

*Е.Е. ЕРГОЖИН, И.Э. СУЛЕЙМЕНОВ, Г.А. МУН, Т.К. ДЖУМАДИЛОВ*

## **НЕЙРОННЫЕ СЕТИ И ПРОБЛЕМЫ СОВРЕМЕННОЙ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ**

Анализируется возможность реализации искусственных нейронных сетей в системах на основе электролитов. Показано, что ряд уже известных физико-химических систем такого типа можно интерпретировать на основе аналогии с нейронными сетями. Примером является донорно-акцепторная пара гидрогелей, вступающих в дистанционное взаимодействие, обусловленное переносом протона от одного образца к другому. Показано, что такая комбинация позволяет решить проблема считывания информации из структур молекулярного уровня организации.

В связи со значительными успехами в области теории и практики нейронных сетей в последнее время все активнее ставится вопрос о распространении понятий и методов, полученных в данной области на самые различные дисциплины.

Это представляется вполне обоснованным. Действительно, на современном этапе в большинстве дисциплин, так или иначе, используется категория сложного в трактовке, восходящей к работам И.Пригожина. Сложные системы в подавляющем большинстве случаев характеризуют-

ся разветвленной системой связей, которые неизменно связаны с существованием потоков энергии, вещества или информации, которыми обмениваются элементы системы.

С самых общих позиций, такие потоки можно рассматривать как аналоги сигналов, связывающих нейроны в сети. Поэтому не представляется удивительным, что представления теории нейронных сетей находят все более широкое применение в самых различных дисциплинах: при постепенном увеличении числа элементов в системе и росте плотности связей между ними любая из них рано или поздно превратится в некий, пусть и достаточно отделенный, аналог нейронной сети. Роль сигналов в ней будут играть соответствующие потоки вещества, энергии или информации. Любопытно отметить, что такая аналогия одной из первых была высказана в области экономики и гуманитарных наук. В качестве элементов нейронной сети, например, можно рассматривать субъекты рынка, а финансовые потоки между ними – как аналоги сигналов. С позиций нейронных сетей У.Эко [1] делает попытку интерпретировать не только особенности современной информационной среды, но и особенности реакции общества на те или иные «вызовы». В [2] было показано, что на основе представлений, развитых в теории нейронных сетей можно дать непротиворечивое естественнонаучное истолкование понятия «ноосфера», пригодное для построения математических моделей. Это позволило раскрыть механизм реакции человеческого общества на различные сверхслабые воздействия [2].

В области физической химии, химии высокомолекулярных соединений и биохимии применение методов теории нейронных сетей пока остается весьма ограниченным, что, однако не означает отсутствия потребности в анализе сложных систем. Действительно, любая система разветвленных реакций, перешедшая некий критический порог сложности, (например, биохимические процессы в живой клетке, образующие множественные петли обратной связи) может рассматриваться на основании аналогии с нейронной сетью. Это, в частности, делает правомочным использование термина «химический сигнал».

Далее, в [3,4] отмечалось, что ряд физико-химических систем, обладающих триггерными свойствами, может быть использован для созда-

ния физической (в противоположность компьютерным моделям) сети. При этом существенно, что количество нейронов в такой сети может быть сделано сопоставимым с их числом, характерным для головного мозга человека. Это становится возможным благодаря активно изучавшимся в последнее время процессам самоорганизации, протекающим, например, в ходе синтеза сшитых полимерных сеток [3]. Указанные процессы делают правомочным постановку вопроса о прямом синтезе нейронной сети, исключающим необходимость ее поэлементной сборки.

Создание такой сети, пригодной, в перспективе, для перезаписи человеческого сознания на искусственный носитель информации, рассматривается как сверхзадача всего научного направления, связанного с использованием нейронных сетей в физической химии. Для обоснования реалистичности такой постановки задачи на современном этапе целесообразно осуществить внедрение более простых разновидностей нейронных сетей, реализованных химическими средствами.

Примеры таких сетей рассматриваются в данной работе. Основной предпосылкой рассуждений является доказательство возможности создания нановычислителя на основе отдельной молекулы, данное в [4,5]. В этих работах было показано, что логические операции могут осуществляться за счет перемещения зарядов в пределах одной молекулы электролита или полиэлектролита.

Тем самым, появляется возможность для решения центральной задачи современной нанотехнологии, т.е. для создания нанопроцессора. Однако, для проведения вычислений требуется не только возможность собственно совершения логических операций тем или иным узлом, но также средства записи информации и ее считывания.

Использование химической нейронной сети позволяет сравнительно простыми средствами преодолеть эти трудности. Обратимся к рис.1а, на котором показана схема нейронной сети Хопфилда [6], являющейся на сегодняшний день одной из самых распространенных и хорошо изученных.

В данной сети каждый выход каждого нейрона связан петлями обратной связи со входами всех остальных, причем веса  $w_{ij}$ , с которыми суммируются сигналы, поступающие на входы

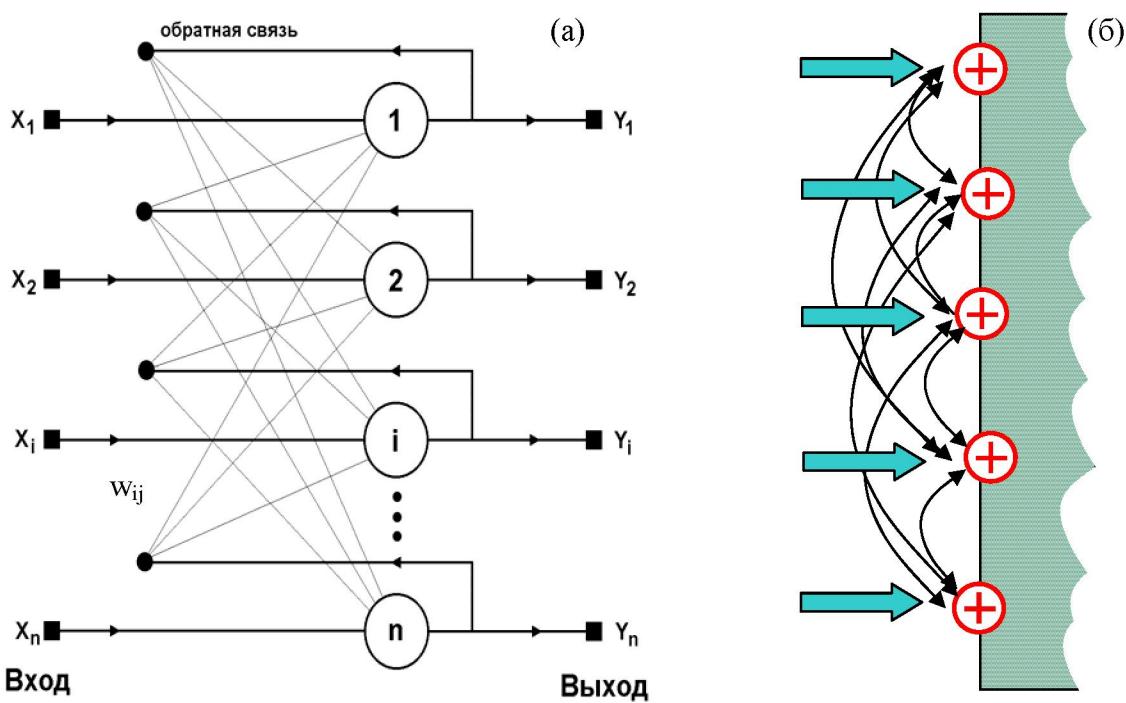


Рис.1. Сопоставление нейронной сети Хопфилда (а) и поведения электрического монослоя на поверхности сплошной полиэлектролитной сетки, со степенью диссоциации, задаваемой внешним воздействием (б).

отдельных нейронов, регулируются в процессе записи в сеть информации.

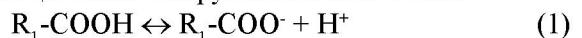
С точки зрения физической химии (данное обстоятельство впервые отмечается в данной работе) в качестве аналогов нейронных сетей Хопфилда может рассматриваться весьма и весьма широкий круг систем.

Рассмотрим для примера электрический монослой, который, в частности, может быть сформирован на поверхности полиэлектролитной сетки (геля или ионита) за счет эффекта дистанционного взаимодействия, обнаруженного в [7] и подробно описанного в [8]. Функциональные группы, которые могут быть размещены на поверхности сетки, обладают различными константами диссоциации, а также различной восприимчивостью к внешним воздействиям (излучение оптического или ультрафиолетового диапазона, температура, жесткое ионизирующее излучение, электрический ток и т.д.). Поэтому каждый участок поверхности сетки со сформированным монослоем можно рассматривать как элемент, воспринимающий внешний сигнал, причем восприимчивость является регулируемой величиной.

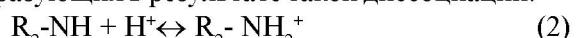
В схеме, представленной на рис.1б, предполагается, что заряд, отвечающий каждому из

отдельных участков поверхности сетки, приобретается вследствие того или иного внешнего воздействия. Например, это может быть «химический сигнал» [8], передаваемый от соседствующей стеки, с которой рассматриваемый образец вступает в дистанционное взаимодействие, связанное с переносом заряда от одного образца к другому (рис.2).

Наиболее изученный пример системы, в которой имеет место эффект дистанционного взаимодействия, включает в себя два геля, один из которых играет роль донора, а другой – акцептора протонов. В ней протекают две реакции, каждая из которых сама по себе хорошо известна и описана в литературе. Это реакция диссоциации функциональных групп кислотного геля:



и реакция химического связывания протонов, образующих в результате такой диссоциации:



Главная отличительная особенность рассматриваемой системы, состоит в том, что на пространственное положение радикалов  $R_1$  и  $R_2$  наложены существенные ограничения. А именно, соответствующие функциональные группы жестко связаны с сеткой ковалентными связями

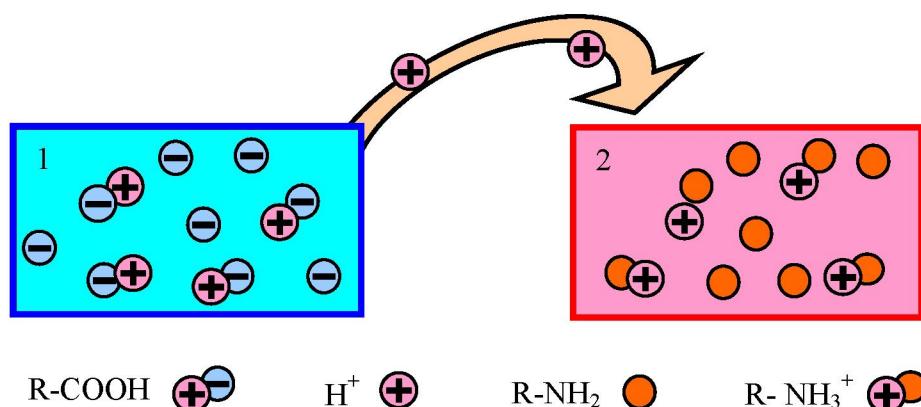


Рис.2. Образование ненулевого макроскопического заряда при переносе и химическом связывании протона

ми. Поэтому реакции (1) и (2) протекают в различных областях пространства – в объеме геля донора и в объеме геля-акцептора. В результате каждый из этих образцов приобретает ненулевой электростатический заряд. Именно этот фактор определяет принципиальные отличия эффекта дистанционного взаимодействия от комплексов на основе противоположно заряженных полимеров, активно изучавшихся в течение нескольких последних десятилетий [9, 10].

Подчеркнем, что характер дистанционного взаимодействия сшитых полимерных сеток (как гидрогелей, так и ионитов) может регулироваться дополнительными факторами (световым излучением, вариациями температуры и т.д.). Все указанные факторы существенным образом влияют на результат дистанционного взаимодействия, так как он определяется локальным значением степени ионизации [8], которая, в свою очередь может варьироваться в достаточно широких пределах за счет температуры, pH среды и т.д. Следовательно, для такой системы существует аналог входов  $X_i$ , рис.1а.

Существование аналогов петель обратной связи вытекает непосредственно из факта электростатического взаимодействия между всеми некомпенсированными зарядами без исключения. Каждый из них влияет на все остальные, причем расстояние на которых осуществляется такое взаимодействие может достигать нескольких сантиметров, если используется эффект переноса заряда между сетками. При этом необходимо подчеркнуть, что для рассматриваемой системы влияние зарядов друг на друга действительно составляет петлю обратной связи, поскольку

конкретный заряд (точнее, плотность заряда) на определенном участке поверхности определяется суммарным полем. Как отмечалось в [8], именно влияние электростатического поля является основой для интерпретации зависимости результата дистанционного взаимодействия от геометрических факторов. А именно, электростатическое поле, возникающее в промежутке между донорно-акцепторной парой, стремится, в соответствии с принципом Ле Шателье, уменьшить некомпенсированные заряды обоих взаимодействующих образцов вследствие их взаимного притяжения.

Далее, веса (аналоги коэффициентов  $w_{ij}$ ) в такой системе также могут регулироваться в достаточно широких пределах. А именно, в работах [4, 5, 11] отмечалось, что некомпенсированные поверхностные заряды, расположенные на одной плоскости все же частично экранируются зарядами противоположного знака, расположенными на комплементарной плоскости. В данном случае в качестве такой плоскости выступает поверхность того образца сетки, который обра-

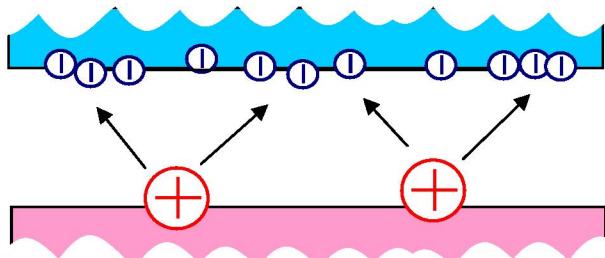


Рис.3. Экранировка электростатических взаимодействий за счет перераспределения подвижных зарядов, находящихся на соседствующей плоскости.

зует донорно-акцепторную пару совместно с рассматриваемой.

Простейшее описание эффектов экранировки, обусловленные электростатическими взаимодействиями в рассматриваемых условиях, дается на примере взаимодействия двух зарядов, расположенных вблизи плоскости, в которой имеется распределенный заряд противоположного знака, суммарно равный им по величине (рис.3).

На рисунке для определенности показаны две положительно заряженные частицы, расположенные вблизи поверхности, по которой могут перемещаться заряды отрицательного знака. Такая модель отражает простейшие электростатические взаимодействия, протекающие в двойных электрических слоях в тангенциальном направлении.

Классическая теория экранировки зарядов в растворах полиэлектролитов, развитая Дебаем и Хюккелем, отталкивается от того, что заряд, помещенный в ионную атмосферу, вызывает ее деформацию, вследствие чего суммарный потенциал заряда и деформированной атмосферы отличается от потенциала Кулона.

В случае, когда заряд располагается вблизи поверхности, по которой могут перемещаться заряженные частицы противоположного знака, он также вызывает деформации аналога ионной атмосферы, только не для случая поверхности, а для случая соседствующей плоскости (рис.3). Как и в случае классической теории Дебая-Хюккеля, полный потенциал определяется суммой кулоновского потенциала и потенциала, создаваемого деформированной ионной атмосферой, которая перестает быть однородной.

Следовательно, используя донорно-акцепторную пару, действительно можно регулировать потенциал взаимодействия между зарядами в тангенциальной плоскости в достаточно широких пределах за счет одних только геометрических факторов (например, расстояния между плоскостями). Более того, существует возможность для настройки указанных весов, так как эффекты экранировки, позволяющие регулировать потенциал (точнее, псевдопотенциал) взаимодействия между зарядами, зависят от концентрации заряженных частиц в обоих образцах. Поэтому локальное изменение указанных концентраций способно менять локальных значения аналогов весовых коэффициентов. Таким образом, рассмат-

риваемая система обладает аналогами настраиваемых весов в нейронной сети Хопфилда.

Остается показать, что она обладает и аналогами «выходов  $Y_i$ ». Точнее, показать, что изменение локального значение пространственно-го заряда может быть преобразовано в электрический сигнал. Это можно сделать разными способами. Наиболее очевидный из них (хотя и не самый удобный технически) – регистрация локального значения диэлектрической проницаемости, которая изменяется при изменении плотности заряда в соответствующей точке поверхности.

Вывод о зависимости локальной степени набухания от локальной плотности заряда, в свою очередь, можно сделать непосредственно на основании работ [12,13]. В них теоретически и экспериментально было показано, что изменение электростатического состояния поверхности (например, амплитуда развивающегося вблизи нее двойного слоя) вызывает изменение электростатической компоненты давления набухания полиэлектролитной сетки. Отклик на изменение локального значения плотности электрического заряда можно усилить, например, с помощью триггерных эффектов [14].

Таким образом, все элементы, составляющие нейронную сеть Хопфилда, обнаруживаются при рассмотрении системы, содержащей донорно-акцепторную пару взаимодействующих гидрогелей. Подчеркнем, что это далеко не единственный пример физико-химической системы, обладающей подобным свойством. Аналогичная пара плоскостей, содержащих заряды противоположного знака, формируется естественным путем вблизи поверхности любой полиэлектролитной сетки, помещенной в воду или водный раствор соли. В данном случае один из рассмотренных выше слоев формируют некомпенсированные заряды, оставшиеся в объеме геля, а второй – ионы, покинувшие поверхностный слой вследствие теплового движения [12]. Сходные аналоги нейронных сетей могут быть построены и при использовании двойных слоев в полупроводниках или других контактных явлениях, т.е. круг такого рода систем является весьма широким. Более того, даже обычный раствор слабого электролита, константа диссоциации которого зависит от приложения внешнего поля, формально можно поставить в соответствие нейронной сети, так как

парное взаимодействие, между ионами, схематически показанное на рис. 1б, в полной мере характерно и для этой системы. В этом случае, разумеется, аналогия является сугубо формальной, так как аналоги весов определяются только расстоянием между ионами и весьма плохо поддаются регулировке.

Существенное расширение возможности для настройки весовых коэффициентов предоставляет использование нановычислений, т.е. логических операций, выполняемых структурами молекулярного уровня организации. Принцип их реализации был описан в [4,5]. В данном случае весовые коэффициенты, определяющие взаимодействие между отдельными элементами, на которые разбивается физико-химическая система рассматриваемого типа, могут заноситься в «память» соответствующих молекул как в статическом, так и в динамическом режиме. С одной стороны, данное обстоятельство позволяет сделать физико-химические нейронные сети рассматриваемого типа более гибкими, а с другой – показывает, что молекулярные вычислители описанной в [4,5] разновидности могут найти важное применение даже и при нерешенной проблеме считывания информации из отдельной молекулярной структуры.

Основной вывод, который можно сделать по материалам данной работы состоит в том, что физико-химические системы как на основе полимеров, так и на основе традиционных полупроводников обладают необычайно широкими возможностями для разработки нейронных сетей молекулярного уровня организации. Это позволяет поставить вопрос о создании сетей, обладающих тем же числом нейронов, что и головной мозг человека, уже в ближайшей перспективе, что в свою очередь, может рассматриваться как существенный шаг в реализации программы, намеченной в [15].

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Эко У. Пять эссе на тему этики. СПб, «Амфора», 2007, 123 с.
2. Сулейменов И.Э., Григорьев П.Е. Физические основы ноосферологии. Алматы – Симферополь, 2007, 198 с.
3. Ергожин Е.Е., Бектуров Е.А., Сулейменов И.Э. Гидрофильные полимерные сетки. Алматы, 2003. 225 с.
4. Сулейменов И.Э., Мун Г.А. Принципы работы нанокомпьютера на основе полизелектролитов // Химический журнал Казахстана, спецвыпуск (21), октябрь 2008. С.220-226.
5. Панченко С.В., Мун Г.А., Сулейменов И.Э. Моделирование работы ионного наносумматора на основе полизелектролитов // Труды 6-ой межд. конф. студентов, аспирантов и молодых специалистов государственных участников РСС «Техника и технология связи», Ташкент, 9-10 октября 2008 г., с. 198-202.
6. Уоссермен Ф. Нейрокомпьютерная техника, М., Мир, 1992. 223 с.
7. Джумадилов Т.К., Исмаилова Ш.А. Интергелевые взаимодействия трехмерных структур на основе полиакриловой кислоты и полиэтиленимина // Вестник КазНУ, сер. хим. – 2005. - № 4, вып. 40. - С. 60-64.
8. Сулейменов И.Э., Джумадилов Т.К., Коптиев Э.Е. Полимерные ИТ– материалы. Амата. 2007.
9. Bekturov E.A., Bimendina L.A. Interpolymer complexes // Adv. Polym. Sci. 1981. V.41. P.99-147.
10. Бектуров Е.А., Бимендина Я.А., Мамытбеков Г.К. Комплексы водорастворимых полимеров и гидрогелей. - Алматы: Гылым.- 2002.-220 с.
11. Сулейменов И.Э., Мун Г.А., Рева Ю.И. и др. Поверхностные явления в системах на основе полимерных гидрогелей и возможности их использования в электронике // Мат. бго Беремжановского съезда по химии и химической технологии, Караганда, 2-3 октября 2008 г. С. 562-265
12. Будтова Т.В., Сулейменов И.Э., Френкель С.Я. Применение диффузионного подхода для описания набухания полизелектролитных гидрогелей. // Высокомол. соед. - Б.1995. - Т.37. №1. С. 147-153.
13. Будтова Т.В., Сулейменов И.Э., Френкель С.Я. О набухании полизелектролитных гидрогелей в растворах линейных полимеров // Высокомол. соед., серия А. – 1993. - Т. 35, № 1. -С. 93-96.
14. Закономерность изменения степени набухания неоднородных полимерных гидрогелей от температуры (триггерный эффект) / Мун Г.А., Сулейменов И.Э., Джумадилов Т.К. - Научное открытие. Диплом №364
15. Гель вместо силикона. Интервью. Аманжол. Газета «Деловая неделя» №36 (814), 19 сентября 2008 г., С. 8.

#### Резюме

Жұмыста жалпы электролиттер негізіндегі жүйелерде жасанды нейрон торларының іске асыру мүмкіндігі сарапталды. Осындағанда типті бірқатар жалпыға танымал физика-химиялық жүйелердің нейронды торлар негізіне ұқсастығымен түсіндіруге болатыны көрсетілген. Бұған мысал ретінде протонның бір үлгіден екіншісіне аудысуына негізделген гелдердің донорлы-акцепторлы жұбы жатады. Мұндай комбинация молекулярлы деңгейдегі жұбы жатады. Мұндай аппаратты алу мәселесін шешуге болатынына негізделген.

*Институт химических наук им. А.Б.Бектурова,  
г.Алматы,  
Алматинский институт энергетики и связи,  
г. Алматы,  
Казахский национальный университет  
им. аль-Фараби,  
г. Алматы,*

*Поступила 14.09.2008 г.*

Г л а в н ы й р е д а к т о р  
академик НАН РК **М. Ж. Журинов**

Р е д а к ц и о н на я кол л е г и я:

доктор химических наук **З. А. Мансуров** (зам. главного редактора),  
доктор химических наук **Ж. А. Абилов**,  
академик НАН РК **С. М. Адекенов**,  
академик НАН РК **В. К. Биншимбаев**,  
академик НАН РК **А. М. Газалиев**,  
доктор технических наук **У. Ж. Джусипбеков**,  
доктор химических наук **К. Д. Досумов**,  
академик НАН РК **Е. Е. Ергожин**,  
академик НАН РК **Б. А. Жубанов**,  
академик НАН РК **З. М. Мулдахметов**,  
академик НАН РК **Н. К. Надиров**,  
доктор технических наук **М. К. Наурызбаев**,  
академик НАН РК **К. Д. Пралиев**,  
кандидат химических наук **Д. Х. Чурина** (ответственный секретарь),  
академик НАН РК **Е. М. Шайхутдинов**

А д р е с р е д а к ц и и:

050100, г. Алматы, ул. Кунаева, 142,  
Институт органического катализа и электрохимии им. Д. В. Сокольского,  
каб. 213, тел. 291-60-42, факс 291-57-22, E-mail:orgcat@nursat.kz

Редакторы *Н. Ф. Федосенко, Ж. М. Нургожина*  
Верстка *А. М. Кульгинбаевой*

Подписано в печать 18.11.2008 г.  
Формат 60x88<sup>1</sup>/<sub>8</sub>. Бумага офсетная. Печать – ризограф.  
6,6 п. л. Тираж 300. Заказ 120.

---

*Национальная академия наук РК*  
050028, Алматы, ул. Шевченко 28, т. 291-27-14