

УДК 004

ОСОБЕННОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ НЕЙРОСЕТЕЙ ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧ ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНЫХ ДИСЦИПЛИН

Толоконников Сергей Владимирович,

Елецкий филиал АНО ВО «Российский новый университет», г. Елец

преподаватель отделения СПО

sergey.tolokonnikov@yandex.ru

Аннотация

Нейросети позволяют решать сложные задачи моделирования, анализа данных и прогнозирования, что ускоряет открытия в фундаментальных дисциплинах и повышает эффективность обучения.

Информационные технологии сегодня выступают основой научной работы в естественнонаучных дисциплинах, обеспечивая сбор, обработку, хранение и распространение информации. ИКТ ускоряют обработку и передачу информации, поддерживают автоматизацию учебно-познавательных задач и улучшают воспроизводимость экспериментов, что особенно важно для нейросетевых подходов.

Ключевые слова: данные, естественнонаучные дисциплины, информационные технологии, искусственный интеллект, математическая модель, нейросети, программа, система.

FEATURES OF USING NEURAL NETWORKS IN SOLVING NATURAL SCIENCE PROBLEMS

Sergey V. Tolokonnikov,

Yelets branch of ANO VO «Russian New University», Yelets

Teacher of the Department of Vocational Education

sergey.tolokonnikov@yandex.ru

ABSTRACT

Neural networks allow us to solve complex problems of modeling, data analysis and forecasting, which accelerates discoveries in fundamental disciplines and increases the effectiveness of training. Information technology today acts as the basis of scientific work in the natural sciences, providing the collection, processing, storage and dissemination of information. ICT accelerates the processing and transmission of information, supports the automation of educational and cognitive tasks and improves the reproducibility of experiments, which is especially important for neural network approaches.

Keywords: data, natural sciences, information technology, artificial intelligence, mathematical model, neural networks, program, system.

Тема применения нейронных сетей в естественных науках является высокоактуальной в условиях стремительного развития искусственного интеллекта и его интеграции в научные и образовательные процессы.

Нейросети позволяют решать сложные задачи моделирования, анализа данных и прогнозирования, что ускоряет открытия в фундаментальных дисциплинах и повышает эффективность обучения. Значимость темы подтверждается ростом публикаций в рецензируемых журналах, таких как «Вестник Науки» и «Молодой Ученый», где обсуждаются эволюция нейросетей и их практическое применение [9].

1943 год ознаменовал начало эволюции нейронных сетей: Роберт Генри МакКуллох и Уолтер Питтс предложили простейшую математическую модель нейрона и принцип порогового ответа на входящие сигналы [1, с. 89]. Уже в 1957 году Фрэнк Розенблатт предложил перцептрон - первый обучаемый базовый блок нейронной сети, что продемонстрировало возможность обучения на примерах и распознавания образов [1, с. 89]. В 1969 году Майкл Мински и Шерман Паперт в книге *Perceptrons* указали ограничения однодерговых сетей и их аппроксимационные рамки, что стало отправной точкой для длительного периода «зимы нейросетей» [1, с. 89]. В 1986 году Джеффри Румельхарт, Джошуа Хинтон и Ричард Уильямс сформулировали *backpropagation* как эффективный метод обучения многослойных сетей, что открыло практическую дорогу к всё более сложным архитектурам [1, с. 89].

Конец 1980-х - начало 1990-х годов ознаменовался развитием сверточных сетей под руководством ЛеКуна и его соавторов, а также рекуррентных сетей Эльмана, что расширило возможности распознавания образов и обработки последовательностей [1, с. 90]. В 2006–2010-е годы началась эпоха глубокого обучения: прорыв был связан с обучением глубоких сетей с предварительным обучением и ростом вычислительной мощности на GPU [1, с. 90]. В 2012 году AlexNet, созданный Алексом Крижевским, Ильёй Суцквером и Георги Хинтоном, стал значительным поворотным моментом, привлекая внимание к глубинным сетям и ускоряя их применение в науке и технике [1, с. 90].

Далее, 2010–2020-е ознаменовались активным развитием моделей для научных задач: появление PINNs (Physics-Informed Neural Networks) и нейросетевых аппроксимаций для квантовой физики и химии, что расширило спектр применимости нейросетей в естественных науках [1, с. 90]. В настоящее время продолжают развиваться новые направления: AlphaFold - передовая система прогнозирования структур белков, графовые нейросети [1, с. 90–91].

Информационные технологии сегодня выступают основой научной работы в естественнонаучных дисциплинах, обеспечивая сбор, обработку, хранение и распространение информации. В контексте естественных дисциплин ИТ выступают как универсальный инструмент для моделирования, анализа данных и проведения вычислительных экспериментов, что существенно ускоряет развитие теории и практики [6]. Эта трансформация стимулирует поиск новых подходов и инструментов, способных эффективно использовать доступные объемы данных для решения сложных научных задач. Современная информационная инфраструктура объединяет программы, аппаратуру и методологии, создавая условия для эффективной работы со сложными датасетами, симуляциями и численными методами, необходимыми нейросетевым подходам при решении задач естественных наук [6].

В математике информационные технологии интегрируются через вычислительные средства и алгоритмические методы, позволяя автоматизировать решение задач, проверку

гипотез и исследование больших пространств решений. Это особенно важно в задачах численного моделирования и анализа устойчивости систем, где возможности традиционных аналитических подходов ограничены объемом и сложностью данных. Применение современных программных пакетов и вычислительных кластеров позволяет математикам решать задачи, которые ранее считались неразрешимыми из-за вычислительной сложности [3].

В физике ИТ обеспечивает сбор экспериментальных данных, их обработку и сопоставление с моделями на базе уравнений, а также создание цифровых двойников процессов для ускорения вычислений и сценариев экспериментов [8].

В химии информационные технологии дают возможность предсказывать свойства молекул и материалов, анализировать экспериментальные сигналы и хранить результаты в совместимых базах данных, что существенно облегчает поиск материалов и оптимизацию реакционных условий [5].

В биологии информационные технологии позволяют обрабатывать геномные данные, анализировать изображения клеток и динамику биологических сетей, а также интегрировать данные различных экспериментов для построения комплексных прогнозирующих моделей. В этом контексте нейросетевые методы получают поддержку благодаря доступности больших наборов обучающих данных, современным инструментам обучения и вычислительным мощностям, что расширяет диапазон применимости нейронных сетей в естественнонаучных задачах [6].

Развивая тему, можно отметить роль информационных технологий в образовательном и исследовательском процессе: ИКТ ускоряют обработку и передачу информации, поддерживают автоматизацию учебно-познавательных задач и улучшают воспроизводимость экспериментов, что особенно важно для нейросетевых подходов, где воспроизводимость и сравнение с базовыми моделями играют ключевую роль [6]. Это способствует повышению эффективности как обучения, так и научных исследований, особенно в области, где требуются современные методы обработки данных и моделирования. В целом, информационные технологии формируют экосистему, в рамках которой данные превращаются в знание: они создают связку между наблюдением, экспериментом и моделированием, что позволяет методам машинного обучения и нейронным сетям выходить за рамки теории и находить применимые решения для математики, физики, химии и биологии [6].

На практике применение нейросетей к задачам естественнонаучных дисциплин строится вокруг последовательности действий, каждая ступень которой опирается на научные принципы и требования к воспроизводимости. В обзоре по теме нейросетей в контексте науки и образования подчеркивается, что успешная работа начинается с четкой постановки задачи и определения требуемой точности, за которыми следуют этапы подготовки данных, выбора архитектуры и гиперпараметров, обучения и проверки моделей, а затем интерпретация результатов и их осмысленность в физическом или химическом контексте. Такие принципы выработывались на практике и обобщаются как обязательные для надёжного применения нейронных сетей в научной работе [7, с. 26-27].

Формулировка задачи и требования к точности - первая и критически важная ступень проекта. Без ясного описания цели и критериев оценки качество решения нейросети трудно сопоставлять с традиционными методами и с физическими законами системы, которую моделируют [2, с. 13-14].

Сбор и подготовка данных является второй по значимости стадией, от которой во многом зависит достижимая точность и обобщаемость модели. В процессе подготовки данных выполняются очистка данных от шумов и пропусков, нормализация признаков, а также разбиение исходного набора на обучающую, валидационную и тестовую выборки.

Этот этап особенно важен в естественных науках, где данные могут быть ограничены по размеру и разнообразию, а качество предсказаний напрямую зависит от репродуктивности и корректности исходных измерений [1, с. 26-27].

Выбор архитектуры и гиперпараметров определяет способность нейросети учитывать специфику задачи: динамику физических систем, молекулярные свойства или биологические последовательности. В современных подходах широко обсуждаются такие направления, как архитектуры, способные работать с физическими ограничениями и структурой данных, а также методы оптимизации и регуляризации для достижения устойчивого обобщения. В литературе отмечается, что выбор архитектуры должен опираться на характер данных и цели исследования, а гиперпараметры - на валидацию и сравнение с базисными моделями [2, с. 13-14].

Обучение и валидация представляют собой ядро процесса: модель обучается на обучающей выборке, а её обобщающую способность проверяют на валидационной, после чего тестируют на отдельных данных. Важную роль здесь играет борьба с переобучением, выбор подходящих метрик и режимов обучения, а также регулярная проверка на физическую смысловую корректность получаемых результатов. В рецензируемой литературе подчеркивается, что надёжность предсказаний требует строгой оценки на независимых данных и учета ограничений самим предметом исследования (например, законов сохранения, симметрий) [1, с. 28].

Интерпретация результатов и физическая/химическая осмысленность становятся критерием перехода от чисто статистической аппроксимации к научно обоснованным выводам. В аналитических работах отмечается, что нейросети часто дают мощные прогнозы, но без ясного объяснения, почему они работают в конкретной системе, их выводы остаются менее полезными для науки. Поэтому важны методы интерпретации, которые связывают результаты нейросетей с известными физическими или химическими принципами, а также возможности проверять гипотезы на основе моделирования и экспериментальных данных [2, с. 14].

Внедрение в исследовательский процесс или промышленное применение требует учёта воспроизводимости и совместимости с существующими рабочими процедурами. Набор проектов в науке и образовании демонстрирует, что практике важны открытые репозитории кода и данных, документирование методик обучения и условий экспериментов, а также возможность повторить расчёты на независимой инфраструктуре [4].

Таким образом, проведен анализ применения нейронных сетей в естественных науках. Были рассмотрены ключевые этапы эволюции нейросетей от ранних моделей до современных глубоких архитектур, что позволило выявить их роль как мощного инструмента для решения сложных задач. Роль информационных технологий подчеркнута в контексте интеграции ИИ в научные и образовательные процессы, где нейросети ускоряют обработку данных и моделирование.

Нейронные сети доказали свою значимость в естественных науках, способствуя ускорению открытий и повышению качества образования. Они не только решают прикладные задачи, но и способствуют междисциплинарным исследованиям, интегрируя данные из различных областей. Однако для полного раскрытия потенциала требуется преодоление ограничений, таких как этические аспекты использования ИИ и доступность вычислительных ресурсов. Исследование подтверждает, что нейросети являются неотъемлемой частью современной науки, и их применение будет расширяться с развитием технологий.

В перспективе ожидается рост интеграции нейросетей в образовательные программы, включая разработку адаптивных систем обучения и виртуальных лабораторий.

Дальнейшие исследования могут сосредоточиться на создании более интерпретируемых моделей, снижении требований к данным и расширении применения в менее изученных областях, таких как экология или геология.

Список литературы:

1. Аксенов В.А. Эволюция развития нейронных сетей: прошлое, настоящее, будущее // Vestnik Nauki. 2023. С. 89-91
2. Антипко А.В. Нейросеть: определение, принцип работы, область применения. Специалисты по нейросетям // Молодой ученый. 2023. № 33(480). С. 13-14. URL: <https://moluch.ru/archive/480/105505>.
3. Бабурчина А.И. Использование ИИ в преподавании математики для школьников среднего и старшего звена // Вестник науки. 2024. С. 553–557.
4. Володенков С.В., Федорченко С.Н., Печенкин Н.М. Риски, угрозы и вызовы внедрения искусственного интеллекта и нейросетевых алгоритмов в современную систему социально-политических коммуникаций: по материалам экспертного исследования // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия: Политология. 2024. Т. 26. № 2. С. 406-424.
5. Галкина Е.Н. Применение нейросетей в процессе обучения химии // Мир науки. Педагогика и психология. 2024. Т. 12. № 2. С. 1–9 [1, с. 1–9].
6. Нуриддинов Хожиакбар Информационные технологии в развитии естественных наук // Исследования молодых ученых: материалы V Международной научной конф. Казань, декабрь 2019 г. Казань: Молодой ученый, 2019. С. 100-101. URL: <https://moluch.ru/conf/stud/archive/353/15490>.
7. Павлов Д.А. Искусственные нейросети в контексте науки и образования // Компьютерные инструменты в образовании. 2017. № 6. С. 25–30.
8. Фещенко Татьяна Сергеевна. Потенциал использования искусственного интеллекта в обучении физике в школе // Общество: социология, психология, педагогика. 2024, с. 50–65.
9. Цаунит А.Н. Перспективы развития и применения нейронных сетей // Молодой ученый. 2021. № 23(365). С. 114-117.

References:

1. Aksenov V.A. Evolution of the development of neural networks: past, present, future // Vestnik Nauki. 2023. P. 89-91
2. Antipko A.V. Neural network: definition, principle of operation, scope of application. Neural network specialists // Young scientist. 2023. No. 33(480). Pp. 13-14. URL: <https://moluch.ru/archive/480/105505>.
3. Baburchina A.I. The use of AI in teaching mathematics for middle and high school students // Bulletin of Science. 2024. Pp. 553–557.
4. Volodenkov S.V., Fedorchenko S.N., Pechenkin N.M. Risks, Threats, and Challenges of Introducing Artificial Intelligence and Neural Network Algorithms into the Modern System of Socio-Political Communications: Based on an Expert Study // Bulletin of the Peoples' Friendship University of Russia. Series: Political Science. 2024. Vol. 26. No. 2. Pp. 406-424.

5. Galkina E.N. Application of Neural Networks in the Process of Teaching Chemistry. World of Science. Pedagogy and Psychology. 2024. Vol. 12. No. 2. Pp. 1-9 [1, pp. 1-9].
6. Nuriddinov Khozhiakbar Information Technologies in the Development of Natural Sciences // Research of Young Scientists: Materials of the V International Scientific Conference. Kazan, December 2019. Kazan: Young Scientist, 2019. Pp. 100-101. URL: <https://moluch.ru/conf/stud/archive/353/15490>.
7. Pavlov D.A. Artificial neural networks in the context of science and education // Computer tools in education. 2017. No. 6. Pp. 25-30.
8. Feshchenko Tatyana Sergeevna. The potential of using artificial intelligence in teaching physics at school // Society: Sociology, Psychology, Pedagogy. 2024, pp. 50-65.
9. Tsauinit A.N. Prospects for the development and application of neural networks // Young Scientist. 2021. No. 23(365). Pp. 114-117.