

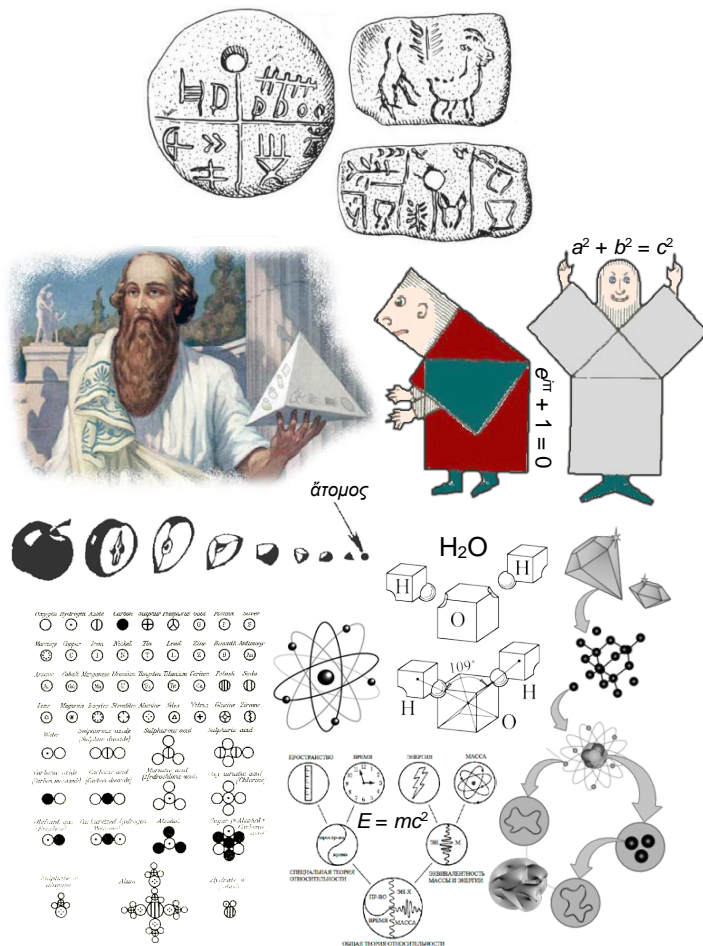
Е. А. Тугова

В. И. Альмяшев

А. Н. Коваленко

ОСНОВЫ ПОСТАНОВКИ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

Учебное пособие



Санкт-Петербург
2019

УДК 001.5; 167; 174; 544.08

Тугова, Е. А. Основы постановки физико-химического исследования [Текст]: учебное пособие / Е. А. Тугова, В. И. Альмяшев, А. Н. Коваленко. – СПб.: ЛЕМА, 2019. – 93 с.

В учебном пособии рассмотрены теоретические и практические подходы постановки физико-химического исследования. Основное внимание уделено введению в проблему постановки физико-химического исследования, цель которого в кратком виде обозначить спектр возможных вопросов и помочь молодым ученым в дальнейшем самообразовании.

Представлены примеры применений методов прогнозирования и моделирования при решении химических задач. Настоящее пособие подготовлено для бакалавров и магистров, обучающихся по программам профессиональной подготовки по направлениям «Химия», «Химия, физика и механика материалов», «Биотехнические системы и технологии», «Нанотехнологии и наноматериалы».

ISBN 978-5-00105-434-4

Рис.10, табл. 2, библиогр. 40.

Рецензенты:

1. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Ордена Трудового Красного Знамени Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова Российской академии наук, лаб. физико-химического конструирования и синтеза функциональных материалов, Т. П. Масленникова, канд. хим. наук, зав. лабораторией
2. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, лаб. фотоэлектрических явлений в полупроводниках, С. Г. Ястребов, д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник

Утверждено на заседании учебно-методической комиссии факультета химии веществ и материалов СПбГИ(ТУ) 16.05.2019 г.

© коллектив авторов, 2019

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	5
1 ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ	6
1.1 Специфика научного знания.....	6
1.2 Возникновение (генезис) науки.....	9
1.3 Основание науки: идеалы и нормы научных исследований.....	11
1.4. Классификация науки.....	14
Контрольные вопросы-тесты.....	17
2 ОСНОВНЫЕ ПОДХОДЫ ПЛАНИРОВАНИЯ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОГО ИССЛЕДОВАНИЯ	18
2.1 Научная проблема и задачи научного исследования.....	18
2.2 Методы логических рассуждений.....	22
2.3 Методология теоретических исследований. Научные гипотезы и научные теории. Метод гипотез и его применение в науке.....	25
2.3.1 Методологические функции теоретических понятий, или зачем нужны научные теории.....	27
2.3.2 Методы анализа и построения научных теорий.....	29
2.4 Модели развития науки.....	32
2.4.1 Гипотетико-дедуктивная модель науки.....	32
2.4.2 Абдукция и поиск объяснительных научных знаний.....	32
2.5 Методы и функции научного объяснения и научного понимания.....	35
2.6 Методы предвидения и прогнозирования в науке.....	37
2.7 Применение научного прогнозирования при решении химических задач.....	39
2.7.1 Прогнозирование формирования новых соединений со строением фаз Руддлессдена-Поппера.....	39
2.7.2 Экспериментальное подтверждение прогноза о формировании новой фазы $DySrAlO_4$	44
Контрольные вопросы-тесты.....	47
3 МОДЕЛИРОВАНИЕ КАК МЕТОД НАУЧНОГО ПОЗНАНИЯ	48
3.1. Определение понятия «модель».....	50
3.2 Классификация моделей.....	52
3.3 Аналогия и подобие.....	53
3.4 Что есть моделирование?.....	57
3.5 Моделирование и эксперимент.....	58
3.6 Моделирование – предопределенность и случайность.....	61
3.7 Достоверность моделирования.....	62
3.8 Процесс моделирования.....	64
3.9 Применения метода моделирования.....	65
3.9.1 Общий обзор применений.....	65
3.9.2 Применение метода моделирования при решении химических задач.....	68

Контрольные вопросы-тесты.....	74
4 ЭТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ.....	75
4.1 Основные принципы этики научного сообщества.....	75
4.2 Соблюдение принципов научной этики.....	77
4.2.1 Подготовка и издание научных публикаций.....	79
4.2.2 Научная переписка.....	83
4.2.3 Общение на научных мероприятиях.....	86
Контрольные вопросы-тесты.....	88
ЛИТЕРАТУРА.....	89

ВВЕДЕНИЕ

Создавать и исследовать новые вещества и материалы очень интересно, но, одновременно, и сложно. Основой новых технологий и материалов является физическая химия [1]. Приведем слова Леонарда Эйлера, который говорил о М. В. Ломоносове как о сформировавшем новую научную **методику** и первенствующем в основоположении новой науки – **физической химии**. Важной особенностью той науки, которую заложил М.В. Ломоносов, явился его **метод, подразумевающий исследование связи физических и химических явлений**.

Физико-химическое исследование веществ и материалов позволяет ответить на следующие вопросы:

- Действительно ли представленный для исследования объект является тем, каким его представляют?
- Имеется ли общий источник происхождения у представленных на исследование объектов?
- Эксплуатировался ли исследуемый материал, вещество, изделие и каковы их области применения?

и многие другие.

Поэтому, чтобы ответить на приведенные и другие вопросы следует рассматривать следующий алгоритм физико-химического исследования:

1. наблюдение явления;
2. теоретический анализ в мировоззренческом и методологическом аспекте и поиск возможной концепции;
3. построение (выбор) гипотезы;
4. проектирование (разработка) метода и методик;
5. обеспечение эксперимента, наглядно или однозначно дающего оценку:
 - надежности гипотезы по критериям сортировки (краевые условия надежности воспроизведения явления);
 - критериев реализуемости явления;
 - результата хода (динамики) процесса;

- результата завершения процесса (самого явления).

Иными словами физико-химическое исследование предполагает формирование стратегии проведения многостороннего изучения состава, строения и свойств рассматриваемых объектов – веществ и материалов.

Для начинающих исследователей весьма важно иметь общее представление о методологии (от греч. *Μεθοδολογία* – учение о способах; т. е. фундаментальной науке о взаимосвязи стратегии – тактики – технологий) научных исследований, поскольку на первых порах овладения навыками исследовательской работы большинство возникающих проблем носит именно методологический характер. Молодым ученым, прежде всего, недостает опыта в организации своей работы, в использовании методов физико-химического исследования, применении логических законов и следовании правилам этики научного общения.

В данном пособии представлены основные подходы: теоретические и практические рекомендации к постановке физико-химического исследования.

1 ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

1.1 Специфика научного знания

Научное познание отличается от обыденного и практического познания своей *системностью* и *последовательностью*, как в процессе поиска новых знаний, так и упорядочения всего известного, наличного и вновь открытого знания. Каждый последующий шаг в науке опирается на шаг предыдущий, каждое новое открытие получает свое обоснование, когда становится элементом определенной системы знания. Обыденное знание имеет разрозненный, случайный и неорганизованный характер, в котором преобладают не связанные друг с другом отдельные факты, либо их простейшие индуктивные обобщения.

Дальнейший процесс систематизации знания в науке находит продолжение в объединении теорий в рамках отдельных научных

дисциплин, а последних – в междисциплинарных направлениях исследования. В качестве иллюстрации междисциплинарных исследований, возникших в последние десятилетия, можно указать, например, на кибернетику, а затем и синергетику. Известно, что процессы управления изучались в разных науках и до появления кибернетики, но именно кибернетика впервые сформулировала их, придала им недостающую общность и разработала единую терминологию и язык, что значительно облегчило общение и взаимопонимание между учеными разных специальностей. Аналогично этому проблемы самоорганизации исследовались на материале биологических, экономических и социально-гуманитарных наук, но только синергетика выдвинула новую общую концепцию самоорганизации и тем самым сформулировала ее общие принципы, которые используются в разных областях исследования.

Возникновение подробных междисциплинарных исследований свидетельствует о наличии в науке тенденции к *интеграции* научного знания, значительный импульс которой придало развернувшееся после второй мировой войны системное движение. Эта тенденция преодолевает негативные последствия противоположной тенденции к *дифференциации* знания, направленной на обособленное изучение отдельных явлений, процессов и областей реального мира. Тем не менее, процесс интеграции играет значительную роль в прогрессе науки, так как позволяет глубже и точнее исследовать их.

Наука руководствуется определенными стандартами, критериями или нормами исследования, которые обеспечивают интерсубъективность полученных при этом результатов. Так, например, данные наблюдений или экспериментов должны быть воспроизводимы любым ученым соответствующей области знания, а это означает, что они не должны зависеть от субъекта, его желаний и намерений. Поэтому они называются *интерсубъективными*. История науки знает немало случаев добросовестного заблуждения ученых при сообщении ими своих результатов, не говоря о преднамеренной их фальсификации. Поэтому в

науке устанавливаются определенные критерии и нормы исследования, которыми должен руководствоваться любой ученый.

Критерий непротиворечивости научного знания обеспечивает последовательность мышления, достигаемый соблюдением известных законов классической, или аристотелевской, логики и, прежде всего, закона недопущения противоречия. Если определение понятия или доказательство теоремы окажется противоречивым, то оно признается неправильным и потому должно быть исключено из науки или, по крайней мере, требует исправления.

Критерий проверяемости осуществляется путем обнаружения соответствия или несоответствия научных гипотез и теорий с результатами наблюдений и экспериментов. При этом в одних науках приходится ограничиваться лишь систематическими наблюдениями (астрономия) или дошедшими до нас историческими фактами (археология, история, этнография), в других (физика, химия, биология и др.) – можно проводить эксперименты, в третьих (экономика, социология, политология) – в основном приходится анализировать существующие конкретные факты и лишь частично обращаться к эксперименту.

Если реальные факты опровергают проверяемое теоретическое утверждение, то по известному логическому закону *modus tollens*, т. е. ложности заключения на основе ложности следствия, вся теоретическая система является ложной. Если это утверждение окажется истинным, то можно говорить лишь о частичной истинности гипотезы или теории, точнее, о некоторой степени подтверждения ее фактами. Чем больше будет таких подтверждающих фактов, как по числу, так и по их разнообразию, тем выше будет степень подтверждения теории. Тем не менее, никакой гарантии, что будущие наблюдения и эксперименты не могут опровергнуть теорию, не существуют. Исторический опыт науки показывает, что даже теории, которые долгое время считались незыблемыми и чуть ли не вечными и абсолютными истинами, как, например, классическая механика Ньютона, впоследствии оказались относительно истинными, верными лишь для

процессов определенной области действительности и конкретных условий их применения.

1.2 Возникновение (генезис) науки

В истории формирования и развития науки можно выделить две стадии, которые соответствуют двум различным методам построения знания и двум формам прогнозирования результатов деятельности. Первая стадия характеризует *зарождающуюся науку* (преднауку), вторая – *науку в собственном смысле слова*. Зарождающаяся наука изучает преимущественно те вещи и способы их изменения, с которыми человек многократно сталкивался в производстве и обыденном опыте. Он стремился построить модели таких изменений с тем, чтобы предвидеть результаты практического действия. Первой предпосылкой было изучение вещей, свойств и отношений, выделенных самой практикой. Эти вещи, свойства и отношения фиксировались в познании в форме идеальных объектов, которыми мышление начинало оперировать. Эта деятельность мышления формировалась на основе практики и представляла собой идеализированную схему практических преобразований материальных предметов. Соединяя идеальные объекты с соответствующими операциями их преобразования, ранняя наука строила таким путем схему тех изменений, которые могли быть осуществлены в производстве данной конкретной исторической эпохи (например, операция сложения в математике древнего Египта). Способ построения знаний путем абстрагирования и схематизации предметных отношений на личной практике обеспечивал предсказание ее результатов в границах уже сложившихся способов практического освоения мира. Однако по мере развития познания и практики наряду с отмеченным способом в науке формируется новый способ построения знаний. Он знаменует переход к собственно научному исследованию предметных связей мира. Если на этапе преднауки, как первичные идеальные объекты, так и их отношения, выводились непосредственно из практики и лишь затем внутри созданной системы знания формировались новые идеальные объекты, то далее

познание делает следующий шаг. Оно начинает строить фундамент новой системы знания как бы «сверху» по отношению к реальной практике и лишь после этого, путем ряда опосредований, проверяет созданные из идеальных объектов конструкции, сопоставляя их с предметными отношениями практики.

При таком методе исходные идеальные объекты черпаются уже не из практики, а заимствуются из ранее сложившихся систем знания и применяются в качестве строительного материала при формировании новых знаний. Эти объекты погружаются в особую сеть отношений, структуру, которая заимствуется из другой области знания, где она предварительно обосновывается в качестве схематизированного образа предметных структур действительности. Соединение исходных идеальных объектов с новой «сеткой отношений» способно породить новую систему знаний, в рамках которой могут найти отображение существенные черты ранее не изученных сторон действительности. Прямое или косвенное обоснование данной системы практикой превращает ее в достоверное знание.

Благодаря новому методу построения знаний наука получает возможность изучить не только те предметные связи, которые могут встретиться в сложившихся стереотипах практики, но и проанализировать изменения объектов, которые в принципе могла бы освоить развивающаяся цивилизация. С этого момента кончается этап преднауки и начинается наука как таковая. В ней наряду с эмпирическими правилами и зависимостями формируется особый тип знания – **теория**, позволяющая получить эмпирические зависимости как следствие из теоретических постулатов. Меняется и категориальный статус знаний – они могут соотноситься уже не только с осуществленным опытом, но и с качественно иной практикой будущего, а поэтому строятся в категориях возможного и необходимого. Знания уже не формулируются только как предписания для наличной практики, они выступают как знания об объектах реальности «самой по себе», и на их основе вырабатывается рецептура будущего

практического изменения объектов. Поскольку научное познание ориентируется на поиск предметных структур, которые не могут быть выявлены в обыденной практике и производственной деятельности, оно уже не может развиваться, опираясь только на эти формы практики. Возникает потребность в особой форме практики – **эксперименте**.

Переход к науке в собственном смысле слова был связан с двумя переломными состояниями развития культуры и цивилизации. Во-первых, с изменениями в культуре античного мира, которые обеспечили применение научного метода в математике и вывели ее на уровень теоретического исследования, во-вторых, с изменениями в европейской культуре, произошедшими в эпоху возрождения и переходу к Новому времени, когда научный способ мышления стал основой естествознания. Эти изменения и обеспечили, в конечном итоге, становление техногенной цивилизации.

1.3 Основания науки: идеалы и нормы научных исследований

Научное познание регулируется идеалами и нормами, в которых выражены представления о целях научной деятельности и способах их достижения.

Первый блок оснований науки: *Среди идеалов и норм исследования* выделяют: а) познавательные установки, которые регулируют процесс воспроизведения объекта в различных формах научного знания; б) социальные нормативы, которые фиксируют роль науки и ее ценность для общественной жизни на определенном этапе исторического развития, управляют процессом коммуникации исследователей, отношениями научных сообществ и учреждений друг с другом и с обществом в целом. Познавательные идеалы наук имеют достаточно сложную организацию. Выделяют идеалы и нормы: 1) объяснения и описания объектов и явлений; 2) доказательности и обоснованности знаний; 3) построения и организации знаний. В совокупности они образуют своеобразную схему метода исследовательской деятельности, обеспечивающую освоение объектов определенного типа. В содержании идеалов и норм научного исследования выделяют три уровня: 1) представлен признаками, которые отличают науку

от других форм познания; 2) представлен исторически изменчивыми установками, которые характеризуют стиль мышления, доминирующий в науке на определенном этапе ее развития; 3) в котором установки второго уровня конкретизируются применительно к специфике предметной области каждой науки. Специфика исследуемых объектов непременно сказывается на характере идеалов и норм научного познания, и каждый новый тип системной организации объектов, вовлекаемый в исследовательскую деятельность, требует трансформации идеалов и норм научной дисциплины. Идеалы и нормы регулируют построение различных типов теорий, осуществление, наблюдение и формирование эмпирических фактов. Процессы построения и функционирования научных знаний демонстрируют идеалы и нормы, в соответствии с которыми создавались научные знания. В системе таких знаний и способов их построения возникают своеобразные эталонные формы, на которые ориентируется исследователь.

Второй блок оснований науки составляет научная картина мира. В развитии современных научных дисциплин особую роль играют обобщенные схемы – образы предмета исследования, посредством которых фиксируются основные системные характеристики изучаемой реальности. Обобщенная характеристика предмета исследования вводится в картину реальности посредством представлений: 1) о фундаментальных объектах, из которых полагаются построенными все другие объекты, изучаемые соответствующей наукой; 2) о типологии изучаемых объектов; 3) об общих закономерностях их взаимодействия; 4) о пространственно-временной структуре реальности. Все эти представления могут быть описаны в системе онтологических принципов, которые выступают как основание научных теорий соответствующей дисциплины. Каждая из конкретно-исторических форм картины исследуемой реальности может реализовываться в ряде модификаций, выражающих основные этапы развития научных знаний. Картина реальности обеспечивает систематизацию знаний в рамках соответствующей науки. С ней связаны

различные типы теорий научной дисциплины, а так же опытные факты, на которые опирается и с которыми должны быть согласованы принципы картины реальности. Связь картины мира с ситуациями реального опыта отчетливо проявляется, когда наука начинает изучать объекты, для которых еще не создано теорий и которые исследуются эмпирическими методами, кроме непосредственной связи с опытом картина мира имеет с ним опосредованные связи через основание теорий, которые образуют теоретические схемы и сформулированные относительно них законы. Картину мира можно рассматривать в качестве некоторой теоретической модели исследуемой реальности, но эта модель отличается от моделей конкретных теорий: 1) на одну и ту же картину мира может опираться множество теорий; 2) специальную картину мира можно отличить от теоретических схем, анализируя образующие их абстракции идеальные объекты, образующие картину мира, и абстрактные объекты, образующие в своих связях теоретическую схему, имеют разный статус.

Третий блок оснований науки – философский, осуществляется посредством философских идей и принципов, которые обосновывают онтологические постулаты науки, а также ее идеалы и нормы. В фундаментальных областях исследований развитая наука, как правило, имеет дело с объектами, ни в производстве, ни в обыденном опыте еще не освоенными, поэтому научные картины мира не только в период их формирования, но и в последующие периоды перестройки нуждаются в своеобразной стыковке с господствующим мировоззрением той или иной эпохи. Такую стыковку обеспечивает философское основание науки. Наука использует в качестве обосновывающих структур лишь некоторые идеи и принципы. В гетерогенности философских оснований выделяют две взаимосвязанные подсистемы: во-первых, онтологическую, представленную сеткой категорий, которые служат матрицей понимания и познания исследуемых объектов, и, во-вторых, – эпистемологическую, выраженную категориальными схемами, которые характеризуют познавательные процессы и их результат. Обе подсистемы исторически развиваются в

зависимости от типов объектов, которые осваивает наука и от эволюции нормативных структур, обеспечивающих освоение этих объектов.

1.4 Классификация науки

Наука как целое включает в себя ряд частных наук, которые подразделяются, в свою очередь, на множество научных дисциплин. Выявление этой структуры ставит проблему классификации наук – раскрытие их взаимосвязи на основании определенных принципов и критериев и выражение их связи в виде логически обоснованного расположения в определенный ряд. Поскольку наука – развивающаяся целостность, исторический феномен, то возникает проблема периодизации истории науки, т. е. выделение этапов ее развития. Обе проблемы решаются по-разному в зависимости от предмета исследования отдельных наук, их методов, целей научного познания и других обстоятельств [2].

Одна из первых попыток систематизации и классификации накопленного знания принадлежит Аристотелю. Все знание в зависимости от сферы его применения он разделил на три группы: **теоретическое**, где познание ведется ради него самого; **практическое**, которое дает руководящие идеи для поведения человека; **творческое**, где познание осуществляется для достижения чего-либо прекрасного.

В период возникновения науки как целостного социокультурного феномена (XVI-XVII веков) в «Великом возрождении наук» предпринял Фрэнсис Бэкон. В зависимости от познавательных способностей человека (таких, как память, рассудок и воображение) он разделил науки на три большие группы: а) **история** как описание фактов, в том числе естественная и гражданская; б) **теоретические науки**, или «философия» в широком смысле слова; в) **поэзия, литература и искусство** в целом.

Классификацию наук на диалектико-идеалистической основе предложил Георг Гегель. Положив в основу принцип развития, субординации (иерархии) форм знания, он выделил среди них три раздела, отвечающих основным этапам развития Абсолютной идеи («мирового духа»): а) **диалектику и теорию познания (логику)**, включающую в себя

три учения: о бытии, о сущности, о понятии; б) **философию природы**, подразделяемую на механику, физику (включающую и изучение химических процессов) и органическую физику (исследующую геологическую природу, растительный и животный мир); в) **философию духа**, разделенную на субъективный (антропология, феноменология и психология), объективный (социально-историческая жизнь человечества) и абсолютный дух (философия как «мыслящее рассмотрение предметов»).

Огюст Конт, отвергая Бэконовский принцип деления наук по различным способностям человеческого ума, считал, что принцип должен вытекать из изучения самих классифицируемых предметов и определяться действительными, естественными связями, которые между ними существуют. В своей иерархии наук он исходил из следующего: а) существуют науки, относящиеся к внешнему миру, с одной стороны, и к человеку – с другой; б) совокупность наук о природе следует разделить на две отрасли: неорганическую и органическую (в соответствии с их предметами изучения); в) естественная философия последовательно охватывает «три великие отрасли знания» – астрономию, химию и биологию. Для облегчения употребления своей иерархической формулы, Конт предлагал сгруппировать науки в виде трех пар: а) начальной, **математико-астрономической**; б) промежуточной, **физико-химической**; в) конечной, **биолого-социологической**. Конт обобщил свою классификацию в виде графика, отражающего степень сложности объектов и явлений, которые являются предметом изучения отмеченных им наук (рис. 1).

Дальнейшее развитие иерархическая модель классификации наук получила в трудах Фридриха Энгельса. Установив положение, согласно которому каждой форме движения материи соответствует своя определенная «форма движения мышления», т. е. отрасль науки, Энгельс выяснил, что как между формами движения материи, так и между их отражением в голове человека – отраслями науки, существуют отношения субординации.

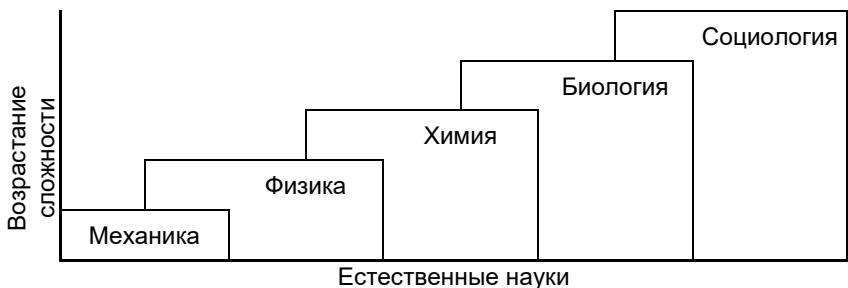


Рис. 1. Иерархическая связь между естественными науками по Огюсту Конту (лестница наук)

Чтобы подчеркнуть, что иерархическая связь между естественными науками обуславливает их единство, т. е. целостность всего естествознания как одной системы, Энгельс прибег к таким определениям отраслей естествознания, которые указывают на происхождение высших форм из низших – «одну из другой». Физику он назвал «механикой молекул», химию – «физикой атомов», а биологию – «химией белка». При этом Энгельс подчеркнул, что такого рода прием не имеет ничего общего с механистической попыткой сведения одной формы к другой. Это лишь демонстрация диалектической связи между разными уровнями материальной организации мира и ее познания. Вместе с тем, это – демонстрация скачков от одного дискретного уровня научных знаний к другому и качественного отличия этих уровней между собой. Применение Энгельсом принципа субординации для классификации наук трудно переоценить. Только иерархическая классификация научных знаний дает возможность определить тенденции их развития как по экстенсивным путям, т. е. в пределах одного уровня, так и по интенсивным путям – при переходе с низших уровней на высшие. Энгельсовский принцип субординации научных знаний ориентирует на понимание научных революций, максимально полно и адекватно отражающее ход развития естествознания. Во-первых, он указывает на то, что научные революции представляют собой не изолированное явление, а серии взаимосвязанных

скачков в истории науки или отдельной ее отрасли . Это положение было рассмотрено Б. М. Кедровым на примере глобального развития естествознания, начиная с XV–XVI веков и до конца XX века [3]. Во-вторых, этот принцип требует выяснения последовательности научных революций, которая соответствовала бы не только необратимой восходящей линии развития науки, но и очередности (своевременности) переходов знания с низшего уровня на следующий – высший. И, в-третьих, принцип субординации указывает на преемственность в развитии научных знаний, на переходы в измененном виде рациональных знаний с одного уровня на другой, и, в этом смысле, он совершенно несовместим с гипотезой об изолированных друг от друга научных слоях, получивших название «парадигм» [4]. Положение о преемственности знаний при переходе науки с низшего уровня на высший было детально рассмотрено Нильсом Бором на материале физики. Бор установил соответствие между квантовыми числами, характеризующими состояние атома, и частотами классического движения электронов по орбитам, показав, что принцип соответствия является общей формой преемственности между старыми и новыми теориями, между концептуальными системами физики, представляющими разные уровни физического знания.

Принцип субординации вне зависимости от обстоятельств, связанных с его истоками в работах Энгельса, оказывается руководящим во многих работах, посвященных закономерностям развития научного знания. Например, в анализе развития теоретической химии у А. М. Бутлерова, показано как старые теории в измененном виде входят в состав более общих новых. В работах Вернера Гейзенберга история физики рассмотрена как последовательность четырех концептуальных систем [5] по схеме, которая аналогична изображенной на рис. 1.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ-ТЕСТЫ

1. Напишите из каких факторов, по Вашему мнению, состоит внутренняя мотивация исследователя.

2. С чего начинается перестройка оснований научной дисциплины?
3. Как называется организованный процесс умственного труда, направленный на производство новых знаний?
4. Методология науки – это:
 - а) учение о методах и процедурах научной деятельности;
 - б) система методов и исследовательских процедур;
 - в) теория науки;
 - г) совокупность методик изучения научных дисциплин.
5. Научный метод – это:
 - а) способ исследования явлений природы и общественной жизни, приводящий к обнаружению истины;
 - б) совокупность средств получения новых знаний;
 - в) совокупность приемов получения новых знаний;
 - г) система средств и приемов получения объективных знаний о мире.
6. Какая тенденция преобладала в XVII-XIX веках. в развитии науки?
7. Когда возникла наука?
8. Опишите основные цели науки.
9. Что такое научное направление?
10. Обозначьте основные критерии и нормы научного исследования.

2 ОСНОВНЫЕ ПОДХОДЫ ПЛАНИРОВАНИЯ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

2.1 Научная проблема и задачи научного исследования

Научная проблема – исходный пункт исследования. Вопрос о том, с чего начинается научное исследование, всегда был предметом споров и дискуссий. Мнение о том, что исследование начинается с наблюдения фактов (живое созерцание), и только потом создаются гипотезы и теории для их объяснений (абстрактное мышление) не выдерживает серьезной критики. Для наблюдения нужно избрать объект и определить цель наблюдений, сформулировать задачу, иметь интерес, точку зрения, одним словом иметь *проблему*.

Проблема как связывающее звено между наблюдением и теорией

Интуитивно кажется, что теоретические представления (идеи, обобщения, гипотезы) возникают раньше, чем наблюдения, т. е. с них начинаются исследования, а не с наблюдений. Однако эта ситуация напоминает пресловутый древний парадокс, что появилось раньше: яйцо или курица? Более сложным примером является решение основного вопроса философии, что первично: материя или сознание [6]?

С взаимоотношением наблюдений и теории дело обстоит именно так, как в перечисленных примерах, поскольку ни наблюдения, ни объясняющие их теоретические представления не могут выступать в качестве абсолютных исходных источников знания. Их необходимо рассматривать в диалектической взаимосвязи и взаимодействии. Возникновению новой проблемы обычно предшествует появление проблемной ситуации, которую связывают с обнаружением противоречия, или несоответствия, между новыми фактами и старыми методами их объяснения. При этом опираются на некоторое фоновое или исходное знание, принимаемое как заранее заданное (например, существующий научный язык, фундаментальные понятия и теории, стандарты рассуждений, допущения, надежно проверенные эмпирические результаты). Однако такие противоречия имеют принципиально иной характер, чем логические противоречия, которые требуется устранять, а не разрешать как в случае, когда число аномальных фактов, которые поначалу пытаются разрешить в рамках старой концепции, быстро возрастает. Тогда происходит отказ от старой парадигмы и начинается перестройка всей прежней концептуальной системы. Такие процессы обычно связаны с решением новых фундаментальных проблем, которые приводят к кризисам и научным революциям (например, замена классической механики на квантовую механику и теорию относительности). Возникновение проблем связано с особым прогрессивным характером научной деятельности, направленным на достижение более полного и глубокого познания мира.

Постановка научных проблем

После анализа проблемной ситуации, т. е. когда будет выяснена невозможность объяснения новых фактов в рамках старых методов и теорий, возникает необходимость в выдвижении, постановке и точной формулировке проблемы. Для этого необходимо ясно выразить следующее:

- **цель проблемы**, в каждом случае она конкретная, но в общей форме состоит в устранении несоответствия между новыми фактами и старыми способами их объяснения;
- **условия проблемы**, указывающие на те предпосылки, которые необходимы и достаточны для ее решения;
- **ограничения** – требования, которые накладываются на решение проблемы.

Немалую, если не первостепенную, роль в постановке проблемы, определении ее цели, условий и ограничений, играет личность ученого – его субъективные качества и жизненные обстоятельства. В качестве примеров можно привести Исаака Ньютона, Альберта Эйнштейна, Давида Гильберта и других выдающихся деятелей науки, нетривиальная постановка и решение проблем которыми приводила к революционному изменению хода дальнейших научных исследований.

Решение проблем и прогресс научного знания

Прежде всего, необходимо понять трудность, которая породила проблему, решение которой поначалу стремятся получить за счет как можно меньших изменений в прежней науке. Вначале можно выдвинуть сравнительно слабое предположение для устранения противоречия и попытаться проверить его с помощью новых фактов, и если это не удастся, то приходится выдвигать более сильные предположения, хотя обычно для первоначальной формулировки и решения проблемы выдвигаются несколько пробных предположений и гипотез, как например, о строении атома (модель Томсона, Резерфорда и др.). Алгоритм роста научного знания можно представить в виде схемы, изображенной на рис. 2.

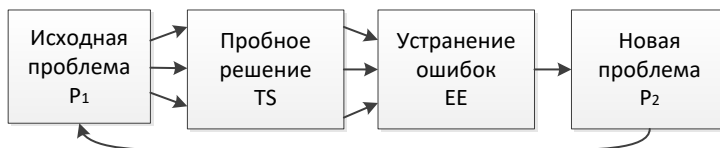


Рис. 2. Схема, отражающая рост научного знания

Поскольку возникновение проблемы P_2 в приведенной на рис. 2 схеме потребует нового пробного объяснения и его проверки, а для устранения ошибок – выдвижения следующей проблемы P_3 и т. д., то процесс исследования можно представить в виде непрерывного возобновления повторяющихся новых и новых циклов, но на более высоком уровне. В содержательном плане это означает, что **прогресс познания сопровождается выдвиганием и разрешением новых проблем**. Основываясь на этом, Карл Поппер делает вывод, что *«рост знаний идет от старых проблем к новым проблемам, посредством предположений и опровержений»* [7].

Оптимальный выбор пробных вариантов

Если считать не все гипотезы одинаково возможными и предположить, что некоторые из них более перспективны, возникает желание отказаться от случайного характера проб и ошибок при решении научной проблемы. Однако выбор «перспективных» гипотез задача сегодня не имеющая однозначных решений, несмотря на то, что существует общая математическая теория выбора и принятия решений, возникшая на основе теории исследования операций в годы Второй мировой войны. Идея этой теории весьма проста – это оценка (может быть индуктивная) того:

- а) насколько выбор решения (варианта) может оказаться полезным или эффективным для достижения поставленной цели;
- б) в какой мере его осуществление может быть вероятным среди других возможных вариантов.

Однако, к выбору научных гипотез это не применимо, поскольку их число ничем не ограничено, а критерии выбора, как правило, неизвестны. Правдоподобие гипотез означает лишь вероятность истинности знаний или меру приближения к ней, то есть лишь логическую вероятность (специфических логических отношений между суждениями), но не статистическую вероятность (относительную частоту случайных массовых событий (наблюдений)). К логическому анализу разработки гипотезы необходимо относиться очень внимательно. Необходимо проверять формулировку проблемы и предложенные варианты ее решений на:

- непротиворечивость;
- отсутствие тавтологий;
- информативность.

2.2 Методы логических рассуждений

Наиболее разработанными методами логических рассуждений являются *гипотетико-индуктивный* и *дедуктивный* методы.

Основатель **индуктивного метода** (от лат. *inductio* – наведение) – родоначальник материализма Нового времени Фрэнсис Бэкон, создавший в противовес Аристотелевскому «Органону» свой «Новый Органон», в котором изложил каноны или правила индуктивных рассуждений, считая их универсальным инструментом открытия любых новых истин о природе (алгоритмом открытия).

Индукция – умозаключение, в котором осуществляется переход от знаний об отдельных (частных) предметах какого-либо класса к знанию о всех (общих) предметах этого класса путем приведения аналогичных примеров. Индукция включает в себя следующие методы:

- **метод сходства** – если во всех случаях явлению *a* предшествует обстоятельство *A*, то оно и является причиной *a*;
- **метод различий** – если в одном случае явлению *a* предшествуют обстоятельства *ABC*, а во втором при отсутствии *A* отсутствует и *a*, то *A* – есть причина;

- **метод сопутствующих изменений** – если ABC предшествует a , но изменение A изменяет a , то A – есть причина a ;
- **метод остатков** – если сложное явление U распадается на ряд простых явлений a, b, c, d , но из опыта известно, что a вызывается обстоятельством $A, b – B, a c – C$, но d не вызывается ни A , ни B , ни C , то причина d – это D .

Метод Бэкона хорош, но ограничен только наблюдаемыми явлениями, а его выводы носят вероятностный характер, т. е. правдоподобны, и потому во второй половине XIX века начинается критика индуктивной модели научных открытий. Одним из первых против нее выступил создатель терминов «наука», «ученый», «ион», «катод», «анод» Уильям Уэвелл в своей книге «Философия индуктивных наук» [8]. Он утверждал, что открытие нового явления – это счастливое озарение, догадка при размышлениях о противоречиях в наблюдениях и теориях, и нет обоснований для выявления определяющей роли метода индукции в этом процессе.

Основателями **дедуктивного метода** (от лат. *deductio* – выведение) можно считать древних греков, которые использовали его в публичной полемике, положив в основу античную диалектику, как искусства поиска истины путем раскрытия противоречий в мышлении (Сократ, Платон, Аристотель, Евклид).

Дедукция – метод рационального познания, состоящий в извлечении необходимо выводимых следствий из совокупности исходных утверждений (посылок) путем строго логических законов как вывода от общего к частному.

То обстоятельство, что в процессе дедукции не происходит приращения информации и отсутствует возможность достижения принципиально нового знания, ранее не содержащегося в исходных посылах, послужило главной мишенью ее критики Бэконом, выступающим против силлогизмов Аристотеля.

Средствами современных математико-логических исчислений удалось обосновать вид совокупности правильных способов рассуждений в рамках определенного формализованного языка.

Критерием логической корректности получения следствия B из исходного множества утверждений C является строгое следование правилам операций данного исчисления.

Одной из первых систем **гипотетико-дедуктивного метода** в науке стала система классической механики, созданная Ньютоном, т. к. в ее основе лежат гипотезы, опирающиеся на огромное число наблюдений и экспериментов, проверенных и обоснованных опытом и практикой.

Ньютон в «Математических началах натуральной философии» на основе многочисленных наблюдений формулирует исходные понятия механики и три основных закона движения, важнейшим из которых для дальнейших логических выводов является второй закон для связи силы с изменением количества движения:

$$F = d(mV) / dt .$$

Считая $m = \text{const}$, можно получить логическую связь силы с ускорением:

$$F = md(V) / dt = ma .$$

Отсюда из двух других законов механики можно строго логически математическим путем вывести ранее открытый Галилеем закон свободного падения:

$$\text{при } g = d^2S / dt^2 = \text{const} \text{ (ускорение свободного падения), } V = dS / dt = gt .$$

Добавив к ним еще закон всемирного тяготения $F = gm_1m_2 / r^2$ можно также вывести закон Кеплера о движении планет.

Критерием истинности посылок и следствий в естественных науках всегда выступает **практика**.

Совершенно иначе обстоит дело с абстрактными математическими теориями, аксиомы которых не допускают непосредственной эмпирической проверки, изменения и уточнения, как это имеет место в естественных

науках, а выбираются исходя лишь из требований логики развития теории. Так, например, Н. И. Лобачевский выбрал новую аксиому о параллельных прямых (через данную точку к прямой на плоскости можно провести по крайней мере две прямые параллельные данной, вместо одной, как в геометрии Эвклида). Многочисленные неудачные попытки доказать ее привели Лобачевского к созданию новой (неевклидовой) геометрии. Вопрос о ее применимости для описания реального пространства решается уже не математикой, а физикой.

В описательных науках, где преобладают изолированные обобщения и гипотезы, установление логической связи между ними наталкивается на значительные трудности, так как нет критериев выбора основных (наиболее сильных) гипотез из множества существующих, из которых с применением логической дедукции можно было бы получить другие, увеличивающие общее их количество.

Например, Л. Н. Гумилев [9], характеризуя состояние современной этнографии, отмечал, что количество фактов уже настолько велико, что речь идет не об их пополнении, а о поиске среди них тех, которые имели бы отношение к делу. Т. е. их количество росло, но в новое качество не переходило.

Важным методом выдвижения эмпирических гипотез и законов является **абдукция** (от лат. *abductio* – сведение) идея которого была предложена Аристотелем в форме доведения рассуждения до абсурда. Абдукция представляет собой вид редуктивного вывода с той особенностью, что из первой посылки, которая является условным высказыванием, и заключения, сделанного из нее, вытекает вторая посылка (*первая посылка*: люди смертны; *заключение*: Сократ смертен; *вторая посылка*: Сократ тоже человек).

2.3 Методология теоретических исследований. Научные гипотезы и научные теории. Метод гипотез и его применение в науке

В предыдущем разделе гипотетико-дедуктивный метод рассмотрен как способ построения эмпирического знания. Однако его значение неизмеримо больше в науках, допускающих математическую обработку

данных, особенно в современной теоретической физике, использующей уже не наглядные модели (как в классической физике), а весьма абстрактные понятия, объекты и теории. Такими математическими гипотезами являются, например, те, с помощью которых была построена квантовая механика.

Одна из них была выдвинута немецкими физиками Максом Борном и Вернером Гейзенбергом. Они предположили, что форма уравнений Гамильтона:

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

для классической механики должна быть одинаковой и для атомных частиц, но вместо чисел они ввели в эти уравнения другие математические объекты – матрицы. Так возник матричный вариант квантовой механики.

В отличие от них Эрвин Шредингер исходил из волнового уравнения физики, но по-новому интерпретировал его члены, воспользовавшись предположением Луи де Бройля, что всякой материальной частице должна соответствовать волна определенной длины и наоборот. Так возник волновой вариант квантовой механики. Впоследствии была доказана эквивалентность обоих вариантов:

$$E = mc^2 \approx h\nu = \frac{hc}{\lambda}.$$

Гипотетический момент в этих построениях состоит в том, что зависимость, выраженную в виде математического уравнения, ученые перенесли (экстраполировали) из изученной области физических явлений на – неизученную. При этой экстраполяции неизбежно пришлось модифицировать прежнюю гипотезу, для чего либо изменять тип, либо общий вид уравнения, либо заменять (подставлять) в него математические величины другого рода, либо делать и то, и другое.

Для проверки следствий из такой математической гипотезы нужно ее интерпретировать физически, что едва ли не самая трудная часть исследования. Как говорил Поль Дирак, легче открыть математическую

форму какой-либо физической теории, чем соотнести ее с соответствующими физическими понятиями и объектами.

Причина этого в том, что в математике число основных идей, из которых происходит выбор, не так велико (ограничено), тогда как число физических интерпретаций значительно больше. Одна и та же математическая структура (уравнение, формула, функция и т. п.) может выражать самые разные конкретные зависимости между явлениями и процессами (например, закон Ома и закон Генри, или уравнение Аррениуса и экспоненциальное нарастание тока при переходных процессах в простых цепях и др.). Следует отметить, что в большинстве случаев математический формализм устанавливается раньше, чем его содержательное толкование, что свидетельствует о большой эвристической ценности математики в научном познании.

2.3.1 Методологические функции теоретических понятий, или зачем нужны научные теории

Важнейшая функция научных теорий – это дедуктивная систематизация научного знания, возможность вывода следствий, объяснения и расширения знания. Например, эмпирические наблюдения показывают, что дерево не тонет, а железо тонет в воде, однако железное дерево из Шри-Ланки тонет, а железный корабль не тонет. Для объяснения этого в науке введено понятие объемной плотности или удельного веса (отношения массы тела к занимаемому им объему $\rho = m/V$). Это дает возможность не только объяснить, но и логически предсказать, что будет с любым телом в любой жидкости.

Методологические принципы построения теорий подразделяются на логические и интуитивные факторы, с одной стороны, и эмпирические и рациональные, – с другой. **Логические факторы** служат для установления связи между основными и неосновными понятиями посредством определений, вывода (дедукции) из основных законов следствий, и их дальнейшее эмпирическое подтверждение. **Интуитивные факторы** (от лат. *intuitio* – созерцание) находятся вне логических рассуждений и

опираются на внезапное озарение после долгих раздумий (Менделеев, Бутлеров, Ньютон и др).

Эмпирические факторы составляют первичную инстанцию, на которой описываются понятия и утверждения для дальнейшей систематизации наблюдаемых фактов. **Рациональные факторы** состоят в выводе из эмпирических некоторых абстрактных понятий и утверждений, которые могут их объяснять. Огромную роль при этом играют схематизация и идеализация изучаемой действительности, выделение важности сторон (свойств) элементов реальных систем с отвлечением от других, менее существенных. Примером может служить модель идеального газа, как схематизации реального газа, установление логической связи между его параметрами исходя из эмпирических законов Бойля – Мариотта, Гей-Люссака и Шарля, обобщенных в уравнении Менделеева – Клапейрона:

$$PV = RT,$$

дальнейшее обобщение которой потребовало обращения к ненаблюдаемым объектам и теоретическим понятиям молекулярно-кинетической теории и введения поправок для учета объема и взаимодействия между молекулами (уравнение Ван-дер-Ваальса):

$$\left(p + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = RT.$$

При формулировании научной теории часто приходится обращаться к **эвристическим** (от греч. *εὕρισκω* – отыскиваю, открываю) приемам и методам, облегчающим и упрощающим решение научных задач путем организации процесса продуктивного творческого мышления. Эвристика появилась в Древней Греции как система обучения в школе Сократа, когда учитель приводит ученика к самостоятельному решению какой-либо задачи, задавая ему наводящие вопросы. Основой системы Сократа являлся принцип «знающего незнания», т. е. признание недостаточности знаний о любом, даже самом простом понятии и разворачивание на этой основе процесса познания-припоминания. «Я знаю, что ничего не знаю» - начальная эвристическая формула Сократа.

Эвристическими методами называются логические приемы и методические правила научного исследования и изобретательского творчества, которые способны приводить к цели в условиях неполноты исходной информации и отсутствия четкой программы управления процессом решения сложно алгоритмизируемых и тяжело формализуемых задач. Эвристические методы и моделирование присущи человеку и отличают его от систем искусственного интеллекта, в которых эвристический подход труднореализуем. Несмотря на это, с появлением и развитием вычислительной техники началось и продолжается бурное развитие эвристических методов. При использовании компьютера для решения задач программист, не зная точного способа, приводящего к цели, вводит в ЭВМ способ решения, основанный на правдоподобных рассуждениях самого программиста, или дает возможность машине проводить правдоподобные рассуждения (на основе введения в машину алгоритма формирования рассуждений, опирающегося на машинный и человеческий опыт решения задач данного класса). Такие компьютерные программы получили название эвристических.

Стоит отметить, что важной особенностью именно человеческой деятельности является наличие в ней элемента случайности: необъяснимые поступки и странные решения часто лежат в основе оригинальных и неожиданных идей. Таким образом, задача человека как *homo sapiens* совершенствоваться в эвристических процедурах, а не в выполнении алгоритмизированных операций.

2.3.2 Методы анализа и построения научных теорий

Научная теория представляет собой систему исходных понятий и основных законов, из которых с помощью определений могут быть образованы все другие ее понятия, а из основных законов логически выведены остальные частные законы и утверждения. Для сравнения: в математических теориях вместо основных законов говорят об аксиомах, а вместо частных – о теоремах. Основными понятиями являются числа, геометрические и абстрактные образы (точки, линии, группы, матрицы и

т. д.). В термодинамике основные законы это первое, второе и третье начала, основные понятия – система, температура, энтропия и др. В таком виде теория появляется в результате трудного начального поиска простейших эмпирических постулатов и законов, а затем более абстрактных определений, понятий и теоретических построений большей степени общности, и только в конце приходят к основным теоретическим законам. В своей завершенной форме теория представляет собой единую, целостную систему знания, элементы которой – понятия, обобщения, аксиомы и законы – связываются определенными логическими соотношениями. Поэтому создание теории как определенной системы научного знания является делом значительно более сложным, чем разработка и проверка отдельной гипотезы или закона.

Общая структура научной теории

В рамках теории все ранее обособленные, изолированные и не связанные друг с другом знания и формы мышления – отдельные научные понятия, суждения, гипотезы, законы и принципы – становятся элементами единой концептуальной системы – отображения определенной области объективной реальности.

Рассматривая теорию как форму рациональной системной деятельности, ее можно четко отделить:

- от практической деятельности, в т. ч. от таких специфических форм научной практики, как наблюдения и эксперименты;
- от эмпирического знания, непосредственно связанного с чувственно-практической деятельностью;
- от разрозненных форм мышления, с переходом к законченному целостному знанию, отдельными элементами которого являются абстракции.

Логически теорию можно определить как концептуальную систему, элементами которой служат понятия и суждения различной степени общности (обобщения, гипотезы, законы и принципы), связанные между собой двумя видами логических отношений:

- исходные определения, посредством которых стараются определить все вторичные понятия;
- отношения дедукции, с помощью которых из аксиом, основных законов или принципов теории логически выводятся теоремы, производные (частные) законы и другие утверждения.

Общее строение теории можно представить в виде следующей схемы:

- эмпирический базис, содержащий все основные факты и данные, а также результаты их простейшей (логической) обработки;
- теоретический базис, включающий основные допущения, аксиомы, постулаты, фундаментальные законы и принципы;
- логический аппарат, содержащий правила определения вторичных понятий и правила вывода следствий (или теорем) из аксиом, производных, или не основных законов из фундаментальных законов и принципов;
- потенциально допустимые следствия и утверждения теории.

Различие между эмпирическим и теоретическим базисом в первом приближении можно определить так: эмпирические понятия – это понятия о наблюдаемых объектах, а теоретические – о ненаблюдаемых (абстрактных). Система, т. е. иерархически выстроенное соотношение таких абстрактных объектов вместе с законами, описывающими взаимосвязи между ними, играют главную роль в построении научной теории, поэтому такие системы называют концептуальным ядром, базисом теории, или фундаментальной теоретической схемой (фундаментальной теоретической моделью, которая в определенный момент может замещать реальную систему). Но в ходе развития научного познания ненаблюдаемые ранее объекты становятся наблюдаемыми в связи с развитием средств и методов наблюдений. При возникновении заметных расхождений между реальной системой и теоретической моделью, требуется корректировка, модификация или даже замена старой теории на новую.

2.4 Модели развития науки

2.4.1 Гипотетико-дедуктивная модель науки

Гипотетико-дедуктивная модель, пришедшая на смену индуктивной, представляет концептуальную структуру научной теории в виде системы взаимосвязанных гипотез и выводимых из них дедуктивных следствий и является первым шагом к построению теории. Именно поэтому гипотетико-дедуктивный метод стал применяться не только для построения частных теорий, но и в качестве новой модели развития науки.

Однако, если прежняя индуктивная модель пыталась объяснить, как возникают по крайней мере простейшие открытия в науке, то дедуктивная модель ориентируется исключительно на обоснование и проверку уже существующего знания, а в качестве метода поиска новой идеи должен использоваться метод проб и ошибок, являющийся фундаментальным методом эволюционного процесса, реализуемом живой природой в процессе адаптации организмов. «От амебы до Эйнштейна всего лишь один шаг, оба действуют методом проб и устранения ошибок» [7]. Разница лишь в том, что амеба не осознает своих ошибок, и их устранение означает устранение самой амебы. Человек же может заменить ошибочную гипотезу на новую, и снова ее проверить. Чем больше будет гипотез, тем более вероятен успех применения этого метода, однако ничего более конкретного о самом процессе генерирования и выбора гипотез он не дает. Соответственно, решение важнейшей проблемы методологии научного знания, его возникновения и роста не укладывается в рамки гипотетико-дедуктивного метода.

2.4.2 Абдукция и поиск объяснительных научных знаний

Ни индуктивный, ни дедуктивный методы не позволяют осуществлять поиск новых научных знаний с требуемой эффективностью. В конце XIX века Чарльзом Пирсом был развит **абдуктивный метод**, использующий известные методы, но иначе анализирующий связь фактов с научными открытиями. Дедукция доказывает, что нечто должно быть,

индукция показывает, что нечто действительно существует, а абдукция просто предполагает, что нечто может быть. Здесь под «нечто» понимается связь между наблюдаемыми фактами (явлениями), систематизирующими их простейшими абстрактными понятиями (определениями) и их обобщениями (категориями). Затем на этой основе отбираются базовые принципы (постулаты, аксиомы), составляющие исходные положения начальной формы систематизации научных знаний. Составным звеном между ними, отражающим наиболее существенные устойчиво повторяющиеся объективные внутренние связи в природе, обществе и мышлении, выступают научные законы, устанавливающие определенные соотношения между понятиями и категориями. Более общей формой систематизации и обобщения знаний является научная гипотеза, т. е. предположение, объясняющее научные законы и связи между понятиями и категориями в черновом варианте, еще не проверенном окончательно.

Далее на основе всесторонне проверенных гипотез строится научная теория – наиболее высокая форма обобщения и систематизации научных знаний, т. е. учение об обобщенном опыте (практике), в котором формулируются научные принципы и методы, позволяющие познать существующие процессы и явления, проанализировать действие на них разных факторов, предложить рекомендации по их использованию для дальнейшего развития научных знаний и применения в практической деятельности.

При всей внешней схожести абдукция, в отличие от индукции, приводит не просто к вероятностным заключениям, а служит специфическим методом поиска научных гипотез для вероятностного, т. е. не безошибочного объяснения имеющихся фактов, а, в отличие от дедукции, рассуждения начинаются не с заранее заданной гипотезы с целью вывода следствий, а прямо противоположно – рассуждения начинаются с анализа и оценки установленных фактов, которые и определяют (детерминируют) выбор гипотезы для их объяснений по следующей логической схеме:

- наблюдается некоторое новое и необъясненное пока явление P;

- Р могло бы быть объяснено, если бы выдвинутая гипотеза Н была бы истинной;
- следовательно, имеются основания думать, что гипотеза Н – истинна.

При этом объяснительная гипотеза должна удовлетворять трем требованиям:

- должна объяснять не только эмпирически наблюдаемые факты, но и факты, непосредственно не наблюдаемые, но проверяемые косвенным путем;
- должна быть сформулирована как вопросительное высказывание, т. е. содержать определенный вопрос, на который в ходе рассуждений должен быть получен ответ;
- должна быть проверяемой, причем эта проверка не должна ограничиваться только подтверждением наблюдаемыми фактами, а критерий ее опровержения при всей его логической корректности слугит лишь средством исключения ложных гипотез.

Отмеченные особенности абдуктивного метода обусловили его широкое применение в различных сферах человеческой деятельности: при раскрытии преступлений, при постановке медицинских диагнозов, при проектировании и др.

В естественнонаучных и социальных исследованиях абдуктивные рассуждения чаще всего можно использовать для открытия эмпирических законов, устанавливающих самые необходимые, регулярные связи между наблюдаемыми свойствами и отношениями явлений, но для вывода теоретических законов требуется обращение к более тонким и глубоким гипотезам, содержащим абстрактные понятия и суждения, которые нельзя непосредственно вывести из опыта. Так, озарение Ньютона о всемирном тяготении, спровоцированное падением яблока, базировалось не только на анализе этого факта, но и на знании и глубоком понимании им ранее открытых законов Галилея и Кеплера.

Еще сложнее обстоит дело в социально-историческом познании, когда приходится учитывать не только объективные процессы, но и

субъективную волю, цели и мотивы отдельных людей и их групп, классов и сообществ.

Таким образом, абдуктивный метод Пирса сам по себе не дает разумных связей между фактами и гипотезой, предлагаемой для их объяснений. С одной стороны, могут использоваться самые фантастические гипотезы, а с другой – сама гипотеза, предлагаемая для объяснений, на деле предполагается известной и найденной каким-либо другим (не абдуктивным) способом, например, по аналогии с ранее рассмотренным прецедентом. Поэтому к схеме Пирса стали добавлять еще одну посылку (Рассел Хэнсон «схема открытия») [7]:

- D – совокупность данных (фактов, наблюдений, экспериментов и т. д.);
- гипотеза H объясняет эти данные, если она окажется истинной;
- никакие другие гипотезы не могут объяснить D так же хорошо, как H;
- следовательно, гипотеза H максимально правдоподобна.

Вопрос о критериях такой оценки очень сложен. Самым простым является количество фактов, которое она объясняет, а более сложным – объясняет более важные факты, чем тривиальные, а еще более сильные гипотезы должны давать новую информацию, чем содержащуюся в этих фактах (быть прогностичными). В настоящее время дискуссии по поводу логико-методологических проблем открытия продолжаются, главным образом среди философов и психологов, вплоть до лозунга «методология открытия без логики открытия», основанного на существовании особого вида «инстинкта открытия», который руководит нашими догадками, с одной стороны, и поиском логических схем методологии эвристических знаний, с другой.

2.5 Методы и функции научного объяснения и научного понимания

Объяснение является важнейшей функцией научного и отчасти обыденного познания. Что произошло? Научный ответ на этот вопрос заключается в дедуктивном выводе утверждений о наблюдаемом факте исходя из обобщения уже известных понятий, гипотез, теорий. Обычно это делается путем ссылки на другое явление, предшествующее данному наблюдению, как отношение причины и следствия, причем могут

использоваться как детерминистический, так и вероятностно-статистический подходы. Первый используется, когда известны все исходные (начальные) условия и универсальные законы, а второй – когда часть из них носит предположительный характер.

Например, объяснение, почему палка, опущенная в воду, кажется сломанной в спокойной воде и колеблющейся при волнении, требует обращения к эмпирическому закону преломления света, а объяснение этого закона – к более глубоким ненаблюдаемым объектам фундаментальной корпускулярно-волновой теории электромагнитного излучения. Однако в общественных и гуманитарных науках такой подход к объяснению зачастую неприемлем, т. к. не всякое индивидуальное поведение человека можно подвести под детерминированное и даже вероятностное толкование. Возникают новые толкования – объяснение на основе поиска мотиваций, цели, смысла и намерений в деятельности людей, в том числе роли и значения норм поведения людей в обществе, их неприятие и отвержение (последнее обычно в исторических моделях объяснений).

Такой подход к объяснению более нацелен на понимание, не сводящееся к дедуктивно-логическому, объективному объяснению, а связанное с постижением мыслей, чувств субъективно-психологического духовного лица человека, вживанием в этот мир, носит название **герменевтики** (от греч. ἑρμηνεύω – толкую). Роль современных толкователей играют пресс-секретари или PR-менеджеры (специалисты по связям с общественностью), растолковывающие высказывания руководителей, филологи-переводчики древних текстов и мифов, театральные критики и искусствоведы, священники всех религий, юристы, популяризаторы науки и др.

Коммуникативная и познавательная деятельность человека теснейшим образом связана с интерпретацией, или истолкованием, тех или иных знаков, символов, звуков, слов, жестов и действий. Это позволяет рассматривать понимание как семантическую интерпретацию, прежде всего языка, служащего универсальным способом общения и коммуникации, в

том числе, научного языка, выявление смысла научных знаковых систем (математической, химической, физической, филологической, музыкальной и т. д.). Каждый специалист вносит в них свое понимание и истолковывает их по-своему. В связи с этим возникает вопрос – возможно ли понимание не только результатов духовной деятельности людей в социально-гуманитарном познании, но и понимание явлений природы в естествознании, явлений, существующих независимо от человека и его сознания (т. е. есть ли в них смысл)? В такой постановке ответ может быть только один – ни о каком понимании самой природы, наличии смысла в ее явлениях и процессах не может быть и речи. Внутренний элемент системы не может понимать ее в целом. Тем более нельзя говорить о взаимопонимании, отличающемся от понимания, – просто интерпретации текстов и знаковых структур. Взаимопонимание связано с раскрытием смысла слов и выражений языка конкретных людей как носителей информации в их диалоге путем установления определенного соответствия между семантическими полями (множеством значений слов и выражений в беседе, разговоре, споре участников диалога). Взаимопонимание определяется контекстом, и вырванные из него слова, фразы и утверждения и отрицания часто могут противоречить вкладываемому в них истинному смыслу. Расширение словарного запаса происходит всю жизнь. Вне общения любой язык забывается, т. е. понимание и в естественных науках выступает в качестве процесса развития познания, а также играет важнейшую роль в **предсказаниях, предвидении и прогнозировании**.

2.6 Методы предвидения и прогнозирования в науке (предсказаний и пророчеств), их интерпретация – понимание

Предвидение новых событий и явлений составляет важнейшую и вместе с тем сложнейшую функцию науки, по которой судят о ее эффективности и практической применимости. Все наше знание, в конечном счете, ориентировано на предвидение нового в науке. Его «надо знать, чтобы предвидеть» (Огюст Конт) [10]. Научное предвидение (научный

прогноз) отличается от исторических предсказаний и пророчеств, имеет другую логическую структуру и другую реальную основу.

В отличие от объяснений, предсказания относятся не к уже существующим, а к еще не установленным событиям, и могут быть направлены не только в будущее, но и в прошлое (ретросказания), как правило, относясь к законам частного типа, получаемым путем дедукции, и нося вероятностный (правдоподобный) характер. Так Урбен Леверье с помощью математического анализа астрономических наблюдений на основе законов Кеплера и Ньютона предсказал существование планеты Нептун; Д. И. Менделеев систематизировав данные о свойствах элементов и открыв Периодический Закон, предсказал существование и свойства еще не обнаруженных к тому времени элементов – германия, галлия и скандия; Поль Дирак при построении релятивистской теории электрона получил уравнение, предсказавшее существование антиэлектрона (впоследствии экспериментально обнаруженного Карлом Андерсоном и названного позитроном) и др.

Прогнозирование является особым типом научного предвидения, связанным с разработкой плана вероятного хода события или процесса, представляя первую стадию всех исследований, прежде всего, прикладного характера. Поисковый прогноз характерен для фундаментальных разработок, но оба типа прогноза должны опираться на существующие нормы и критерии прогнозирования, используя все современные методы и средства исследования (экспериментальное, математическое и вычислительное моделирование, вероятностно-статистический анализ, приемы экстраполяции, теорию выбора и принятия решений, эвристические методы).

В настоящее время к прогнозированию часто прибегают футурологи для построения вероятных сценариев развития цивилизации. Результаты этих прогнозов пока трудно оценить, однако можно констатировать, что методы прогнозирования достаточно хорошо работают в естествознании, хуже – в экономике, и практически не работают в социально-исторических и гуманитарных науках. Наряду с научными предсказаниями люди

используют часто приметы, догадки, домыслы, которые, если их тщательно подобрать, дают вполне адекватные результаты, но на короткий период времени, как, например, прогноз погоды на ограниченной территории, или исторические ретросказания ближайшего прошлого (например, Центурии Мишеля Нострадамуса). Главная задача таких прогнозов для исторического будущего, по мнению многих социологов и историков, заключается в выявлении ненамеренных социальных последствий человеческих действий (например, застраховавший свою жизнь человек способствует развитию страхового бизнеса, хотя это явно не входило в его намерения). С другой стороны, сторонники так называемой социальной инженерии не задаются никакими целями, что часто приводит к социальным утопиям, социальным конфликтам и войнам. Так, социальные революции в прошлом и настоящем зачастую приводят к непредвиденным результатам для их организаторов, участников и наследников (Европа, Россия, Америка, современный арабский мир).

2.7 Применение научного прогнозирования при решении химических задач

2.7.1 Прогнозирование формирования новых соединений со строением фаз Руддлесдена – Поппера

Прогнозу получения новых оксидов рассматриваемого класса соединений посвящен ряд работ [11-15]. В указанных работах анализируется применение «структурных карт», построенных на сопоставлении двух геометрических критериев, для определения интервалов потенциально-возможного образования рассматриваемых соединений, что позволяет на основе смоделированных уравнений в дальнейшем прогнозировать получение новых соединений. Рассматриваемый подход позволяет очертить области скопления «наибольшего» числа рассматриваемых соединений, и таким образом установить границы существования и устойчивости изучаемых фаз. По зависимости, связывающей соотношение радиусов ионов А и М r_A^{IX}/r_M^{VI} и объема элементарной ячейки V (Å^3) (рассчитываемый, как $V = a^2c$), авторы

работы [16] определили диапазон значений, в котором реализуются соединения со структурой K_2NiF_4 : $r_A^{IX}/r_M^{VI} = 2.0 - 2.3$, $V = 150 - 300$ (\AA^3).

В качестве примеров приложения указанных корреляций прогнозируется образование оксидов $LnBaAlO_4$ ($Ln = Gd - Lu$) и $LnSrAlO_4$ ($Ln = Pm - Lu$), входящих по рассчитанным величинам в указанный диапазон значений. Геометрические границы существования однослойных фаз Руддлсдена – Поппера оценивались и в других работах [11-12]. Исходя из данных указанных публикаций, было показано, что формирование однослойных фаз Руддлсдена – Поппера возможно при выполнении условий: $r_A^{XIII}/r_M^{VI} = 1.8 - 1.9$. Таким образом, можно отметить существенно расходящиеся данные в значениях по рассматриваемому критерию r_A^{IX}/r_M^{VI} .

В нашем исследовании за основу определения границ устойчивости сложных оксидов со строением однослойных фаз Руддлсдена – Поппера взят близкий к проанализированному выше подход, основанный на сопоставлении геометрических параметров: размерного параметра δ (%) и фактора толерантности перовскитового блока t_p с параметром ν , показывающего число (долю) соединений из набора потенциально возможных, формирующихся в рассматриваемом интервале значений, параметров δ и t_p .

На рис. 3, приведена схема, представляющая упрощенный механизм сопряжения слоев $LnAlO_3$ (P) и каменной соли MO (RS), формирующих кристаллическую структуру однослойных фаз Руддлсдена – Поппера. Геометрическую соразмерность фрагментов блоков со строением перовскита и каменной соли можно оценить путем сравнения размеров площадей этих блоков или параметров элементарной ячейки, в частности, a , как показано на рис. 3.

Гранецентрированная элементарная ячейка со строением типа каменной соли может быть преобразована к тетрагональной объемно-центрированной ячейке с параметром a_{RS} , близким к a_P по следующему соотношению:

$$a_{RS} \approx \sqrt{2}a_P.$$

Обозначив за d длину связи Ln/M – O можно записать, что:

$$d_{\text{Ln-O}} \approx \frac{\sqrt{2}}{2} a_{\text{P}}.$$

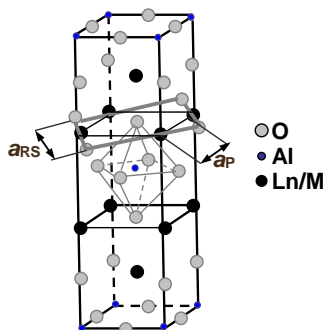


Рис. 3. Схема, отражающая механизм совмещения слоев со структурами перовскита (P) и каменной соли (RS) в однослойной фазе Руддлеслидена – Поппера

Параметр a элементарной ячейки блока со строением каменной соли:

$$a_{\text{RS}} = 2d_{\text{M-O}}.$$

Тогда:

$$\frac{2d_{\text{M-O}}}{\sqrt{2}} \approx \frac{2d_{\text{Ln-O}}}{\sqrt{2}} \text{ или } d_{\text{M-O}} \approx d_{\text{Ln-O}},$$

т. е. при учете степени совмещения слоев со строением LnAlO_3 (P) и каменной соли MO (RS) длины связей M – O и Ln – O, в первом приближении, равны друг другу.

Обозначим за δ параметр, характеризующий относительное различие в размерах сопрягаемых блоков и равный отношению разности длин связи $\text{M}^{\text{VIII}} - \text{O}$ и $\text{Ln}^{\text{XII}} - \text{O}$ (при M и Ln, находящихся в 8 и 12 координированном состояниях, соответственно) к длине связи $\text{Ln}^{\text{XII}} - \text{O}$:

$$\delta = \frac{d_{\text{M-O}} - d_{\text{Ln-O}}}{d_{\text{Ln-O}}} 100\%.$$

При анализе устойчивости однослойных фаз Руддлсдена – Поппера необходимым является также учет возможности существования и устойчивости самого перовскитового блока LnAlO_3 . В качестве критерия, учитывающего степень устойчивости перовскитовой ячейки, использован фактор толерантности t_p для соединений LnAlO_3 .

Введенный статистический параметр:

$$v = \frac{n_{11}}{n_{\Sigma}} 100\%.$$

показывает число (долю) соединений однослойных фаз Руддлсдена – Поппера LnMAIO_4 ($\text{Ln} = \text{La-Lu}$; $\text{M} = \text{Mg, Ca, Sr, Ba}$; табл. 1, рис. 4) из набора потенциально возможных, формирующихся в выбранном интервале значений, параметров δ и t_p .

В табл. 1 приведены результаты расчета величин δ и t_p для всех потенциально-возможных однослойных фаз со строением Руддлсдена – Поппера с сопоставлением с соединениями рассматриваемого класса, информация по которым приведена в [15]. На основании представленных в табл. 1 данных, построены зависимости, приведенные на рис. 4.

Схемы рис. 4 представляют собой систему обобщенных данных, учитывающих как степень сопряжения фрагментов перовскитового блока LnAlO_3 (P) и слоя каменной соли MO (RS), формирующих кристаллическую структуру фаз Руддлсдена – Поппера, так и влияние степени искажения перовскитоподобного блока LnAlO_3 на их устойчивость. Представленные на рис. 4 зависимости v от δ и t_p для однослойных P/RS позволяют сформулировать закономерности, определяющие потенциальную возможность существования и устойчивость слоистых фаз Руддлсдена – Поппера, состоящие в том, что их формирование наиболее вероятно в интервале значений δ , лежащим в пределах от -11 до $+3$ % и t_p от 1.01 до 0.97. Таким образом, образование однослойных фаз Руддлсдена – Поппера наиболее вероятно, если длины связей Ln-O и M-O будут удлиняться или укорачиваться не более чем на 5% от их расчетных равновесных значений, определенных на основании данных системы эффективных ионных радиусов [16].

Таблица 1 – Однослойные фазы Руддлеслидена–Поппера, приведенные по литературным данным, в сопоставлении с фактором толерантности t_p и величинами δ

LnMgAlO_4	[*]	t_p^{Al}	δ (%)
LaMgAlO ₄	–		–15.81
LaCaAlO ₄	+	0.9995	–7.35
LaSrAlO ₄	+		–2.57
LaBaAlO ₄	+		3.68
NdMgAlO ₄	–		–14.23
NdCaAlO ₄	+	0.9811	–5.62
NdSrAlO ₄	+		–0.75
NdBaAlO ₄	–		5.62
SmMgAlO ₄	–		–16.73
SmCaAlO ₄	+	1.0105	–8.36
SmSrAlO ₄	+		–3.64
SmBaAlO ₄	–		2.55
EuMgAlO ₄	–		–15.81
EuCaAlO ₄	+	0.9984	–7.35
EuSrAlO ₄	+		–2.57
EuBaAlO ₄	–		3.68
GdMgAlO ₄	–		–15.50
GdCaAlO ₄	+	0.9958	–7.01
GdSrAlO ₄	+		–2.21
GdBaAlO ₄	–		4.06
TbMgAlO ₄	–		–14.87
TbCaAlO ₄	+	0.9896	–6.32
TbSrAlO ₄	–		–1.49
TbBaAlO ₄	–		4.83
DyMgAlO ₄	–		–14.23
DyCaAlO ₄	+	0.9811	–5.62
DySrAlO ₄	+		–0.75
DyBaAlO ₄	–		5.62
HoMgAlO ₄	–		–13.91
HoCaAlO ₄	+	0.9775	–5.26
HoSrAlO ₄	+		–0.38
HoBaAlO ₄	–		6.02
ErMgAlO ₄	–		–12.60
ErCaAlO ₄	+	0.9632	–3.82
ErSrAlO ₄	–		1.15
ErBaAlO ₄	–		7.63
TmMgAlO ₄	–		–12.26
TmCaAlO ₄	+	0.9595	–3.45
TmSrAlO ₄	–		1.53
TmBaAlO ₄	–		8.05
YbMgAlO ₄	–		–11.92
YbCaAlO ₄	+	0.9559	–3.08
YbSrAlO ₄	–		1.92
YbBaAlO ₄	–		8.46
LuMgAlO ₄	–		–11.58
LuCaAlO ₄	+	0.9522	–2.70
LuSrAlO ₄	–		2.32
LuBaAlO ₄	–		8.88

* – символом [+/-] обозначены соединения, отраженные/отсутствующие в [15]; значения ионных радиусов, необходимые для расчета размерных параметров t_p и δ , взяты из работы [16].

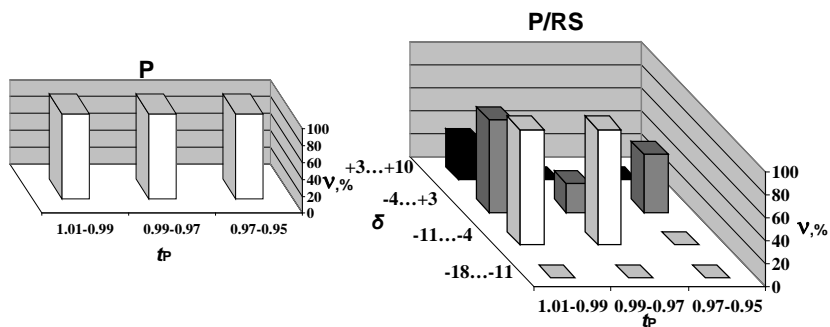


Рис. 4. Доля известных сложных алюминатов P^{Al} , P^{Al}/RS ; со структурой перовскита и фаз Руддлесдена – Поппера в зависимости от значений параметров δ и t_P

Подтверждением указанных закономерностей является синтез новых соединений, входящих в соответствии с прогнозом в указанный диапазон значений. Набор геометрических параметров, предложенных в исследовании, позволил теоретически предсказать возможность существования оксида $DySrAlO_4$, выбранного в качестве модельного, входящего в соответствии с прогнозом в интервал значений δ ($-11, +3$) и t_P ($1.01, 0.97$).

Таким образом, на основании предложенных зависимостей теоретически предсказана возможность образования оксида $DySrAlO_4$.

2.7.2 Экспериментальное подтверждение прогноза о формировании новой фазы $DySrAlO_4$

Методом твердофазных химических реакций впервые синтезировано новое химическое соединение со структурой типа слоистой фазы Руддлесдена – Поппера $DySrAlO_4$.

Наряду с данными рентгеновской дифракции, рентгеноспектрального микроанализа (рис. 5) для подтверждения формирования оксида $DySrAlO_4$, ранее не описанного в литературе, предлагается подход, основывающийся на построении теоретической рентгеновской дифрактограммы целевого продукта синтеза по методике, представленной в работе [15]. Расчет включает использование полученных экспериментальных данных

параметров элементарной ячейки образца, синтезированного при 1500°C (рис. 5) и соответствующего стехиометрии DySrAlO_4 , подтвержденной данными элементного анализа (рис. 5). Определение параметров элементарной ячейки DySrAlO_4 , составившее: $a = 3.678 (\pm 0.004) \text{ \AA}$, $c = 12.29 (\pm 0.01) \text{ \AA}$, $V = 166.2 (\pm 0.4) \text{ \AA}^3$, было выполнено путем сопоставления экспериментально полученных данных по межплоскостным расстояниям и ряда линий с известными индексами отражений hkl структурного типа K_2NiF_4 (пр. гр. $I4/mmm$, 139) [15].

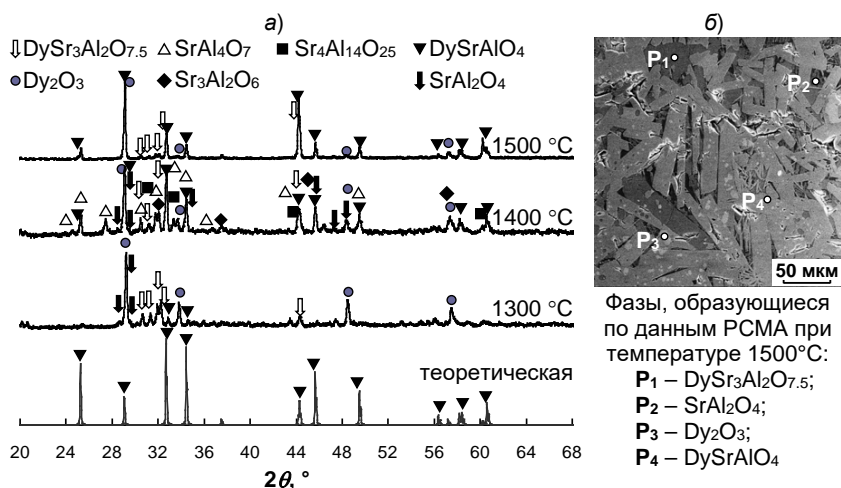


Рис. 5. Результаты анализа образцов, состава, отвечающего стехиометрии соединения DySrAlO_4 : а) – рентгеновские дифрактограммы образцов после их термической обработки на воздухе при различной температуре в сопоставлении с теоретической рентгеновской дифрактограммой соединения DySrAlO_4 ; б) – данные сканирующей электронной микроскопии образца после термической обработки на воздухе при 1500 °C

При построении теоретических дифрактограмм за основу были взяты представления о пространственной группе синтезируемого соединения – $I4/mmm$ [15], сведения о типе и координатах атомов элементов x/a , y/b , z/c ,

входящих в структуру исследуемых составов, заселенности структурных позиций элементов (G), изотропном термическом параметре (B).

В табл. 2 приведены данные по межплоскостным расстояниям (d), углах 2θ ($^\circ$), индексам отражений hkl , интенсивностям рефлексов I , полученные при расчете теоретической дифрактограммы соединения $DySrAlO_4$.

Таблица 2. Рассчитанные данные, полученные при расчете теоретической дифрактограммы соединения $DySrAlO_4$: межплоскостное расстояние (d), углы 2θ ($^\circ$), индексы отражений hkl , интенсивности рефлексов I

№	$2\theta_{теор.}$	$2\theta_{эксп.}$	$d_{теор.}$	$d_{эксп.}$	hkl	$I_{теор.}$
1	14.40	–	6.144	–	002	2
2	25.25	25.28	3.523	3.521	011	60
3	29.04	29.04	3.072	3.072	004	30
4	32.70	32.71	2.736	2.736	013	100
5	34.46	34.46	2.600	2.600	110	89
6	37.52	37.52	2.395	2.395	112	7
7	44.18	44.22	2.048	2.047	006	12
8	44.29	44.34	2.043	2.042	015	31
9	45.67	45.67	1.985	1.985	114	77
10	49.53	49.50	1.839	1.839	020	55
11	51.85	–	1.761	–	022	<1
12	56.39	56.34	1.630	1.631	121	18
13	57.20	57.17	1.609	1.609	116	10
14	58.18	58.21	1.584	1.584	017	22
15	58.44	58.44	1.578	1.578	024	22
16	60.19	60.22	1.536	1.535	008	9
17	60.62	60.58	1.526	1.527	123	48
18	68.52	68.52	1.368	1.368	026	13
19	68.60	68.60	1.367	1.367	125	19

Согласно данным теоретического расчета (табл. 2) в сопоставлении с экспериментальными результатами рентгенофазового анализа образцов, термообработанных в интервале температур 1300 – 1500 $^\circ\text{C}$, следует отметить полное соответствие рефлексов, относимых к набору характеристических линий, кристаллизующихся в структурном типе K_2NiF_4 однослойных фаз Руддлессена – Поппера (рис. 5,а). Исследование полученных образцов методом сканирующей электронной микроскопии и

рентгеноспектрального микроанализа также свидетельствует о том, что синтезированная новая фаза является преобладающей (рис. 5,б, фаза P_4).

Таким образом, предложенный подход определения возможности существования однослойных фаз Руддлесдена – Поппера показал перспективность использования его в прогнозировании образования, а затем и синтеза новой фазы – соединения $DySrAlO_4$.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ-ТЕСТЫ

1. Как называется метод перехода от знания отдельных фактов к знанию общего, к эмпирическим обобщениям?
2. Какое название носит метод перехода от общих суждений к частным?
3. Как называется совокупность сложных теоретических и практических задач, подлежащих решению?
4. Чем характеризуется научная проблема?
5. Как преодолевается научная проблема и к чему приводит ее решение?
6. Гипотеза может быть понята как:
 - а) предположение о природе объекта, явления или процесса;
 - б) форма теоретического знания, предсказывающая новые свойства или характеристики объекта, явления или процесса;
 - в) научное предположение, выдвигаемое для объяснения какого-либо явления и требующее проверки на опыте, а также теоретического обоснования;
 - г) теория, не имеющая подтверждения.
7. Как называется форма организации, дающая целостное представление о закономерностях и существенных связях определенной области действительности?
8. Кто открыл метод индукции, Френсис Бэкон или Рене Декарт?
9. Может ли эмпирическое знание быть критерием истинности теории?
10. Какие законы входят в состав научных теорий?
11. Как происходит смена научных традиций, стиля мышления?
12. С чего начинается перестройка оснований научной дисциплины?

3 МОДЕЛИРОВАНИЕ КАК МЕТОД НАУЧНОГО ПОЗНАНИЯ

Моделирование как специфическое средство и форма познания не является изобретением последних веков. Исторически первыми моделями можно считать языковые знаки, возникшие в ходе созревания человечества и постепенно превратившиеся в разговорный язык. Следующим этапом развития моделирования, вероятно, было возникновение числовых знаков. Первоначально сведения о результатах счета сохранялись в виде зарубок. Постепенное совершенствование этого метода привело к представлению чисел как системы знаков. Начертание римских цифр (I, V, X, C, M,) говорит о том, что именно зарубки были их прототипом. Дальнейшая эволюция знаковых моделей вылилась в возникновение письменности и математической символики.

Качественный скачок в развитии моделирование получает во времена расцвета Древней Греции (как, впрочем, и практически все существующие к тому времени области знания). Тогда была создана первая геометрическая модель солнечной системы, Анаксимандр предложил свою модель Земли и Неба, Гиппократ для изучения человеческого глаза воспользовался физически аналогичной моделью – глазом быка, Евклид создал учение о геометрическом подобии, Демокрит предположил, что материя состоит из неделимых частиц – атомов. Многие представления тех времен являются прообразами современных моделей.

По мере развития и укрупнения механического производства, металлургии, строительства и т. д. стала обнаруживаться недостаточность геометрического подобия физически однородных объектов для прогнозирования свойств объектов больших размеров на основании свойств объектов меньших размеров. Следующий шаг после Евклида в развитии учения о подобии был сделан Исааком Ньютоном, который сформулировал условия подобия механических явлений. Далее развитие длительное время шло путем определения частных условий подобия для явлений только определенной физической природы (работы И. П. Кулибина, Л. Эйлера в области строительной механики, В. Л. Кирпичева в области

упругости и др.). И, наконец, в первой четверти XX века Н. Е. Жуковским, Джоном Уильямом Стреттом (лордом Рэлеем) и Эдгаром Бакингом была сформулирована теорема, позволяющая установить условия подобия явлений любой физической природы [17].

Параллельно развитию теории подобия шло развитие логического моделирования в знаковой форме, и, прежде всего, развитие математики. В конце XVI века Джон Непер изобрел логарифмы. В конце XVII века Исаак Ньютон и Готфрид Вильгельм Лейбниц создали дифференциальное исчисление. В связи с возникновением и бурным развитием электронной вычислительной техники в XX веке стало возможным развитие и широкое применение численных методов решения различных задач, открытие Бенуа Мандельбротом новых математических объектов – фракталов и т. д.

Возникновение и развитие вычислительных устройств во многом предопределило сегодняшнюю популярность метода моделирования. К первым вычислительным устройствам относят счеты, появившиеся в XV – XVI веках, и логарифмическую линейку, созданную в начале XVII века. Длительное время вычислительные устройства были исключительно механическими (арифмометр, различные счетно-решающие механизмы и т. п.), и лишь череда революционных научных идей и открытий конца XIX – начала XX века привела к появлению в 40-х годах XX века электронных аналоговых и цифровых вычислительных устройств. Предложенная фон Нейманом архитектура вычислительной машины и модель нейрона принесли свои плоды. Сперва появились и получили широкое распространение вычислительные комплексы и персональные компьютеры, а затем были разработаны и нейросистемы, способные к самообучению и порою довольно точному феноменологическому прогнозированию. Возникшие в конце XX века нанотехнология и биоинженерия пророчат появление в скором времени квантовых и биокомпьютеров, что в очередной раз позволит вывести метод моделирования на качественно более высокий уровень.

Важно отметить, что первые обобщения двух направлений материального моделирования (физического и формального с помощью вычислительных устройств) были даны В. А. Вениковым и Л. И. Гутенмахером в конце 40-х годов XX века, и получили дальнейшее развитие в работах И. М. Тетельбаума, А. М. Сучилина, П. М. Алабужева и др. [17].

Что касается наиболее ярких примеров успешного использования метода моделирования, то тут выделяется кибернетика, обнаружившая новые возможности и перспективы в раскрытии общих закономерностей и структурных особенностей систем различной физической природы, принадлежащих к разным уровням организации материи и формам движения. Однако теория относительности и, в особенности, квантовая механика, указали на относительный характер механических моделей, на трудности, связанные с моделированием. И все же, несмотря на некоторые проблемы, можно смело сказать, что моделирование – один из самых эффективных и перспективных методов научного познания мира.

3.1 Определение понятия «модель»

Модель (от лат. *modulus*) – мера, образец, способ, схема [18]. Первоначальное значение этого понятия было связано со строительным искусством, и почти во всех европейских языках употреблялось для обозначения образа или прообраза, или вещи, сходной в каком-то отношении с другой вещью.

После создания Рене Декартом и Пьером де Ферма аналитической геометрии моделью стало понятие, подразумевающее теорию, обладающую структурным подобием по отношению к другой теории.

С другой стороны, в таких науках как физика, химия, астрономия термин «модель» стал применяться для обозначения того, к чему данная теория относится, или может относиться, что она описывает [19].

Модель в широком смысле – это мысленно или практически созданная структура, воспроизводящая часть действительности в идеализированной, упрощенной и наглядной форме. При этом характер и степень упрощения, вносимые моделью, могут изменяться. В более узком

смысле термин «модель» применяют в том случае, когда хотят изобразить некоторое явление или процесс с помощью другого, более хорошо изученного и/или легче понимаемого. Классический пример такой модели – планетарная модель атома.

Итак, в описанных выше случаях под моделью понимается либо образ изучаемого объекта, в котором отражены реальные или предполагаемые свойства, структура и т. п., либо совершенно иной объект, реально существующий наряду с изучаемым и схожий с ним в отношении определенных свойств или структурных особенностей. В этом смысле модель есть не сама теория, а лишь ее предмет.

В работах, посвященных гносеологической роли и методологическому значению моделирования, термин «модель» употребляется как синоним познания, теории, гипотезы и т. п. Например, часто моделью именуют недостаточно разработанную теорию, в которой мало дедуктивных шагов, много неясностей, упрощений, вводимых с целью обеспечения поиска путей, ведущих к построению теории более точной и совершенной.

Иногда термин «модель» употребляют в качестве синонима любой количественной теории или математического описания. Но такое словоупотребление не вызывает никаких новых гносеологических проблем, которые были бы специфичны для моделей, и, следовательно, несостоятельно [18]. То есть модель и теорию можно отождествлять далеко не во всех случаях. Еще в начале 60-х годов И. Т. Фролов отметил, что существенным признаком, отличающим модель от теории, является не уровень упрощений, а способ их выражения, характерный для модели [19].

Сегодня существует множество определений модели. Наиболее полное и при этом предельно прозрачное определение модели предложено В. А. Штоффом: «Под моделью понимается такая мысленно представляемая или материально реализуемая система, которая отображая или воспроизводя объект исследования, способна замещать его так, что ее изучение дает нам новую информацию об этом объекте» [18].

Способность тем или иным способом отображать действительность

– общее свойство всех моделей. В зависимости от того, по отношению к каким объектам познания, при каких условиях и какими средствами это их общее свойство реализуется, возникает большое разнообразие моделей, и, соответственно, проблема их классификации.

3.2 Классификация моделей

На сегодняшний день не существует общепринятой классификации моделей. Различные авторы выделяют разнообразные классификационные признаки, по которым и соотносят разные типы моделей.

На рис. 6 представлена схема классификации по В. А. Веникову [17].

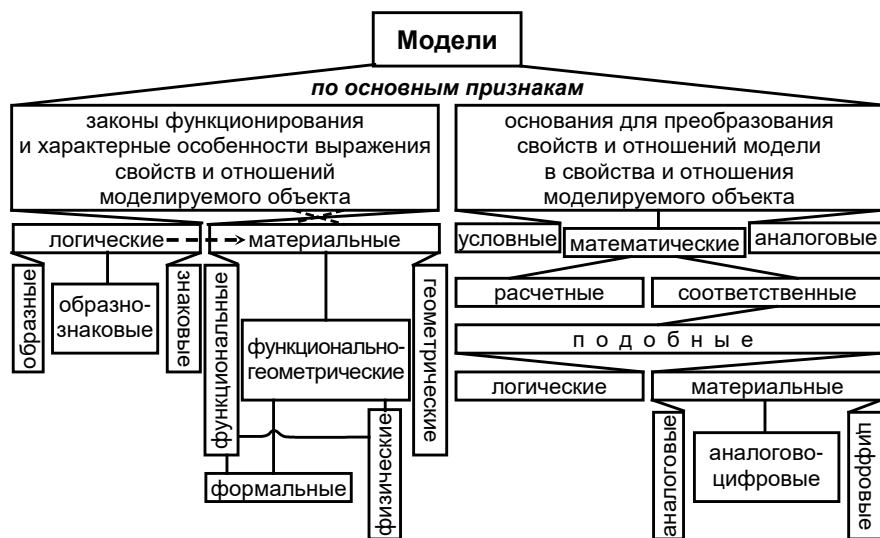


Рис. 6. Классификация моделей по В. А. Веникову [17]

В приведенной выше классификации под логическими понимаются модели, построенные по законам логики в сознании человека, под материальными – по объективным законам природы. Физическими (в противовес формальным) Веников называет модели физически однородные моделируемому объекту. Условные – модели, созданные на основании какого-либо условия или соглашения. Аналоговые – это модели,

построенные на основании умозаключения по аналогии. Под подобными понимаются модели, переменные величины которых пропорциональны переменным величинам моделируемого объекта.

Еще один вариант классификации моделей предложен В. А. Штоффом [18]. Он выделяет в основные признаки способ построения (форму модели) и качественную специфику (ее содержание). По форме он разделяет материальные и идеальные (полный аналог логических моделей Веникова). Штофф отмечает, что материальные модели, несмотря на их искусственную природу, существуют объективно. Назначение материальных моделей – воспроизведение структуры, характера, протекания, сущности; отражение пространственных свойств, динамики изучаемых процессов; вывод зависимостей и связей между ними. Материальные модели связаны с объектами отношением аналогии и могут быть проклассифицированы соответствующим образом (это и гипотетические модели, обладающие определенным видом подобия моделируемому объекту, и определенным образом проинтерпретированные карты и схемы, и кибернетические механизмы, и т. д.). Также важно то, что материальные модели могут быть построены лишь отталкиваясь от прототипной воображаемой (идеальной) модели (пунктирная стрелка и перечеркнутая связь на рис. 6). При этом большинство из идеальных моделей даже и не претендуют на материальное воплощение.

В классификации, предложенной Б. А. Глинским, в дополнение к вышерассмотренным введено деление моделей по характеру воспроизведения тех или иных сторон моделируемого объекта (субстанциональные, функциональные, структурные и смешанные модели) [20, 21].

А. Н. Кочергин предлагает рассматривать такие классификационные признаки как природа моделируемых явлений, объем отображаемых свойств, степень точности и др. [22].

3.3 Аналогия и подобие

Аналогия (или, в случаях физических и аналоговых моделей, подобие) играет одну из важнейших ролей в процессе моделирования. Под

аналогией подразумевается сходство объектов по их качественным и количественным признакам. Подобие – такое взаимоднозначное соответствие между сопоставляемыми объектами или процессами, при котором функции или правила перехода от параметров, характеризующих в том или ином смысле один из объектов, к параметрам, в том же смысле характеризующим другой объект, известны, а математические описания (если они имеются или потенциально могут быть получены) допускают их преобразование к тождественному виду [17].

В некоторых работах (например, в [23]) указывается, что в основе метода моделирования лежит теория подобия, однако уже из самих определений видно, что понятие подобия поглощается понятием аналогии, и понятно, что на основаниях теории подобия держится лишь небольшой и далеко не базовый круг задач моделирования. Основываясь на литературных данных [17-23] и на приведенном выше анализе можно утверждать, что базисом метода моделирования является теория аналогии и именно на ней сделан акцент при дальнейшем раскрытии данного подраздела пособия.

Аналогию, в свою очередь, можно разделить на качественную и количественную. Например, к видам качественной аналогии можно отнести химическую, физическую, кибернетическую и др. Все они объединены понятием обобщенной аналогии – абстракцией, которая выражает особого рода соответствие между сопоставляемыми объектами. Основным видом количественной аналогии является понятие математической аналогии. Это аналогия формы уравнений и аналогия соотношений между переменными в уравнениях модели и переменными моделируемого объекта.

Частные случаи математической аналогии – геометрическая и временная. Геометрическая представляет собой подобие пространственных пропорций и геометрических образов моделируемого объекта. Временная – подобие функции времени, при котором константа подобия показывает, в каком отношении к ней находятся такие параметры, как период, задержка и т. д.

В литературе отмечается неразрывная связь модели с аналогией, однако следует учитывать разноплановость понятия аналогии. Неясности и неопределенности порождаются нечетким различием аналогии как понятия, выражающего фактическое отношение сходства между разными вещами, процессами, ситуациями, проблемами; как эвристического метода познания; как средства переноса апробированных методов и идей из одной отрасли знания в другую, как средства построения и развития научной теории; как особой логики умозаключения; как способа восприятия и осмысления информации и т. д. Поэтому во избежание недоразумений, связанных с возможным отождествлением аналогии и модели рассмотрим некоторые определения аналогий, данные в работах [24, 25]:

- аналогия как объективная основа моделирования есть понятие, выражающее определенное частичное или полное подобие между различными объектами в тех или иных свойствах, функциях, соотношениях элементов;
- отличие научной аналогии от ненаучной (метафор, аллегорий, обыденных представлений и т. д.) – условие правильного определения сущности и роли аналогии в операциях научного моделирования. Аналогия в этом смысле есть ассоциация суждений о разных предметах;
- аналогия как эвристический метод моделирования есть метод научного поиска и объяснения изучаемого объекта посредством сопоставления его с известным наглядным объектом;
- аналогия есть способ восприятия и теоретического осмысления информации (визуально ненаблюдаемых объектов). Тут аналогия выступает как средство выбора модели;
- научная аналогия есть умозаключение, в ходе которого на основании обнаружения сходства или общности ряда существенных признаков у двух объектов или частичного тождества соотношений их элементов и учета различий между ними в других отношениях делается вывод о

том, что одному из них присущи такие свойства, которые обнаружены при исследовании другого объекта (модели).

Вывод по аналогии включает интерпретацию информации, полученной исследованием модели. Такой вывод не сводится к экстраполяции информации с одного объекта на другой. Главное заключается в том, чтобы объяснить информацию, осмыслить ее, определить и выразить результат исследования модели в терминах объекта-оригинала. Интерпретацию и подтверждение результатов моделирования следует рассматривать как основной аргумент в пользу того, что аналогия (и подобие, как ее частный случай) – есть объективное и логическое основание метода моделирования.

Вообще говоря, аналогия это опосредующее звено между моделью и объектом, функция которого состоит в сопоставлении различных объектов, обнаружении и анализе объективного сходства определенных свойств, отношений, присущих этим объектам, а также в операциях рассуждения и выводах по аналогии.

Особенность способа получения выводов по аналогии в логической литературе получила название **традукции** (от лат. *tr ductio* – перемещение). Традуктивный способ рассуждений используется при сопоставлении различных предметов по количеству, качеству, пространственному положению, временной характеристике, поведению, функциональным параметрам структуры и т. д.

В заключении данного подраздела следует выделить нормативные условия, соблюдение которых повышает степень достоверности выводов по аналогии и обеспечивает правильность умозаключений:

- чем больше общих свойств или сходных признаков у сравниваемых предметов, тем вероятнее их одинаковость и в других отношениях;
- чем существеннее найденные общие свойства, тем выше степень правомерности вывода;
- чем глубже познана взаимная закономерная связь сходных признаков, тем ближе к достоверности вывод;

- существуют ограничения, запрещающие переносить на предмет результаты действия времени, если таковые не связаны с предметом по существу или по его происхождению;
- общие свойства должны быть возможно более характерными для сравниваемых предметов;
- переносимые свойства должны быть того же типа, что и общие;
- предметы должны сравниваться по любым случайно выбранным свойствам.

Теперь после определения основания можно перейти к определению и самого понятия «моделирование».

3.4 Что есть моделирование

Моделирование – метод исследования объектов познания на их моделях; построение и изучение моделей реально существующих предметов и явлений (органических и неорганических систем, инженерных устройств, разнообразных процессов – химических, физических, биологических, социальных и др.) и конструируемых объектов для определения либо улучшения их характеристик, рационализации способов их построения, управления и т. п. [26].

Моделирование может быть предметным (когда объект исследуется на модели его основных геометрических, физических, динамических, функциональных характеристик), физическим (когда тем или иным образом воспроизводятся моделируемые физические процессы), предметно-математическим (когда физический процесс исследуется путем опытного изучения каких-либо явлений иной физической природы, но описывается теми же математическими соотношениями, что и процесс моделируемый), а также знаковым (абстрактно-математическое и расчетное моделирование).

Физическое моделирование характеризуется прежде всего тем, что исследования проводятся на установках, обладающих физическим подобием, т. е. сохраняющих полностью или хотя бы в интересующем исследователя аспекте природу явлений. Если осуществлено полное или неполное физическое моделирование, то по характеристикам модели

пересчетом через масштабные коэффициенты можно получить все характеристики моделируемого объекта. Предметно-математическое моделирование, как видно из определения, обладает более широкими возможностями. Классическим примером такого типа моделирования могут служить математические описания колебаний и волн различной природы.

К знаковому моделированию можно отнести разработку алгоритмов и программ, предназначенных для реализации на электронно-вычислительных машинах. Эти программы в условных знаках отражают исследуемые процессы, которые предварительно описаны системой уравнений и переложены на определенный алгоритмический язык. Этот вид моделирования имеет ряд преимуществ. Например, при реализации знаковых моделей и обосновании их достоверности можно отказаться от большого числа дорогостоящих и опасных экспериментов (в том числе и модельных), заменив их экспериментами виртуальными, и оставив время для проведения модельного эксперимента с уточненной постановкой, а тем самым получить существенный выигрыш во времени и стоимости исследований. Однако такой метод моделирования не позволяет открыть явления и эффекты, описание которых отсутствует в модели. По этой причине оно может выступать только как поддерживающее и оптимизирующее, но не заменяющее физическое моделирование.

Более конкретно моделирование и основные функции, которые оно выполняет в ходе познавательной деятельности, освещены в последующих разделах данного пособия.

3.5 Моделирование и эксперимент

Определим, что есть эксперимент для процесса познания и рассмотрим специфику моделирования как средства экспериментального исследования.

Превращение эксперимента в одну из основных форм практической деятельности, происходившее параллельно с развитием науки, стало фактом с тех пор, как в производстве сделалось возможным широкое

применение естествознания, что в свою очередь было результатом первой промышленной революции, открывшей эпоху машинного производства.

Под экспериментом понимается вид деятельности, предпринимаемой в целях научного познания, открытия объективных закономерностей и состоящий в воздействии на изучаемый объект (процесс) посредством специальных инструментов и приборов [18].

Вообще говоря, при решении любой научной или научно-технической задачи роли эксперимента и моделирования равноценны. Моделирование того или иного типа дает возможность правильно поставить эксперимент, а проведенный эксперимент уточняет предложенную модель.

Таким образом, моделирование, по сути, есть *методология эксперимента*. Оно указывает, как ставить эксперимент и как обрабатывать его данные, чтобы получить результат, достоверный не только в частном случае, но и распространяющийся на группу подобных явлений.

Моделирование эксперимента имеет два важных аспекта:

- планирование эксперимента – методика проведения наблюдений за явлениями (пассивный эксперимент) и одновременно такая стимуляция изучаемых явлений (активный эксперимент), которая позволила бы наиболее быстро, с возможно меньшим числом опытов найти наиболее характерные зависимости или точки (т. н. активный экстремальный эксперимент). Кроме того, при планировании центральное место занимают вопросы организации опытов при учете не одного, а многих влияющих факторов. Такой многофакторный эксперимент должен проводиться согласно четкой схеме, предусматривающей экстремальный (быстрое выявление наиболее существенных характеристик и их точек путем нахождения линейного приближения системы любой сложности и неоднородности) и вероятностный (искусственное создание вероятностных ситуаций) подходы к исследованиям;
- обработка данных – методика расчета и построения достоверных характеристик на основе опытных данных, что неизбежно влечет

появление погрешностей (например, разброс экспериментальных данных).

Существует особая форма эксперимента – модельный эксперимент, для которого характерно использование действующих материальных моделей в качестве специальных средств экспериментального исследования. В отличие от обычного эксперимента, где средства эксперимента так или иначе взаимодействуют с объектом исследования, здесь взаимодействия нет, так как экспериментируют не с самим объектом, а с его заместителем (имитатором). При этом объект-заместитель и экспериментальная установка объединяются, сливаются в действующей модели в одно целое.

Таким образом, обнаруживается двоякая роль, которую модель выполняет в эксперименте: она одновременно является и объектом изучения и экспериментальным средством.

Для модельного эксперимента, по мнению ряда авторов [18, 19], характерны следующие основные операции:

- переход от натурального объекта к модели – построение модели, т. е. моделирование в прямом смысле этого слова;
- экспериментальное исследование модели;
- переход от модели к натуральному объекту, состоящий в перенесении результатов, полученных при исследовании, на этот объект.

Модель входит в эксперимент, не только замещая объект исследования. Она также может замещать и условия, в которых изучается некоторый объект обычного эксперимента.

Обычный эксперимент предполагает наличие теоретического момента лишь в начальный момент исследования — выдвижение гипотезы, ее оценку и т. д., теоретические соображения, связанные с конструированием установки, а также обсуждение и интерпретацию результатов, их обобщение. В модельном же эксперименте необходимо также обосновать отношение подобия между моделью и натуральным объектом и возможность экстраполировать на этот объект полученные

данные. У В. А. Штоффа по этому поводу сказано, что теоретической основой модельного эксперимента, главным образом в области физического моделирования, является теория подобия. Она ограничивается установлением связи между качественно однородными явлениями, между системами, относящимися к одной и той же форме движения материи, и дает правила моделирования для случаев, когда модель и объект исследования обладают одинаковой (или близкой) физической и/или химической природой [18].

Сегодня практика моделирования вышла за пределы сравнительно ограниченного круга механических явлений и вообще отношения системы в пределах одной формы движения материи. Возникающие математические модели, которые отличаются по своей физической природе от моделируемого объекта, позволили преодолеть ограниченные возможности физического моделирования. При математическом моделировании основой соотношения «модель : моделируемый объект» является такое обобщение теории подобия, которое учитывает качественную разнородность модели и объекта, принадлежность их разным формам движения материи.

3.6 Моделирование – предопределенность и случайность

Большинство моделей и описываемых с их помощью явлений можно назвать детерминированными моделями и процессами, т. е. такими, суть которых определяется жесткими рамками законов природы, а случайная компонента пренебрежимо мала. Однако такое положение дел имеет место далеко не всегда. Известны явления, сущность которых в своей основе содержит существенную случайную компоненту. Такие явления и модели называются стохастическими. Философия признает наряду с детерминированностью еще и случайность, которая рассматривается не как царство произвола, а как философская категория, обозначающая случайность как специфическую форму проявления необходимости в природе, случай, когда параллельно основному изучаемому процессу протекают независимые и неуправляемые сопутствующие процессы, пути

развития которых, пересекаясь, суммируются, давая всплески и выбросы случайных компонентов.

В основу стохастической теории случайных процессов могут быть положены два различных подхода. Первый из них базируется на использовании теории многомерных функций распределения случайных величин и второй – на основе корреляционной теории случайных процессов.

3.7 Достоверность моделирования

Интересен вопрос о том, какую роль играет моделирование (построение моделей, их изучение и проверка) в процессе доказательства истинности и поисков истинного знания.

Что является критерием истинности модели? Если истинность принимать как соотношение наших знаний и объективной реальности [8], то истинность модели означает соответствие модели объекту, а ложность модели – отсутствие такого соответствия. Вместе с тем, такое определение является необходимым, но явно недостаточным. Требуется принять во внимание условия, на основе которых модель того или иного типа воспроизводит изучаемое явление. Например, условия сходства модели и объекта в математическом моделировании, основанном на физических аналогиях, предполагающих при различии физических процессов в модели и объекте тождество математической формы, в которой выражаются их общие закономерности, являются более абстрактными.

Таким образом, при построении тех или иных моделей всегда сознательно отвлекаются от некоторых сторон, свойств и даже отношений, в силу чего, заведомо допускается несохранение сходства между моделью и оригиналом по ряду параметров, которые вообще не входят в формулирование условий сходства.

В качестве примера можно привести планетарную модель атома Резерфорда, которая оказалась истинной в рамках исследования электронной структуры атома. Модель Томпсона оказалась ложной, так как

ее структура не совпадала с экспериментально исследованной электронной структурой.

Строго говоря, истинность – это свойство знания, а объекты материального мира не истинны и не ложны. Они просто существуют. В этой связи, можно ли говорить об истинности материальных моделей, если они существуют объективно? На каком основании можно считать материальную модель гносеологическим образом? В модели реализованы знания двоякого рода:

- знание самой модели как системы (ее структуры, процессов, функций), созданной с целью воспроизведения моделируемого объекта;
- теоретические знания, посредством которых модель была построена.

Имея в виду именно теоретические соображения и методы, лежащие в основе построения модели, можно говорить о том, насколько верно и насколько полно данная модель отражает объект моделирования. В таком случае возникает мысль о сравнимости любого созданного человеком предмета с аналогичными природными объектами и об истинности этого предмета. Но это имеет смысл лишь в том случае, если подобные предметы создаются со специальной целью изобразить, скопировать, воспроизвести определенные черты естественного предмета.

Таким образом, можно говорить о том, проблема истинности присуща материальным моделям:

- по причине связи их с определенными знаниями;
- в силу степени изоморфизма ее структуры со структурой моделируемого процесса или явления;
- в силу отношения модели к моделируемому объекту, которое делает ее частью познавательного процесса и позволяет решать определенные познавательные задачи.

Также важно оценить роль моделирования в установлении истинности той или иной формы теоретического знания (аксиоматической теории, гипотезы и т. д.). Здесь модель можно рассматривать не только как орудие проверки того, действительно ли существуют такие связи,

отношения, структуры, закономерности, которые формулируются в данной теории и выполняются в модели. Успешная работа модели есть еще и весомая часть экспериментального доказательства истинности теории.

3.8 Процесс моделирования

Изучение всякого непознанного явления начинается с наблюдения его проявления в природе или в лаборатории. Проведенные наблюдения позволяют выдвинуть ряд исходных предположений (гипотез), позволяющих объяснить на модели изучаемое явление и его свойства. Справедливость высказанных гипотез проверяется экспериментом. Подтвержденные экспериментом гипотезы путем логических рассуждений (в большинстве случаев оформленных в виде математического описания) превращаются в теорию исследуемого явления. При этом высвечиваются две стороны явления – качественная и количественная [27].

Таким образом, модель изучаемого явления с помощью вводимых гипотез приобретает ряд свойств, опираясь на которые можно путем математических и логических действий проследить, как принятая модель взаимодействует с окружающими объектами и, следовательно, как она реагирует на внешнее воздействие. При этом возможен вариант, при котором возможно качественное изменение первоначальных свойств модели [28].

После построения модели исследуемого явления делаются и анализируются важнейшие результаты моделирования, справедливость которых проверяется по специально разработанной методике с помощью специальных экспериментов (этот процесс называется верификацией и оценкой адекватности модели). При этом, как указывалось выше, лишь та модель может считаться полноценно научной, которая дает возможность предсказывать новые свойства. Если логические предсказания, вытекающие из построенной модели, имеют место в действительности и во всех случаях, то разработанная модель признается верной. Других способов проверки истинности модели не существует. Одновременно с проверкой истинности выявляются и границы применимости созданной

модели. В случаях, когда результаты моделирования не подтверждаются экспериментальной проверкой, то устанавливаются границы применимости теории, лежащей в основе модели, за пределами которых модель должна быть уточнена путем добавления новых или замены введенных ранее гипотез.

После верификации модели она может использоваться как почти полноправный аналог реального процесса или явления (естественно с учетом заложенных при ее разработке ограничений). Преимущества применения моделирования наиболее широко раскрываются в тех случаях, когда экспериментальные исследования трудоемки, дорогостоящи или проведение их нежелательно или практически невозможно (например, аварии на АЭС, социальные явления и т. п.).

Кроме того, моделирование помогает классифицировать и систематизировать фактический материал, обнаружить существующие связи в мозаике фактов. Это вытекает из того, что модель является ярким и выразительным языком, концентрирующим внимание исследователя на интересующей его стороне явления.

После рассмотрения основных теоретических аспектов, можно перейти к рассмотрению вопросов практического применения метода моделирования.

3.9 Применения метода моделирования

3.9.1 Общий обзор применений

Область применения метода моделирования в науке непрерывно расширяется. Сегодня моделирование используется в химии и физике, биологии и медицине, истории и экономике и практически во всех областях науки и искусства. Практически все процессы и явления, наблюдаемые во всех областях научной деятельности, подвергаются если не материальному, то хотя бы логическому моделированию.

В результате правильно описанные модели обычно имеют свободные параметры или неопределенные функции, а это подразумевает

управление человеком и влечет за собой проблему моделирования системы «человек – машина» с отражением в ней модели человеческих функций. Таким образом, сложность и комплексность объектов, которые могут изучаться методами моделирования в науке и технике, практически не ограничены.

В современном научном знании весьма широко распространена тенденция построения кибернетических моделей объектов самых различных классов. Кибернетический этап в исследовании сложных систем ознаменован существенным преобразованием языка науки. Он характеризуется возможностью выражения основных особенностей таких систем в терминах теории информации и управления. Это сделало доступным их математический анализ [24].

Кибернетическое моделирование используется и как общее эвристическое средство, и как искусственный организм, и как система-заменитель, и в качестве демонстрации. Использование кибернетической теории связи и управления для построения моделей в соответствующих областях основывается на максимальной общности ее законов и принципов для объектов живой природы, социальных и технических систем. Широкое использование кибернетического моделирования позволяет рассматривать этот логико-методологический феномен как неотъемлемый элемент интеллектуального климата современной науки [24]. В этой связи говорят об особом кибернетическом стиле мышления, о кибернетизации научного знания. С кибернетическим моделированием связываются возможные направления роста процессов теоретизации различных наук, повышение уровня теоретических исследований.

Характеризуя процесс кибернетического моделирования, обращают внимание на следующие обстоятельства. Модель, будучи аналогом исследуемого явления, никогда не может достигнуть степени сложности последнего. При построении модели прибегают к известным упрощениям, цель которых – стремление отобразить не весь объект, а с максимальной полнотой охарактеризовать интересующую исследователя сторону этого

объекта. Задача заключается в том, чтобы путем введения ряда упрощающих допущений выделить важные для исследования свойства.

Исследователям сложных систем можно рекомендовать заниматься упрощенными формами [24], так как всеобъемлющие исследования чаще всего бывают совершенно невозможны, а их имеющиеся реализации, как правило, носят демонстрационный характер, малоинформативны и не обладают прогностическими свойствами.

Анализируя процесс приложения кибернетического моделирования в различных областях знания, можно заметить расширение сферы применения кибернетических моделей: использование в науках о мозге, в социологии, в искусстве, в ряде технических наук. В частности, в современной измерительной технике нашли применение информационные модели. Возникшая на их основе информационная теория измерения и измерительных устройств – это новый подраздел современной прикладной метрологии.

Большое развитие получает новая наука – бионика, в которой значительную роль играет кибернетическое моделирование живых организмов, осуществляемое средствами современной электроники.

В последнее время особое значение приобрело моделирование биологических и физиологических процессов. Так создаются протезы тех или иных органов человека, управляемые биотоками. Разрабатываются установки, моделирующие условия, необходимые для развития живых тканей и организмов.

Математическое моделирование является неотъемлемой частью любого современного исследования в области экономики. Бурное развитие математического анализа, исследования операций, теории вероятностей, математической статистики, а также кибернетики способствовало формированию различного рода моделей экономики (Джон фон Нейман, Л. Н. Канторович, В. С. Немчинов, Н. А. Новожилов, Клод Шеннон, Джей Форрестер, Пол Ромер и др.).

Огромный объем информации, характеризующий объекты социального познания, трудности учета большого числа факторов, логических взаимосвязей и количественных соотношений между ними делают непосильным для человека-исследователя оперирование мысленными моделями социальных процессов. Отсюда возникает необходимость привлечения для моделирования социальных процессов информационных возможностей современной компьютерной техники.

В результате эволюции возникло важное направление в научном познании, основанное, с одной стороны, на использовании принципиально новых математических моделей (имитационное моделирование Форрестера), а с другой – на применении вычислительной техники для экспериментирования с этими моделями.

Кроме чисто научных следует выделить такие наукоемкие технические модели как тренажеры по управлению сложными системами и испытательные стенды.

3.9.2 Применение метода моделирования при решении химических задач

Химия – наука преимущественно экспериментальная. Все результаты исследований строения и реакций веществ (какова бы ни была природа исследований) обязаны быть проверены на опыте и должны быть выданы рекомендации по их практическому использованию. Моделирование свойств и реакционной способности химических соединений – составная часть общей стратегии исследований, роль которой становится все более важной. Основные причины этого – успехи развития теоретических представлений о строении веществ и, конечно же, бурный рост компьютерных технологий.

Можно выделить несколько направлений компьютерного моделирования свойств и динамики молекул, результаты которого достигают уровня точности, сопоставимого с точностью современного эксперимента. Прежде всего, это расчеты строения и спектров отдельных молекул и межмолекулярных комплексов методами квантовой химии и

теоретической молекулярной спектроскопии. В настоящее время можно делать достаточно надежные предсказания для молекулярных систем с числом атомов до 100 и даже больше.

Среди важнейших достижений квантово-химических расчетов свойств молекулярных систем выделяется возможность построения поверхностей потенциальной энергии [29]. Для задач структурной химии, как правило, достаточно ограничиться анализом основного электронного состояния, для моделирования химической кинетики часто необходима также информация о потенциальных поверхностях возбужденных электронных состояний. Получаемые из подобных расчетов потенциалы взаимодействия химических частиц нужны для таких важных приемов моделирования в химии, как методы молекулярной механики, молекулярной динамики и Монте-Карло [30]. Число атомов в системе, свойства которой моделируют подобным образом с помощью суперкомпьютеров, достигает гигантских величин – речь уже идет о миллионах частиц.

Развитие численных методов решения уравнений теории многих частиц позволяет моделировать и предсказывать свойства твердых тел, жидкостей, растворов, рассчитывать характеристики процессов на поверхностях, оценивать параметры молекулярных систем, внедренных в полости каркасных соединений, инертные или реакционные матрицы, осуществлять моделирование в материаловедении.

Центральной для науки о материалах является задача предсказания устойчивости кристаллических структур. На протяжении долгого времени она считалась нерешаемой. Однако постепенно накапливался опыт расчета кристаллических структур и появлялись новые методы и подходы, которые изменили эту точку зрения. Одним из заметных событий в области предсказания кристаллических структур стало появление метода USPEX, разработанного Артемом Огановым и его коллегами Андрием Ляховым, Колином Глассом, Цяном Чжу и др. [31]. Аббревиатура USPEX расшифровывается как Universal Structure Predictor: Evolutionary Xtallography

– универсальный предсказатель структур: эволюционная кристаллография. Метод USPEX позволяет предсказывать кристаллическую структуру при произвольных р-Т-условиях, исходя из знания только химического состава материала. На сегодняшний день USPEX используют несколько тысяч исследователей по всему миру. Популярность этого метода объясняется его высокой эффективностью, надежностью и предсказательной силой, а также возможностью свободного использования.

Переход от строения к реакционной динамике молекул, то есть к моделированию элементарных химических реакций, дается с большим трудом даже для малого числа атомов в системе. Численное решение квантово-механических уравнений, описывающих столкновения молекул, сопровождающиеся перераспределением составляющих их частиц, то есть химические реакции, пока еще возможно лишь для простейших процессов, например для взаимодействия атомов с двухатомными молекулами. Существенно большего успеха добиваются на пути применения полуклассического приближения, согласно которому ядра следуют вдоль классических траекторий, определяемых заданной поверхностью (или поверхностями) потенциальной энергии всей системы.

Обзор основных принципиальных положений, использующихся при создании моделей химических расчетов из первых принципов и прилегающих к ним (это и квантовая химия, и молекулярная механика, и молекулярная динамика, и квантово-химическая кинетика и т. д.), дан в [32]. Приведение подробного описания этих моделей выходит за рамки материала данного пособия, однако хотелось бы подчеркнуть некоторые особенности и разнообразие базисов химических моделей. Например, в квантовой химии модель молекулы – это совокупность ядер и электронов, подчиняющаяся законам квантовой механики. В молекулярной механике та же молекула рассматривается как совокупность атомов, взаимодействие которых задается, как правило, посредством эмпирических потенциалов и т. д. Вообще, успех или неудача компьютерного эксперимента определяются не только и не столько техническими возможностями

компьютера и эффективностью алгоритма, сколько разумностью модели, лежащей в основе расчетной схемы.

Стоит отметить, что если для фундаментальных задач временные и интеллектуальные затраты на построение поверхностей потенциальной энергии вполне окупаются получением ценнейших сведений о моделируемой молекулярной системе, то для большинства прикладных задач моделирование из первых принципов лишено смысла. В этих случаях применяются модели химических равновесий, формальная химическая кинетика, макрокинетика и т. д. Проблемы обработки результатов измерений в сложных случаях, вопросы оптимального планирования эксперимента и другие важные аспекты моделирования также находят свою теоретическую и машинную реализацию [33].

Конкретная задача

Ряд концепций локализации расплава активной зоны при запроектных авариях атомных электростанций предусматривает использование так называемых жертвенных материалов [35, 36]. Цель их применения состоит в изменении свойств и характеристик взаимодействующего с ними расплава таким образом, чтобы создать условия для надежной работы устройства локализации расплава активной зоны.

Основной отличительной особенностью жертвенных материалов является необходимость удовлетворять очень широкому спектру требований по химическим, термодинамическим, теплофизическим, прочностным, термомеханическим, ядерным и др. свойствам. Указанный комплекс требований формирует критерии выбора химического состава, микро- и макроструктуры и инициирует разработку принципиально новых подходов к проектированию, созданию и оценке функциональных возможностей таких материалов.

В связи с практической невозможностью проведения колоссального количества разноплановых экспериментов, необходимых для анализа жертвенных композиций, одним из важных требований, предъявляемых к рассматриваемым альтернативам, является возможность моделирования

поведения материала в широком диапазоне варьирования термических, химических и механических воздействий.

Разработка жертвенных материалов имеет крайне ограниченный опыт (они представляют собой принципиально новый класс материалов) и не может базироваться на прецедентном подходе к решению задач. В такой ситуации поиск оптимального решения наиболее эффективен при использовании методов системного проектирования материалов [36].

Проведенное исследование позволило сформулировать основные критерии выбора состава, микро- и макроструктуры жертвенных материалов, проанализировать альтернативы и выбрать (путем проведения соответствующих термодинамических расчетов по альтернативным системам) относительно оптимальные варианты. Были разработаны технологические приемы синтеза жертвенных материалов. Проведены синтез и исследование свойств жертвенных материалов. Обнаружен эффект резкого увеличения термостойкости материалов состава, отвечающего пределу изоморфной смесимости компонентов.

Выполнены экспериментальные исследования взаимодействия расплавов активной зоны с несколькими вариантами жертвенного материала, предложен механизм взаимодействия и описана кинетическая модель взаимодействия расплава активной зоны с жертвенным материалом [34, 35, 37, 38].

Предложено две концепции моделирования: моделирование с помощью иерархического конечного автомата – для рассмотрения в режиме реального времени процессов, происходящих в подреакторном помещении при поступлении в него расплава активной зоны ядерного реактора (рис. 7). В данной физико-химической модели изменением состояния ячеек управляют нелинейные уравнения теплопроводности и диффузии и закон Аррениуса; экспериментальные исследования показали наличие четкой, определенным образом себя ведущей, границы взаимодействия (R) жертвенного материала (S) с расплавом (L) (рис. 8,а) и была предложена соответствующая модель, в основе которой лежит уравнение теплопроводности (рис. 8,б).

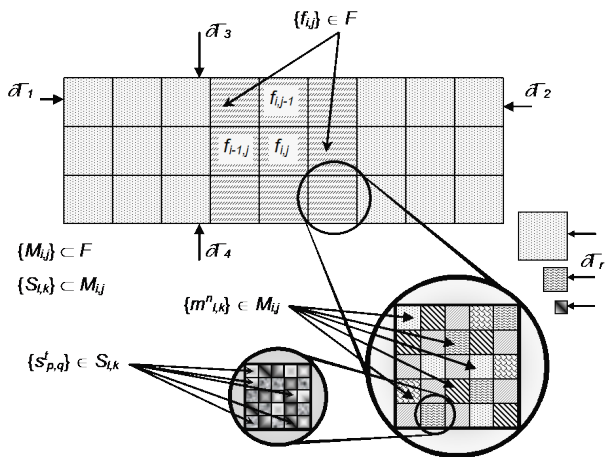
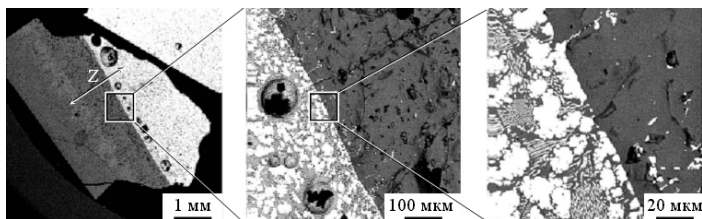


Рис. 7. Иерархическая модель конечных автоматов, моделирующих взаимодействие расплава с материалом

а)



б)

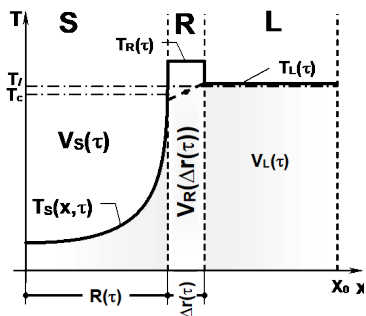


Рис. 8. Модель, учитывающая процессы, происходящие на границе взаимодействия:

а) – СЭМ-изображение границы; б) – ее модельное представление

В первой модели акцент сделан на наблюдение за поведением системы (визуализацию процесса) и на возможность обнаружения таким образом принципиально разных режимов взаимодействия в зависимости от конфигурации системы «кориум – бетон» в подреакторном пространстве, расположения в нем жертвенных материалов, их состава и состава расплава активной зоны. При этом следует отметить, что круг задач, потенциально решаемых с помощью разработанной модели, гораздо шире описанного. Вторая модель предназначена как для обоснования функциональности предложенного материала, так и для подбора новых вариантов (в случае, если корректность модели будет обоснована).

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ-ТЕСТЫ

1. К какому приему прибегают исследователи, если изучаемый объект не доступен для прямого вмешательства?
2. Как называется метод научного познания, где степень вероятности умозаключения зависит от количества сходных признаков у сравниваемых моделей?
3. Дайте определение модели и опишите ее общие свойства.
4. Является ли моделирование всеобщим методом познания?
 - 1) Да.
 - 2) Нет.
5. Возможен ли математический эксперимент?
 - 1) Да.
 - 2) Нет.
6. Опишите особенности модельного эксперимента.
7. Как соотносятся модель и объект?
8. В чем различие между качественным и количественным моделированием?
9. Перечислите объекты из области химии и материаловедения, для которых успешно проводится моделирование.
10. Что называется кибернетической моделью?

11. Что такое физическое моделирование и каковы его особенности?

12. Какие особенности имеет математическое моделирование?

4 ЭТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ НАУЧНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ

4.1 Основные принципы этики научного сообщества

Среди этических принципов научной деятельности можно выделить следующие, наиболее существенные:

- самоценность истины;
- ориентированность на новизну научного знания;
- свобода научного творчества;
- открытость научных результатов;
- организованный скептицизм.

Принцип **самоценности истины** или **универсализм** подразумевает ориентацию исследователя и научной деятельности на поиск объективного знания, а не на личные, групповые, корпоративные или национальные интересы. Истина и только истина – основная ценность деятельности в сфере науки. Только одна дихотомия имеет значение: «истинно – ложно», все остальное – за пределами науки. Какой бы новой или тривиальной, «ожидаемой» или «неудобной» не оказалась обнаруженная в процессе исследования истина, она должна быть обнародована. Академик Е. Б. Александров [39] сформулировал этот принцип следующим образом: «истина должна выявляться в ходе многих независимо воспроизводимых исследований, экспериментов или наблюдений и быть совместима с теми, что достоверно установлены ранее. А на вопрос о том, кто судьи, естественно ответить, что верховным судьей является мировое научное сообщество, опирающееся на непрерывно растущий свод фактов и объективных законов природы – на накопленное коллективное научное знание. И суд этот достаточно безапелляционный. В науке (по крайней мере, в области точных наук) не применим принцип свободы совести, позволяющий каждому верить по-своему: наука живет знанием, а не верой». Из данного принципа следует одно из обязательных условий

научной деятельности: условие точного соблюдения правил получения, отбора, обработки и публикации данных, действующих в конкретной научной дисциплине.

Новизна научного знания. Наука существует только развиваясь, а развивается она непрерывным приращением и обновлением знания. Определяя суть научной работы, Макс Вебер писал: «Совершенное произведение искусства никогда не будет превзойдено и никогда не устареет... Напротив, каждый из нас знает, что сделанное им в области науки устареет через 10, 20, 40 лет. Такова судьба, более того, таков смысл научной работы, которому она подчинена и которому служит, и это как раз составляет ее специфическое отличие от всех остальных элементов культуры; всякое совершенное исполнение замысла в науке означает новые «вопросы», оно по своему существу желает быть превзойденным... Но быть превзойденными в научном отношении – не только наша общая судьба, но и наша общая цель. Мы не можем работать, не питая надежды на то, что другие пойдут дальше нас».

Необходимость получения новых фактов и создания новых гипотез обуславливает обязательную информированность исследователя о ранее полученных в этой области науки знаниях.

Свобода научного творчества – идеальный, но не всегда реализуемый принцип научной деятельности. Для науки нет и не должно быть запретных тем, и определение предмета исследований есть выбор самого ученого. Любой результат, претендующий на научное достижение, должен быть внимательно проанализирован и оценен научным сообществом независимо от того, кто его представляет. В реальных ситуациях действенность этого принципа зачастую ограничена как внутренними факторами, действующими в научной среде, так и внешними – этическими, социальными и материальными.

Всеобщность или открытость научных достижений. На результаты фундаментальных научных исследований (но не изобретений) не существует права интеллектуальной собственности. Они принадлежат

всему человечеству. Ни автор, ни никто другой не может запретить использовать научные результаты или требовать какой-либо компенсации за их использование, кроме ссылки на авторство. Соответственно, любой ученый, получивший новые результаты, должен их опубликовать, поскольку новое знание только тогда становится составным элементом научной картины мира, когда оно проверено и признано научным сообществом.

Организованный скептицизм или **исходный критицизм**. Принцип, который подразумевает открытость для сомнений по поводу любых результатов научной деятельности, как своих собственных, так и публикуемых другими учеными. Это правило требует осмысления неявных предположений, принимаемых в качестве аксиом; бдительного отношения к попыткам принять желаемое за действительное, вызванным личной заинтересованностью или причинами этического характера; осторожного отношения к вероятности неверного истолкования результатов. Как отметил академик М. В. Садовский: «в научной печати никогда не было абсолютной свободы слова, в науке никогда не работал принцип «презумпции невиновности». Если ты провозглашаешь, что совершил открытие, никто не поверит тебе на слово, ты должен долго и упорно доказывать это. Научный результат публикуется в научном издании после того, как прошел все этапы апробации. И даже в этом случае он не всегда оказывается верным».

4.2 Соблюдение принципов научной этики

Принципы научной этики могут быть нарушены различными способами – от небрежного применения научных методов или невнимательного документирования данных до серьезных научных преступлений, таких как умышленная фальсификация или обман. Нарушение научной этики имеет место, когда в научно значимом контексте намеренно или в результате крайней небрежности делается ложное заявление, в случае нарушения авторства или нанесения иного ущерба научной работе других лиц. Пример развернутого описания поступков, квалифицируемых как нарушение научной этики, дают «Нормы научной этики» Сената Общества Макса Планка [40]. В соответствии с ними как

существенные нарушения научной этики могут рассматриваться следующие действия:

- *ложные заявления*, к которым относятся:
 - фабрикация данных;
 - фальсификация данных, например, тайный отбор данных и отказ от нежелательных результатов или манипуляция изображениями;
 - некорректные заявления в письме-заявке или заявке на получение финансовой поддержки (заявке на грант).
- *нарушение авторского права* в отношении работ другого автора, охраняемых авторским правом, значительных научных открытий, гипотез, теорий или методов исследования:
 - несанкционированное использование авторских текстов (плагиат);
 - присвоение методов исследования и идей;
 - необоснованное присвоение научного авторства или соавторства;
 - фальсификация содержания;
 - несанкционированная публикация или предоставление третьим лицам доступа к еще не опубликованным работам, находкам, гипотезам, теориям или научным методам;
 - притязание на соавторство с другим лицом без его согласия либо без должных оснований;
- *вред, наносимый чужой научной работе*:
 - саботаж исследовательской работы (в том числе нанесение ущерба, разрушение или подделка экспериментальных установок, оборудования, документации, аппаратуры, программного обеспечения, химикатов или других предметов, необходимых для проведения эксперимента);
- *совместная ответственность за нарушение научной этики* может являться результатом:
 - активного участия в нарушении научной этики, совершаемом другими лицами;
 - осведомленности о фальсификации, совершаемой другими;

- соавторства в фальсифицированных публикациях;
- пренебрежения обязанностями контроля.

4.2.1 Подготовка и издание научных публикаций

При подготовке публикаций возникают вопросы, граничащие с этическими проблемами:

- определение авторства публикации;
- выбор места публикации;
- полнота освещения существующих научных фактов и представлений по исследуемой проблеме;
- высказывание благодарности коллегам, принимавшим участие в работе и организациям, осуществившим финансирование работы или предоставившим для этой работы свои ресурсы;
- адекватность методов анализа и интерпретаций задачам исследования и фактическим материалам;
- стиль и форма представления текстовых и иллюстративных данных, их достаточность;
- правильность и полнота оформления вспомогательных материалов публикации.

Авторство публикации

Научная этика не допускает «почетного» авторства и принятия во внимание при формировании списка авторов каких-либо других доводов, кроме реального вклада в создание публикации. В соответствии с этическими нормами первое место в списке авторов обычно занимает истинный лидер публикации – автор идеи или сотрудник, выполнивший большую часть работы. Указание научного руководителя работы (лидера авторского коллектива) в начале или конце списка авторов также встречается довольно часто и, как правило, не воспринимается как нарушение этических норм.

Обычно первый автор пишет черновой вариант исходного текста публикации, который критикуют и изменяют другие авторы. Далее следуют

авторы в порядке убывания их вклада в создание публикации. Это наиболее желательный способ решения проблемы, так как в этом случае последовательность авторов объективно отражает их участие в представляемом результате.

Основными критериями при построении порядка авторов являются:

- вклад в формулировку идеи публикации и работы в целом;
- вклад в разработку плана исследований;
- степень участия в сборе, обработке и интерпретации данных;
- вклад в подготовку и оформление рукописи.

Следует также учитывать, были ли ранее опубликованы исходные данные, на которых строится статья или опубликованы основные идеи и способы решения поставленных задач, пусть и на другом фактическом материале.

Демократичный подход, согласно которому фамилии авторов размещаются в алфавитном порядке – не лучший выход из затруднительных ситуаций, так как он делает невозможным дифференциацию вклада каждого из соавторов в общий результат. Цитирование работы при числе авторов более двух часто осуществляется только с упоминанием первого автора, и именно он интуитивно воспринимается читателями как истинный лидер.

При сложности определения очередности авторов полезно указать вклад каждого автора и их сферу ответственности (первоначальная идея, исходные данные, математическая обработка, подготовка рукописи и т. д.). Такие указания могут присутствовать в виде подстрочных примечаний, в тексте введения, разделов, описывающих материалы и методы исследования, или непосредственно в тексте соответствующих разделов. Все соавторы обязательно должны дать согласие на публикацию. Например, статья, направляемая в редакцию журнала, на последней странице должна быть подписана всеми авторами.

Выбор места публикации

Проблема выбора места публикации приобретает большой вес, если Вы совершили крупное научное открытие. Хорошо, если научные

результаты публикуются в профильных источниках, известных и доступных другим специалистам по данной проблеме. Плохо, если описание нового вида будет помещено в материалах конференции тиражом 200 экземпляров, однако с развитием сети интернет и тенденции к открытому опубликованию материалов конференций эта проблема постепенно теряет свою остроту. Опубликование результатов, претендующих на существенный вклад в науку, в непрофильных изданиях потенциально может создать проблемы с доказательством приоритета.

Редакции авторитетных изданий сами проверяют, соответствует ли рукопись профилю и уровню издания. Авторы также могут осуществить поиск журнала для публикации, например, воспользовавшись сервисом **Elsevier® Journal Finder: Find the perfect journal for your article** (англ. *найдите идеальный журнал для своей статьи*). Для поиска журнала нужно ввести на сайте <https://journalfinder.elsevier.com/> следующую информацию о статье:

- paper title (название статьи);
- paper abstract (аннотация статьи);
- fields of research (области исследования), причем опционально предлагается выбрать три области исследования (optional: refine your search by selecting up to three research fields) из:
 - Agriculture (сельское хозяйство);
 - Economics (экономика);
 - Materials Science and Engineering (материаловедение и инженерия);
 - Geosciences (науки о земле);
 - Humanities and Arts (гуманитарные науки и искусство);
 - Life and Health Sciences (науки о жизни и здоровье);
 - Mathematics (математика);
 - Physics (физика);
 - Social Sciences (социальные науки);
 - Chemistry (химия),

и нажать кнопку: **найти журнал** (find Journal).

В результате поиска выдается список потенциальных журналов с указанием названия журнала, импакт-фактора журнала, скорости проведения экспертизы, процента принятых статей к числу подаваемых, скорости публикации и другая полезная для авторов информация.

Полнота освещения существующих фактов и представлений

Авторы публикации несут полную ответственность за научную достоверность представляемых результатов. В случае рецензируемых изданий часть ответственности за научную достоверность ложится на редакции и рецензентов, но ответственность авторов при этом не уменьшается. Любые данные, которые подтверждают или ставят под сомнение Ваши результаты, должны быть обнародованы. Это относится как к собственным данным авторов, так и к фактическим данным и заключениям других исследователей. Поэтому, если Вы хотите написать хорошую работу, Вы должны хорошо ориентироваться, что делалось ранее и что делается непосредственно сейчас в Вашей предметной области. Во избежание ошибок, связанных с неполнотой освещения существующих фактов и представлений, необходимо:

- перед написанием публикации проанализировать максимально широкий спектр информации по вопросу исследований;
- при изучении проблемы оценить корректность источников, выявить уровень достоверности и фактической обоснованности результатов, наличие методических и интерпретационных ошибок;
- при отборе, анализе и интерпретации собственных данных не отбрасывать неявные результаты, внимательно анализировать результаты «неудачных» экспериментов;
- при написании публикации, при формулировке проблемы и обсуждении результатов не отбрасывать и не замалчивать неудобные литературные данные, содержащие результаты и заключения, противоречащие Вашим результатам или демонстрирующие отсутствие «желательных» эффектов.

Благодарности

Титульные сведения об авторах публикации не всегда полностью исчерпывают список лиц, которые, так или иначе, обусловили появление данной работы. К числу лиц, обычно не включаемых в список авторов, но которым следует выразить благодарность, относятся те, кто давал консультации, предоставлял неопубликованные данные, выполнял технические работы при проведении исследований, обеспечивал проведение полевых работ, высказывал критические замечания при чтении рукописи и др.

Ссылки на финансовую поддержку исследований каким-либо фондом или организацией могут быть приведены без выражения благодарности – в виде простого упоминания.

4.2.2 Научная переписка

Научная переписка – частный случай деловой переписки, правила которой изложены, например, в [39]. Обязательные элементы официального письма или письма с обращением к незнакомому адресату следующие:

- шапка-заголовок (имя, фамилия и адрес отправителя в верхней части листа или фирменный бланк организации);
- дата составления письма;
- адрес (адресат, к которому обращаются);
- обращение;
- текст;
- подпись.

В сообщениях, осуществляемых по электронной почте, не все эти элементы могут быть реализованы, однако элементы «обращение», «текст» (несмотря на наличие любого приложения (!)) и «подпись» остаются обязательными.

Специфические для научной переписки формы сообщений и посланий, как правило, стандартизированы и их образцы имеются у ученого секретаря организации или у старших коллег. Пример оформления направления рукописи статьи в редакцию журнала от организации приведен

на рис. 9 (в этом случае контактные данные автора, ответственного за переписку с редакцией высылаются отдельно).




	ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук
Политехническая ул., 26, С.-Петербург, 194021 Телефон: (812) 297-2245 Факс: (812) 297-1017 post@mail.ioffe.ru http://www.ioffe.ru	ИНН 7802072267/КПП 780201001 ОКПО 02698463 ОГРН 1037804006998
<u>10.04.2019</u> № <u>11217-20</u>	В редакцию Журнала общей химии
№ _____ от _____	
<p>ФТИ имени А.Ф. Иоффе направляет в редакцию статью Е.А. Туговой «Механизмы твердофазного синтеза слоистых перовскитоподобных фаз $Ln_2SrFe_2O_7$ ($Ln=La, Nd, Gd, Dy$)» и экспертное заключение о возможности публикации данного материала в открытой печати.</p>	
Руководитель Центра физики наногетероструктур, чл.-корр. РАН	 П.С. Копьев
10.04.2019	

Рис. 9. Пример письма-направления рукописи статьи в редакцию журнала

Если по правилам журнала не требуется направления от организации, то сопроводительное письмо (covering letter) может быть оформлено, например, как на рис. 10).

04.04.2019

To Editorial Office of
Acta Metallurgica Sinica
(English Letters)

Dear Dr. Jun Ke!

I would like to ask you to consider the manuscript entitled “**New DySrAlO₄ compound synthesis and formation processes correlations for LnSrAlO₄ (Ln = Nd, Gd, Dy) series**” for publication in **Acta Metallurgica Sinica (English Letters)** as an original article.

This manuscript has not been published and it is not being submitted simultaneously elsewhere. The author reports no conflicts of interest.

Keywords such as: rare earths; oxide materials; K₂NiF₄ structure type; solid state reactions; phase formation are provided.

I certify that in preparing submitted manuscript author has consulted the Guide for Authors. References and manuscript length have been made in correct format; PDF of manuscript has been presented in correct order upon submission.

Sincerely yours,

Ekaterina Tugova

PhD., Senior Researcher

Ioffe Institute

Рис. 10. Пример сопроводительного письма рукописи статьи
в редакцию журнала

К сугубо специфическим особенностям научной переписки, характеризующим ее содержание, а не форму, относятся требования: 1) обязательности ответа на критику, 2) обязательности не задерживать

отзывы и другие документы, призванные оценить научную или профессиональную состоятельность других ученых, их проектов, публикаций и т. п.

4.2.3 Общение на научном мероприятии

Участие в научных мероприятиях – конференциях, школах, семинарах, симпозиумах – важная составляющая деятельности ученого. Эмоциональный рассказ о научных фактах и гипотезах, живое обсуждение и дискуссии по разным проблемам обеспечивают эффективное усвоение новой информации, расширяют кругозор, нередко провоцируют на критический пересмотр собственных представлений и стимулируют рождение новых идей.

Соблюдение определенных правил поведения на научном мероприятии:

- создает комфортные условия работы для всех участников;
- снижает вероятность возникновения и силу проявления негативных эмоций;
- повышает эффективность прямого общения с коллегами.

Правил общения, специфических для научных мероприятий, нет – они общие почти для любого собрания:

- соблюдайте регламент, предложенный организаторами мероприятия;
- уважайте мнение собеседника (оппонента, докладчика, спрашивающего);
- будьте доброжелательны;
- на сессиях устных докладов и круглых столах не перебивайте говорящего;
- старайтесь соответствовать своим внешним видом уровню и месту проведения мероприятия;
- если Вам выдали бейдж обязательно наденьте его, так как это упростит для оргкомитета и участников Вашу идентификацию;
- запаситесь визитными карточками (их формат гораздо менее важен, чем наличие).

Участвуя в работе сессий устных докладов:

- старайтесь не опаздывать к началу заседания;
- опоздав, не входите в зал заседаний во время доклада – дождитесь перерыва между докладами;
- отключите мобильный телефон; в случае острой необходимости в оперативной связи переключайтесь в режим вибровызова или минимальной громкости звонка;
- выслушав интересный доклад, не спешите покинуть зал заседаний, демонстрируя присутствующим свое пренебрежение к следующему докладу; если Вы знаете, что должны будете выйти до конца заседания, выбирайте место ближе к выходу из зала и в задних рядах;
- будучи докладчиком, перед началом заседания представьтесь Председателю;
- если известно, что Вы сами не будете управлять презентационным оборудованием во время доклада, подготовьте еще один экземпляр текста доклада с указанием места или времени переключения слайдов, иллюстраций и т. п.

Задавая вопрос докладчику на сессии устных докладов:

- поднимите руку и дождитесь, когда Председатель даст Вам слово;
- вопрос задавайте стоя, не очень прилично задавать вопрос сидя, если докладчик стоит;
- по возможности, задавайте вопрос кратко и ясно;
- после ответа, если он Вас не удовлетворил, дождитесь разрешения Председателя на уточняющий вопрос; если ответ Вас удовлетворил, поблагодарите докладчика;
- собственно во время заседания старайтесь не высказывать свое отношение к докладу или докладчику, для обсуждения докладов обычно выделяется специальное время.

Участие в работе сессий постерных докладов регламентировано менее жестко. Будучи докладчиком, не отходите далеко от постера и

используйте бэйдж. Заинтересовавшись докладом, представьтесь, прежде чем задавать вопросы.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ-ТЕСТЫ

1. Что из перечисленного является нарушением этики научной публикации?
 - а) алфавитный порядок расположения фамилий авторов;
 - б) цитирование автором публикации работ своего научного руководителя;
 - в) ситуация, когда публикация имеет, согласно выходным данным, восемь или более авторов;
 - г) ситуация, когда в число авторов публикации включен руководитель научного подразделения, обеспечивший материальную базу для исследований, но не участвовавший в самом исследовании.
2. Какое требование кроме достоверности, доказательности и полноты относится к основным требованиям к новой информации, созданной исследователем?
3. Что такое профессиональная ответственность ученого?
4. Перечислите критерии эффективности деятельности научного работника.
5. Каковы взаимоотношения между наукой и этикой?
 - 1) Этические нормы содержатся в самой научной деятельности.
 - 2) Этические нормы регулируют применение научных результатов.
 - 3) Верно и то и другое.
6. Всегда ли достаточен накопленный людьми нравственный опыт для решения этических проблем, возникающих в связи с прогрессом науки?
 - 1) Да, всегда достаточен.
 - 2) Нет, не всегда достаточен.
7. Любая ли научная деятельность имеет ценностные и этические основания?

- 1) Да, любая.
 - 2) Нет, не любая.
8. В чем заключается научная честность ученого?
9. Какие бывают отклонения от принятых в науке этических норм?
10. Может ли фундаментальное научное открытие быть сделано независимо разными учеными?
- 1) Да.
 - 2) Нет.
12. Всегда ли достаточен накопленный людьми нравственный опыт для решения этических проблем, возникающих в связи с прогрессом науки?
- 1) Да, всегда достаточен.
 - 2) Нет, не всегда достаточен.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Альмяшев В. И., Бугров А. Н., Кириллова С. А., Альмяшева О. В.* Физическая химия – основа новых материалов и технологий: учеб. пособие. – СПб.: Изд-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2018. – 67 с.
2. *Кохановский В. П., Золотухина Е. В., Лешкевич Т. Г., Фахти Т. Б.* Философия для аспирантов: учеб. пособие. 2-е изд. – РнД.: «Феникс», 2003. – 448 с.
3. *Кедров Б. М.* Ленин и научные революции. Естествознание. Физика. – М.: Наука, 1980. – 463 с.
4. *Кун Т.* Структура научных революций. – М.: Прогресс. – 1975. – 288 с.
5. *Гейзенберг В.* Физика и философия. Часть и целое. – М.: Наука, 1990. – 400 с.
6. *Горюнов В. П.* Начало и конец философии: учеб. пособие. – СПб.: Изд-во СПбГТУ, 2001. – 33 с.
7. *Рузавин Г. И.* Методология научного познания: учеб. Пособие для вузов. – М.: ЮНИТИ-ДАНА, 2012. – 287 с.
8. *Хьюэлл У.* Философия индуктивных наук, опирающаяся на их историю // Эпистемология и философия науки. – 2016. – Т. 49, № 3. – С. 198-215.

9. *Гумилев Л. Н.* Этногенез и биосфера Земли. – Изд-во: Айрис-Пресс, 2016. – 399 с.
10. *Конт О.* Дух позитивной философии. – РНД.: Феникс, 2003. – 256 с.
11. *Александров К. С., Безносиков Б. В.* Иерархия перовскитоподобных кристаллов // Физика твердого тела. – 1997. – Т. 39, №5. – С. 785-808.
12. *Patel R., Simon Ch., Weller M. T.* LnSrScO₄ (Ln: La, Ce, Pr, Nd and Sm) systems and structure correlations for A₂BO₄ (K₂NiF₄) structure types // J. Solid State Chem. – 2007. – V. 180. – P. 349-359.
13. *Ganguli D.* Cationic radius ratio and formation of K₂NiF₄-type compounds. // J. Solid State Chem. – 1979. – V. 30. – P. 353-356.
14. *Абакумов А. М., Антипов Е. В., Ковба Л. М., Копнин Е. М., Путилин С. Н., Шпанченко Р. В.* Сложные оксиды со структурами когерентного срастания. – Успехи химии. – 1995. – Т. 64 (8). – С. 769-780.
15. *Тугова Е. А.* Однослойные фазы Руддлессдена-Поппера в системах Ln₂O₃ – MO – Me₂O₃ (Ln = PЗЭ; M = Ca, Sr, Ba; Me = Al, Fe). // Журн. общ. хим. – 2016. – Т. 86, №11. – С. 1766-1773.
16. *Shannon R. D., Prewitt C. T.* Effective Ionic Radii in Oxides and Fluorides. // Acta Cryst. B. – 1969. – V. 25. – P. 925-946.
17. *Веников В. А., Веников Г. В.* Теория подобия и моделирования: (Применительно к задачам электроэнергетики). 3-е изд., перераб. и доп. – М.: Высшая школа, 1984. – 439 с.
18. *Штофф В. А.* Моделирование и философия. – М.-Л.: Наука, 1966. – 301 с.
19. *Фролов И. Т.* Гносеологические проблемы моделирования. – М.: Наука, 1961. – 210 с.
20. *Глинский Б. А., Грязнов Б. С., Дынин Б. С., Никитин Е. П.* Моделирование как метод научного исследования (гносеологический анализ). – М.: Изд-во МГУ, 1965. – 248 с.
21. *Глинский Б. А., Баксанский О. Е.* Моделирование и когнитивные репрезентации. Рос. акад. наук. Каф. философии. – М.: Альтекс, 2000. – 147 с.
22. *Кочергин А. Н.* Моделирование мышления. – М.: Политиздат, 1969. – 224 с.

23. Основы теории подобия и моделирования (терминология). – М.: Наука, 1973. – 25 с.
24. *Батороев К. Б.* Кибернетика и метод аналогий. – М.: Высшая школа, 1974. – 386 с.
25. *Батороев К. Б.* Аналогии и модели в познании. – Новосибирск: Наука, 1981. – 320 с.
26. Эксперимент. Модель. Теория: Сборник статей АН СССР, Институт философии, АН ГДР, Центральный институт философии; Редколлегия: *Г. Герц* и др. – М., Берлин: Наука. 1982. – 333 с.
27. *Аверьянов А. Н.* Системное познание мира: методологические проблемы. – М.: Политиздат, 1985. – 263 с.
28. *Сичивица О. М.* Методы и формы научного познания. – М.: Высшая школа, 1993. – 95 с.
29. *Степанов Н. Ф.* Потенциальные поверхности и химические реакции // Соросовский Образовательный Журнал. – 1996. – № 10. – С. 33-41.
30. *Ustinov E. A.* Kinetic Monte Carlo approach for molecular modelling of adsorption (mini-review) // Current Opinion in Chemical Engineering. – 2019. – V. 24. – P. 1-11.
31. Modern Methods of Crystal Structure Prediction / ed. by *A. R. Oganov*. – WILEY-VCH, 2011. – 274 p.
32. *Немухин А. В.* Компьютерное моделирование в химии // Соросовский Образовательный Журнал. – 1998. – № 6. – С. 48-52.
33. *Зефиоров Н. С.* Компьютерный синтез // Соросовский Образовательный Журнал. – 1997. – № 7. – С. 52-56.
34. *Гусаров В.В., Хабенский В.Б., Бешта С.В., Удалов Ю.П., Грановский В.С., Альмяшев В.И.* Жертвенный материал устройства локализации расплава активной зоны при запроектных авариях АЭС с ВВЭР-1000: концепция разработки, обоснование и реализация // Вопросы безопасности АЭС ВВЭР. Исследование процессов при запроектных авариях с разрушением активной зоны. Труды научно-практического семинара. – СПб., 12-14 сентября 2000. – Т. 1. – С. 105-140.

35. *Гусаров В. В., Альмяшев В. И., Хабенский В. Б., Бешта С. В., Грановский В. С.* Новый класс функциональных материалов для устройства локализации расплава активной зоны ядерного реактора // Рос. хим. журн. (Журн. Рос. хим. об-ва им. Д. И. Менделеева). – 2005. – Т. XLIX, № 4. – С. 42-53.
36. *Гусаров В. В., Яковлев В. А., Семин Е. Г., Еделев Д. А.* Системный анализ и системное проектирование деятельности. – РнД: СКНЦ ВШ, 2004. – 168 с.
37. *Удалов Ю.П., Морозов Ю.Г., Гусаров В.В., Альмяшев В.И., Бешта С.В., Крушинов В.А., Витоль С.А., Хабенский В.Б., Мартынов В.В., Лопух Д.Б.* Расчетное и экспериментальное исследование взаимодействия расплава кориума с жертвенным материалом // Вопросы безопасности АЭС ВВЭР. Исследование процессов при запроектных авариях с разрушением активной зоны. Труды научно-практического семинара. – СПб., 12-14 сентября 2000. – Т. 1. – С. 161-208.
38. *Альмяшев В.И., Бешта С.В., Грановский В.С., Гусаров В.В.* Применение метода конечных автоматов для кинетического анализа химического взаимодействия материалов с расплавами // Доклады научно-технического совещания «Компьютерное моделирование при оптимизации технологических процессов электротермических производств» («Электротермия-2000»). – СПб., 6-7 июня 2000. – С. 39-56.
39. *Веселкин Д. В., Хантемиров Р. М., Воробейчик Е. Л., Кшняев И. А., Братцева И. В.* Советы молодому ученому: методическое пособие для студентов, аспирантов, младших научных сотрудников и, может быть, не только для них / под. ред. *Е. Л. Воробейчика*. Изд. 3-е, переработ. и дополн. – Екатеринбург: ИЭРИЖ УрО РАН, 2011. – 122 с.
40. «Нормы научной этики» Сената Общества Макса Планка. Перевод *В. Тереховой*. – URL: <http://www.nsc.ru/HBC/2002/n04-05/f17.html>. – Проверено 16.05.2019.

Учебное пособие

Основы постановки физико-химического исследования

Екатерина Алексеевна Тугова
Вячеслав Исхакович Альмяшев
Анатолий Николаевич Коваленко

Подписано в печать 20.05.2019 г.
Формат 60x84 1/16. Бумага офсетная. Печать цифровая.
Усл. печ. л. 5,4. Тираж 50 экз.
Заказ № 5125.

Отпечатано с готового оригинал-макета заказчика
в ООО «Издательство “ЛЕМА”»
199004, Россия, Санкт-Петербург, 1-я линия В.О., д.28
тел.: 323-30-50, тел./факс: 323-67-74
e-mail: izd_lemma@mail.ru
<http://www.lemaprint.ru>