

О.В. Крючин, доцент, кандидат технических наук  
(ТГУ им. Г.Р. Державина, г. Тамбов)  
А.А. Воробьева, студент  
(ТГУ им. Г.Р. Державина, г. Тамбов)

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РЕКУРРЕНТНЫХ СЕТЕЙ ДЖОРДАНА В ХИМИЧЕСКИХ НАУКАХ

Как известно, технологии искусственных нейронных сетей (ИНС) широко используются во всех областях науки, где отсутствуют явно выраженные законы и закономерности, а большой упор делается на эмпирические данные. Однако, простота использования этого аппарата отнюдь не одинакова для различных сфер. Так, например, распознавание образа не вызывает особых проблем, поскольку биологический прототип легко справляется с этой задачей. Современные европейские алфавиты (латинский, кириллица и греческий) представлены набором простых символов, определить который не сложно. С подобной задачей справляется даже ребенок. В других областях, задачи гораздо более сложные. Например, распознать свойства химического соединения— отнюдь не тривиальная задача.

Тем не менее, в последние годы методика извлечения знаний из данных все больше набирает обороты, и технология ИНС активно начинает применяться в химических науках, в том числе и для распознавания химических свойств. Здесь неплохо показывают себя такой тип сетей, как рекуррентные, и в первую очередь — сеть Джордана.

Второй задачей, с которой, как показывают эксперименты, также успешно справляются сети Джордана, является моделирование протекания химических реакций. То есть ИНС в данном случае позволяет проводить вычислительные эксперименты, выступая в качестве химического компьютера.

Таким образом, технологии ИНС в целом и рекуррентные сети Джордана в частности позволяют значительно снизить трудовые и, как следствие финансовые, затраты в сфере синтетического анализа. Они позволяют избавить научных сотрудников от выполнения рутинных задач, которые в настоящее время отнимают значительную часть времени. Вместо этого люди могут сосредоточиться на более творческих задачах, предоставив выполнение рутинных задач ИНС.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Jordan, M. I. Serial order: A parallel distributed processing approach. // Institute for Cognitive Science Report 8604. — University of California, San Diego, 1986.
2. Puskorius G.V., Feldkamp L.A., Davis L.I. Dynamic neural network methods applied to onvehicle idle speed control // Proceedings of the IEEE: 1996 — vol. 84.