowadzenie nowych miar charakteryzujących baseny atrakcji jak również porównanie metody z innymi technikami analizy sygnałów wielowymiarowych za pomocą map rekurencji (recurrence plots).

- K. Dobosz and W. Duch. Fuzzy symbolic dynamics for neurodynamical systems. *Neural Networks*, <http://dx.doi.org/10.1016/j.neunet.2009.12.005>, 2009 (24 pt).
- W. Duch and K. Dobosz. Attractors in neurodynamical systems. *Cognitive Neurodynamics, Lecture Notes in Computer Science 2010* (w druku).

5. Zastosowania metod inteligencji obliczeniowej.

Na konferencji International Conference on Artificial Neural Networks (ICANN'09), Limassol, Cypr, 09.14-17, W. Duch był współorganizatorem dwóch workshopów i konkursów: z Vladimirem Brusicem (Harvard University) "Machine learning in immunology competition", i z Igozem Tetko (Helmholtz Zentrum, Monachium) i Terry W. Schultzem (University of Tennessee) "Environmental Toxicity Prediction Challenge", z nagrodami po 1000 Euro. Publikacje omawiające wyniki tych konkursów pojawią się w 2010 roku.

Do konkursu projektów 7PR UE złożyliśmy na początku 2009 roku projekt STREP „Data integration and benchmarking of in vitro experiments for PRIORitization of high concerns substances” (iPRIOR) przygotowany został przy współpracy z Helmholtz Zentrum München, German Research Center for Environmental Health, Monachium (koordynator), Radboud University, Nijmegen, Holandia, oraz DMPKORE consultancy, Niemcy; niestety nie będzie sfinansowany.

Złożono we wrześniu 2009 roku projekt sieci doskonałości (network of excellence) "Molecule Understanding and Property Prediction via Information Technology", koordynowany przez Consiglio Nazionale delle Ricerche, Fondazione Istituto Italiano di Tecnologia, napisany został przy współpracy z KIS UMK, Université de Genève, Institut national de recherche en informatique et en automatique; European Molecular Biology Laboratory - European Bioinformatics Institute; National University of Ireland, Galway; Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária; Ludwig-Maximilians-Universität München; Universidad Autónoma de Madrid i firmą InhibOx Limited. Czekamy na jego ocenę.

Doktorant P. Matykiewicz zaangażowany jest w projekty medyczne dotyczące systemu wspomagającego wybór leków:

- Pestian JP, Spencer M, Matykiewicz P, Zhange K, Vinks S, Glauser T. Personalized drug selection using advanced clinical decision support. *Biomedical Informatics Insights 2: 1-11*, 2009 (2 pt, Open access, new journal).

6. Pozostałe prace w ramach inteligencji obliczeniowej.

Trwają dalsze prace nad regułami prototypowymi, ideą rozwiniętą głównie w naszej grupie w ostatnich latach.

- Grudzinski K, Grochowski M, Duch W. Pruning classification rules with reference vector selection methods. In *ICA/SC, Lecture Notes in Computer Science*. Springer, 2010 (wysłane).

Nową metodę wizualizacji danych, pozwalającą zachować maksymalnie dużo ścisłych odległości w oparciu o triangulację, opisano w artykule wysłanym na konferencję. Metoda powinna być konkurencyjna w stosunku do szeroko stosowanej metody skalowania wielowymiarowego.

- Maszczyk T, Duch W. Triangular visualization. In *ICA/SC, Lecture Notes in Computer Science*. Springer, 2010 (w druku).

Doktorant KIS, Leszek Rybicki, odbył 2-miesięczny staż w Lab. Prof. Jun Tani, Brain Science Institute, RIKEN, Japonia, 8-9.2009, pracując nad metodami uczenia z krytykiem w zastosowaniu do nauki różnych zachowań robotów. Celem jego doktoratu, który powinien zostać obroniony w 2010 roku, jest zbadaniem transferu umiejętności pomiędzy wielorakimi zadaniami w wyniku uczenia robota.

- Rybicki L, Sugita Y, Tani J, Reinforcement Learning of Multiple Tasks Using Parametric Bias (w druku, konferencja IJCNN).

W ramach współpracy z Zakładem Fizyki Medycznej (ZFMED) wydziału Fizyki UMK, A. Naud przedstawił prezentację na temat analizy tekstur i segmentacji obrazów medycznych, oraz prezentację na temat języka modelowania UML 2.0 oraz narzędzi CASE w ramach spotkania z zespołem ds. „Analizy danych” ZFMED. Badania mające na celu analizy obrazów 3-D OCT są w toku. Zakończono pracę magisterską Adama Sikory „Rozpoznanie obiektów w obrazach wideo z kamery” (opiekun: W. Duch).

B) Informatyka neurokognitywna i kognitywistyka.

Informatyka neurokognitywna jest pojęciem wprowadzonym przez W. Ducha, nową dziedziną zmierzającą do wykorzystania wiedzy dotyczącej mechanizmów poznawczych i ich neuronowej realizacji do tworzenia praktycznych algorytmów przydatnych do rozwiązywania problemów, które nie są efektywnie algorytmizowalne. W 2010 roku znacznie wzrosło zainteresowanie metodami obrazowania pozwalającymi na zrozumienie jak realizowane są wyższe czynności poznawcze, można się spodziewać szybkiego rozwoju wiedzy w tej dziedzinie. Podjęliśmy tu następujące inicjatywy:

Projekt sieci doskonałości (Network of Excellence) „Virtual Institute on Cognitive Systems” złożony został do konkursu w 7 PR. Projekt planował utworzenie wirtualnego instytutu systemów kognitywnych, koordynatorem miał być Institute of Communications and Computer Systems – National Technical University of Athens. Udział w tym projekcie planowały również grupy badawcze z King’s College London, Institute of Computer Science, Foundation for Research and Technology Hellas, University of Sunderland, UK; Italian Institute of Technology, Graz University of Technology, University of Skovde, University of Hertfordshire, Institut für Angewandte Informatik und Formale Beschreibungsverfahren (AIFB), University of Karlsruhe; Fraunhofer Institute for Computer Graphics Research Rostock; Oxford University Computing Laboratory. Projekt nie uzyskał finansowania ale w 2010 roku powinien zostać przedstawiony na nowo.

W 2009 roku W. Duch był członkiem trzech sieci europejskich COST: Advanced Methods for the Estimation of Human Brain Activity and Connectivity (Neuromath), na koszt tego programu biorąc udział w spotkaniu i workshopie w Leuven w marcu 2009 roku, gdzie przedstawił wyniki badań nad rozmytą dynamiką symboliczną; Consciousness: A transdisciplinary, integrated approach, na koszt tego programu biorąc udział w spotkaniu i workshopie w Berlinie „Coma and Consciousness Clinical, Societal and Ethical Implications”, gdzie przedstawił dwie prace, na temat autyzmu i słuchowej agnozji wyobraźniowej; oraz Electric neuronal oscillations and cognition (ENOC), która w 2009 roku zakończyła swoją działalność. Został też członkiem EUCogII, 2nd European Network for the Advancement of Artificial Cognitive Systems, Interaction and Robotics; spotkanie tej grupy odbędzie się w styczniu 2010 w Zurichu.

W szczególności w ramach tej grupy tematów:

1. **Informatyka neurokognitywna:** Napisano artykuł będący manifestem informatyki neurokognitywnej, przedstawiony w referacie plenarnym otwierającym konferencję 8th International Conference on Information and Management Sciences, Kunming-Banna, Yunan, Chiny 07.20-28. W. Duch pomógł zredagować materiały konferencyjne i został wybrany co-chairmanem kolejnej konferencji z tej serii.
 - Duch W, Neurocognitive Informatics Manifesto. In: Series of Information and Management Sciences, California Polytechnic State University, 8th Int Conf on Information and Management Sciences (IMS 2009), Kunming-Banna, Yunan, China, str. 264-282.
 - Wang H-F, Neace M.B, Zhu Y, Duch W, Proceedings of the Eight International Conference on Information and Management Sciences, Kunming-Banna, China, July 20-28, 2009. Series of Information and Management Sciences, California Polytechnic State University.

Dokonano przeglądu istniejących architektur kognitywnych w rozdziale do książki:

 - Duch W, Architektury kognitywne. W: Neurocybernetyka teoretyczna (red. R. Tadeusiewicz), Wydawnictwa Uniwersytetu Warszawskiego 2010 (w druku).
2. **Analiza języka naturalnego.** Neurokognitywne inspiracje, integrujące pamięć rozpoznawczą, semantyczną i epizodyczną, oraz idee dotyczące rozchodzenia się aktywacji neuronowej i ich związek z procesami skojarzeniowymi zastosowano do analizy tekstów, szczególnie tekstów medycznych. W oparciu o projekt W. Ducha dotyczący neurokognitywnych metod w analizie tekstów powstało konsorcjum, koordynowane przez Helsinki University of Technology, przy udziale University of Tampere, Finlandia; Kungliga Tekniska Högskolan KTH Szwecja; Comenius University CU Słowacja; Institute of Language and Speech Processing ILSP Grecja; Sulake Corporation, Finlandia; Cybula UK oraz Cincinnati Children’s Hospital Medical Center. Złożono Integrated Project z budżetem 8 milionów Euro, ale projekt nie będzie finansowany, za to w 2010 roku przewidujemy złożenie mniejszego projektu STREP opartego na podobnym wniosku. W. Duch wygłosił na ten temat szereg referatów plenarnych, na: Ukazały się następujące prace:

- P. Matykiewicz, W. Duch, P.M. Zender, K.A. Crutcher, and J.P. Pestician. Neurocognitive approach to clustering of pubmed query results. *Lecture Notes in Computer Science*, 5507:70–79, 2009 (10 pt).
- Matykiewicz P, Duch W, Pestician J.P, Clustering semantic spaces of suicide notes and newsgroups articles. *Proceedings of BioNLP Workshop, Association for Computational Linguistics*, str. 179-184, 2009.

Ogólny mechanizm zachodzących w mózgu procesów w czasie rozumienia słów, w szczególności roli prawej półkuli mózgu w procesach rozwiązywania zadań, opisano w dłuższej publikacji; inspiracje z tego płynące będą podstawą nowego projektu neurolingwistycznego z udziałem partnerów europejskich. Rozwijano ideę wektorów opisu koncepcji i jej rozszerzenia w zastosowaniu do reprezentacji semantyki i tworzenia pamięci semantycznej. Rozwijano algorytmy zbierania informacji do pamięci semantycznych z encyklopedii, słowników i tekstów bez struktury, dodając mechanizmy aktywnego uczenia oraz inicjowania aktywnych dialogów w grze w 20 pytań w celu zdobycia brakującej informacji. Wyniki są częścią zakończonej w 2009 roku pracy doktorskiej mgr J. Szymańskiego „Wyszukiwanie kontekstowe w pamięci semantycznej”, obronionej przed Radą Naukową Wydziału Elektroniki i Informatyki Politechniki Gdańskiej (opiekun: W. Duch). Zakończono też dwie prace magisterskie związane z tym tematem: J. Rusiłko, Pamięci semantyczne jako podstawa do sterowania chatterbotem, oraz M. Lamparskiego „Semantyczne podobieństwo stron internetowych” (opiekun: W. Duch).

- Duch W, Umysł, świadomość i działania twórcze. *Kognitywistyka i Media w Edukacji* 1-2, 9-40, 2008 (ukazało się w 2009).

Neurokognitywne podejście do symulacji procesów tworzenia nowych słów zastosowano w praktyce w publicznie dostępnym serwerze. Mgr Pilichowski kończy pracę doktorską na ten temat. Przeanalizowano zachodzące w mózgu procesy w czasie rozumienia słów, w szczególności eksperymenty psychologiczne z wykorzystaniem torowania. Jest to pierwszy krok w stronę autentycznych możliwości twórczych komputerów.

- Pilichowski M, Duch W, Neurocognitive Approach to Creativity in the Domain of Word-invention. *Lecture Notes in Computer Science* 5507, str. 88–96, 2009 (10 pt).

3. **Analiza sygnałów.** Przy współpracy z grupą z Belgradu, oraz Instytutem Biocybernetyki i Inżynierii Biomedycznej PAN pracowaliśmy nad nowymi sposobami analizy wielowymiarowych sygnałów przy użyciu technik analizy obrazu. Planujemy też zastosowanie metod dynamiki rozmytej do danych tego rodzaju.

- Jovanovic A, Perovic A, Klonowski W, Duch W, Dordević Z, Spasić S, Detection of Structural Features in Biological Signals. *Journal of Signal Processing Systems* (Springer), 10.1007/s11265-009-0407-7 (15 pt, poprzednio *Journal of VLSI Signal Processing Systems for Signal, Image, and Video Technology*).
- Perovic A, Klonowski W, Duch W, Djordjevic Z, Jovanovic A, Detection of structural features in brain signals and causality tests. *COST Consciousness: a transdisciplinary, integrated approach*, Cyprus 2009 (poster P04).
- Klonowski W, Duch W, Djordjevic Z, Spasic S, Perovic A, Jovanovic A, Automatic recognition of features in biological signals. *COST Neuromath: Advanced Methods for the Estimation of Human Brain Activity and Connectivity*, 09/2009.
- Duch W, Klonowski W, Perovic A, Jovanovic A, Some computational aspects of the Brain Computer Interfaces based on Inner Music. *COST Neuromath: Advanced Methods for the Estimation of Human Brain Activity and Connectivity*, Leuven 03/2009
- Klonowski W, Duch W, Perovic A, Jovanovic A, Automatic detection of spectroscopic features. *Advanced Methods for the Estimation of Human Brain Activity and Connectivity*, Leuven 03/2009.

4. **Autyzm.** Wysłano nową hipotezę i w oparciu o nią napisano i wysłano wniosek „Autyzm: zintegrowana teoria” do MNiSW o grant zwyczajny proponując stworzenie zespołu, który zająłby się wszystkimi aspektami problemu, od genów i białek, przez budowę i własności neuronów, do wyników symulacji komputerowych, pozwalających na zbadanie warunków, w jakich powstają problemy z przeniesieniem uwagi charakterystyczne dla autyzmu jaki i skupieniem uwagi charaktery-

styczne dla ADHD. Pomimo oceny 9.0 (wyróżniający się) finansowanie nie zostało przyznane, napisano odwołanie i złożono nieco rozszerzony grant powtórnie.

W. Duch przedstawił hipotezę i wstępne wyniki na temat autyzmu w referacie „Autism, ion channels and computer simulations” na konferencji BIT 2009 w Toruniu, konferencji COST Coma and Consciousness Clinical, Societal and Ethical Implications, Berlin, 06.04-05, oraz w tutorialu i zaproszonym referacie w czasie workshopu zorganizowanego przez Centre of Research for Computational Sciences & Informatics in Biology, Bioindustry, Environment, Agriculture & Healthcare (CRYSTAL), University of Malaya, 2009.10.26-29. Publikacje są w przygotowaniu.

- W. Duch. Consciousness and attention in autism spectrum disorders. W: *Coma and Consciousness. Clinical, Societal and Ethical Implications*, str. 46. Satellite Symposium of the 13th Annual Meeting of the Association for the Scientific Studies of Consciousness, Berlin, 4-5.06.2009.
5. **Agnozja wyobraźniowa.** W ramach badań neurokognitywnych napisano wstępne artykuły dotyczące nowej formy amuzji wyobraźniowej, wstępne wyniki przedstawiono na konferencji „Body, perception and awareness. Motor and multimodal perspectives” (UMK Torun, 11.23-25) w referacie plenarnym. Planujemy przy współpracy z grupą z Belgradu badania eksperymentalne w tej dziedzinie. Mamy nadzieję na zastosowanie tych idei do wykrywania stanów mózgu powstałych w wyniku wyobraźni dźwięków (muzyki). Może to zapoczątkować nową gałąź badań w tej dziedzinie.
- W. Duch. Imagery agnosia: what goes on in my head? In *Coma and Consciousness, Clinical, Societal and Ethical Implications*. Satellite Symposium of the 13th Annual Meeting of the Association for the Scientific Studies of Consciousness, Berlin, 4-5 June 2009, page 46, 2009.
 - W. Klonowski, W. Duch, Perovic A, Jovanovic A, Some Computational Aspects of the Brain Computer Interfaces Based on Inner Music. *Computational Intelligence and Neuroscience*, Vol 2009, Article ID 950403, 9 str, 2009. doi:10.1155/2009/950403 (Open Access, nowe pismo 2pt).
6. **Zagadnienia neurologiczne.** Współpracujemy z Katedrą Neurologii Dorosłych AM w Gdańsku, oraz neonatologiami z tamtejszej akademii. Utworzyliśmy porozumienie badawcze pomiędzy UMK, Politechniką Gdańską oraz Gdańskim Uniwersytem Medycznym, napisaliśmy projekt grantu dotyczącego monitorowania i ukierunkowania procesów rozwojowych niemowląt, który chcemy złożyć w 2010 roku jako grant zamawiany. Pracowaliśmy też nad parametrycznym modelem generatora rytmów oddechowych w pniu mózgu i analizie wpływu jego uszkodzeń na rytmy oddechowe, co pozwoli na modelowanie danych spirograficznych. Na ukończeniu jest książka na temat pnia mózgu, napisana głównie przez Dariusza Mikołajewskiego, doktoranta W. Duchy, przy współpracy z neurologami z Gdańska i innymi osobami.
- Osiński G, Świerkocka-Miastkowska M, Dobosz K, Numerical simulations of respiratory rhythms and brain spirography in coma. In: *Coma and Consciousness. Clinical, Societal and Ethical Implications. Satellite Symposium of the 13th Annual Meeting of the Association for the Scientific Studies of Consciousness*, Berlin, 4-5 June 2009, pp. 46.
7. **Neurofilozofia.** Analiza ostatnich odkryć dotyczących sposobu podejmowania decyzji przez mózgi i związku tych odkryć z rozumieniem pojęcia wolnej woli i osobistej odpowiedzialności przedstawiona została w dwóch pracach i referacie plenarnym na konferencji „Body, perception and awareness. Motor and multimodal perspectives” w listopadzie 2009, oraz dwóch referatach, na Uniwersytecie Gdańskim i w Instytucie Katalizy PAN w Krakowie. Ze względu na wielką wagę i zainteresowanie tym tematem dalsze konsekwencje rozważań nad procesami podejmowania decyzji dla filozofii i edukacji będą tematem kolejnych referatów i publikacji w najbliższym czasie.
- Duch W, Free Will and the Brain: Are we automata? In: *Ethics and Science for the Environment*, 3rd European Forum. Ed. M.Jaskula and B. Buszewski, Societas Humboldtiana Polonorum (w druku).
 - Duch W. (2010) Czy jesteśmy automatami? Mózgi, wolna wola i odpowiedzialność. Rozdział w książce pod red. P. Francuza, 36 stron (w druku).

Ponadto napisano szereg artykułów popularnych, nagrano program telewizyjny i wywiady radiowe; szczegóły podane są w Zał. 2b.

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

C1) Prof. J. Wasilewski i dr S. Zelek prowadzili badania w ramach tematu: „Struktura energetyczna małych cząsteczek”, zajmując się wybranymi aspektami teorii funkcyjałów gęstości (DFT – Density Functional Theory) i jej zastosowaniami do obliczeń struktury energetycznej i widm elektronowo-oscylacyjnych cząsteczek. Uczestniczyli również w badaniach kierowanych przez prof. K. Jankowskiego z Instytutu Fizyki UMK, dotyczących tej tematyki. W szczególności:

1. Kontynuowano badania relacji między przestrzeniami orbitalnymi otrzymywanymi w metodach: Hartree-Focka, Bruecknera, CASSCF i w różnych wariantach teorii funkcyjałów gęstości (DFT). Przedmiotem szczególnego zainteresowania była ewolucja indeksów podobieństwa przestrzeni orbitalnych wzdłuż krzywych potencjalnych cząsteczek dwuatomowych, na przykładzie izoelektronowej serii CO, NO⁺, CN⁻. Pokazano, że w dość szerokim otoczeniu geometrii równowagowych przestrzenie orbitali Kohna-Shama zachowują bliskie podobieństwo do przestrzeni orbitali Bruecknera i mają istotny charakter wielokofiguracyjny. Dzięki temu w ramach różnych wariantów DFT uzyskuje się znacznie bardziej realistyczny niż w metodzie Hartree-Focka opis energetyki oscylacji molekularnych. Etap badań w ramach metod spinowo-ograniczonych został zakończony, wyniki podsumowano w publikacji:

- Wasilewski J, S. Zelek, Evolution of orbital spaces along potential curves for diatomic molecules. A comparative study of Hartree-Fock, Kohn-Sham, Brueckner and multiconfigurational orbital spaces, J. Mol. Structure (Theochem), 905: 24-33 (2009)

2. W ramach współpracy z zespołem prof. K. Jankowskiego z Instytutu Fizyki UMK kontynuowano badania nad strukturą efektów korelacji elektronowej w różnych modelach potencjałów wymiennokorelacyjnych w teorii funkcyjałów gęstości (DFT) i jej relacją do opisu w ramach standardowych metod mechaniki kwantowej: rachunku zaburzeń MPx i metod sprzężonych klasterów CC, BCC. Analizę tych efektów oparto nie na kryteriach energetycznych (jak czyni się to zazwyczaj), ale na szczegółowej analizie radialnego rozkładu gęstości elektronowej, na przykładzie stanu podstawowego atomu neonu. Ten etap badań został zakończony, praca została opublikowana.

- Jankowski K, Nowakowski K, Grabowski I, Wasilewski J, Coverage of dynamic correlation effects by DFT functionals: Density-based analysis for neon, Journal of Chemical Physics 130: 164102-1-9 (2009)

Kontynuowane są badania dla bardziej złożonych układów, wyniki dla atomu argonu zostały wysłane do publikacji:

- K. Jankowski, K. Nowakowski, I. Grabowski, J. Wasilewski, Ab initio dynamic correlation effects in density functional theories: A density based study for argon. Theoret. Chem. Accounts (2009) – w druku, <http://dx.doi.org/10.1007/s00214-009-0638-5>

C2) Dr hab. J. Meller przebywał w KIS w czerwcu, a dr R. Adamczak odwiedził Uniwersytet Cincinnati w lipcu i sierpniu 2009. Obaj prowadzili badania nad zastosowaniem metod bioinformatyki i biologii obliczeniowej do problemu rozpoznawania struktur i funkcji białek, między innymi przebadano zmianę konformacji białkowych związaną z ich naturalną ruchliwością, prowadzono badania nad oceną jakości modeli białkowych generowanych przez metody przewidujące struktury trzeciorzędowe, dokonano analizy podobieństwa genomów (ang. synteny) a także identyfikacji markerów stanów chorobowych i fenotypicznych w danych klinicznych i genomicznych dotyczących polimorfizmów i profilów ekspresji genów.

R. Adamczak i W. Duch przy współpracy z W. Nowakiem z IF UMK zorganizowali w czerwcu 2009 kolejną konferencję „Bioinformatics in Torun” (BIT 2009), na której dr hab. J. Meller miał kilka wykładów. Rada Naukowa Instytutu Biocybernetyki i Inżynierii Biomedycznej PAN w Warszawie IBIB rozpoczęła procedurę przyznania dr hab. J. Mellerowi tytułu profesora. Ta sama Rada przedstawiła opinie o wysokim stopniu zaawansowania prac nad habilitacją dr Adamczaka, który pobiera obecnie stypendium habilitacyjne.

W szczególności:

1. Metody teoretycznego badania własności białek:

- B. Kizhakke Vallat, J. Pillardy, P. Májek, J. Meller, T. Blom, B. Cao, R. Elber, Building and assessing atomic models of proteins from structural templates: learning and benchmarks. *Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics* 76(4):930–945, 2009 (24 pt).
- K. Swaminathan, J. Meller: Assessment of One- and Two-Class SVMs in the Prediction of Phosphorylation in Proteins. The 2009 International Conference on Bioinformatics & Computational Biology (BIOCOMP 2009), CSREA Press, str. 37-42
- R. Petrenko, M. Dickerson, R. Naik, S. Patnaik, T. Beck, J. Meller: Entropic Force in Drosophila Resilin: Molecular Dynamics Study. The 2009 International Conference on Bioinformatics & Computational Biology (BIOCOMP 2009), CSREA Press, str. 598-603
- Swaminathan K, Adamczak R, Porollo A and Meller J, Enhanced prediction of conformational flexibility and phosphorylation in proteins, „Advances in Computational Biology” in book series: *Advances in Experimental Medicine and Biology*, (Springer) (w druku).

Prowadzono badania nad wpływem redukcji wymiarowości macierzy PSSM (Protein Secondary Structure Matrix) na przewidywania struktur drugorzędowych oraz solwatacji, wyniki przedstawiono w pracy:

- Adamczak R, Dimensionality reduction of PSSM matrix and its influence on secondary structure and relative solvent accessibility predictions, *World Academy Of Science, Engineering And Technology*, vol. 58, 657-664 (2009).
- Adamczak R, Pillardy J, Vallat B K, and Meller J, 1D-Jury: Fast and Accurate Method for Protein Model Quality Assessment, (poprawiana)

2. Symulacje procesów biologicznych.

Przeprowadzono szereg zaawansowanych symulacji procesów biologicznych dla białek, które pełnią istotną rolę w powstawaniu różnych rodzajów raka, oraz mechanizmami oddziaływania wirusów z membranami komórek. Prace te robione są w grupie, w skład której wchodzi w większości eksperymentatorzy.

- W.D. Haffey, Olga Mikhaylova, Jarek Meller, Ying Yi, Kenneth D Greis, and Maria F Czyzyk-Krzeska. Itraq proteomic identification of pVhl-dependent and -independent targets of eglN1 prolyl hydroxylase knockdown in renal carcinoma cells. *Advances in Enzyme Regulation*, 49(1):121–132, 2009 (15 pt).
- Ming Tan, Ming Xia, Yutao Chen, Weiming Bu, Rashmi S Hegde, Jarek Meller, Xuemei Li, and Xi Jiang. Conservation of carbohydrate binding interfaces: evidence of human hbga selection in norovirus evolution. *PLoS One*, 4(4):e5058, 2009 (IF~3.33 w 2009 roku, ale nie ma na liście).

3. Genomika:

Zbudowano i opisano ogólną platformę programową dla celów genomiki:

- K. Shinde, M. Phatak, J. Freudenberg, Jing Chen, Qian Li, Vineet Joshi, Zhen Hu, Krishnendu Ghosh, Jaroslaw Meller, and Mario Medvedovic. Genomics portals: integrative web-platform for mining genomics data. *BMC Genomics*, 11(1):27, 2010 (24 pt).

Badano procesy ekspresji genów i ich wpływ na procesy rozwojowe:

- Olufemi IS.-E., Snyder P.M., Smith K.L., Su Y.R., Reif M.C., **R. Adamczak, J. Meller**, A. G. Menon; Polymorphic Variants Alter Function of the Human Epithelial Sodium Channel α -subunit: Evidence for a Role in Hypertension (wysłana).

III. PUBLIKACJE

III.1. W 2009 roku pracownicy KIS opublikowali ogółem 77 prac, w tym:

Liczba prac opublikowanych w 2009	77
w tym:	
a) Oryginalne prace w pismach specjalistycznych	14
b) nie dotyczy	
c) Publikacje w innych recenzowanych pismach	6
e) Redakcja książek naukowych, tłumaczenia	1
Rozdziały w książkach	3
Artykuły, recenzje, popularno-naukowe i dydaktyczne	47
Prace magisterskie	6

III.2. Liczba prac przyjętych do druku: 5

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

Najważniejsze prace (max 5).

1. K. Dobosz and W. Duch. Fuzzy symbolic dynamics for neurodynamical systems. *Neural Networks*, <http://dx.doi.org/10.1016/j.neunet.2009.12.005>, 2009 (24 pt).
2. Pilichowski M, Duch W, Neurocognitive Approach to Creativity in the Domain of Word-invention. *Lecture Notes in Computer Science 5507*, str. 88–96, 2009 (10 pt).
3. W. Duch and T. Maszczyk. Universal learning machines. *Lecture Notes in Computer Science*, 5864:206–215, 2009 (10 pt).
4. K. Jankowski, K. Nowakowski, I. Grabowski, **J. Wasilewski**, Coverage of dynamic correlation effects by DFT functionals: Density-based analysis for neon. *J. Chemical Physics*, 130: 164102-1-9 (2009), <http://dx.doi.org/10.1063/1.3116157> (24 pt).
5. K. Shinde, M. Phatak, J. Freudenberg, J. Chen, Qian Li, V. Joshi, Z. Hu, K. Ghosh, **J. Meller**, M. Medvedovic. Genomics portals: integrative web-platform for mining genomics data. *BMC Genomics*, 11(1):27, 2010 (24 pt).

Finansowanie: poz. 1-4 działalność statutowa, poz. 5 grant NIH.

Pełny spis znajduje się w Załączniku 2b.