

Ученые записки Таврического национального университета им. В.И. Вернадского  
Серия «Философия. Социология». Том 21 (60). № 1 (2008)

УДК 001.08

## ИНТЕГРАЦИЯ НАУЧНОГО ЗНАНИЯ В СОВРЕМЕННОЙ ХИМИИ.

Ф.А.Тихомирова

*В статье поставлена проблема системно-параметрического исследования интеграции и дифференциации научного знания в современной химии. В качестве модели для исследования механизмов интеграции и дифференциации выбрана одна из динамично развивающихся отраслей современной химии, в которой эти процессы протекают достаточно рельефно – аналитическая химия. Подробно рассмотрена реляционная интеграция различных отраслей химии и математики.*

**Ключевые слова:** дифференциация, интеграция, системно-параметрический метод, математическая химия.

**Постановка проблемы.** Изменения в логической структуре современного естественнонаучного знания связаны с процессами его дифференциации и интеграции.

Значение исследования закономерностей взаимосвязи различных наук прежде всего определяется тем, что почти все важнейшие проблемы развития общества приобретают комплексный характер, их решение связано с использованием достижений ряда наук. Это относится к решению глобальных проблем современности, таких как экологическая, энергетическая, продовольственная, освоение океана и Космоса. Решение этих комплексных междисциплинарных проблем выдвигает на одно из ведущих мест в методологических исследованиях вопросы интеграции различных наук. Все большую актуальность приобретает осмысление того, как происходит, и как будет происходить развитие научного знания благодаря использованию его внутреннего резерва, такого как интеграция.

Интеграция приводит к возникновению новых методов и теорий, коренному изменению структуры и содержания наук. Науки взаимодействуют, обмениваясь парадигмальными принципами. «Парадигмальные прививки», как обозначил их В.С.Степин, изменяют стратегию развития дисциплин и даже приводят к научным революциям [13, С.321].

Вместе с тем усложнение предметов исследования и содержание отдельных научных дисциплин требуют дифференциации, специализации научного знания. Процесс дифференциации научного знания прослеживается по различным параметрам, включающим конкретизацию форм представления знаний. Дифференциация и интеграция в развитии знания не сосуществуют друг с другом, не идут одна за другой, а проявляются одна в другой и через другую. Процессы формализации, математизации, информационные технологии охватывают практически все науки. Математические методы используются в психологии, социологии, экономике, истории и даже в лингвистике.

Процесс математизации наук идет достаточно быстро благодаря высокому уровню развития самой математики и опыту, накопленному при математизации механики и физики. В настоящее время отмечается все возрастающий уровень математизации химии. Широкое использование математических методов определило появление математической химии [16]. Эта научная дисциплина является интегративной областью, в рамках которой известные математические методы (преимущественно методы решения систем линейных и нелинейных уравнений в частных производных) применяются для решения задач химии.

Интенсификация процессов интеграции и дифференциации обуславливает значительный интерес к данной проблеме в отечественной и в зарубежной литературе.

***Анализ последних исследований и публикаций, в которых начало решение данной проблемы, и на которые опирается автор.***

В качестве основных форм интеграции А.Д.Урсул рассматривает совокупность (множество), сложность или комплексность, упорядоченность, организацию и систему. Он отмечает, что существующие различные формы и ступени интеграции детально “могут изучаться системным подходом и различными вариантами общей теории систем”. [21, С. 65]

Среди преимуществ использования системного подхода можно выделить следующие:

- возможность определения общего, при представлении науки как системы;
- целенаправленная, осмысленная работа с массивом знаний;
- возможность определиться с факторами, влияющими на развитие науки;

Анализ и синтез являются логическими основаниями интеграции и дифференциации. Интеграция характеризует процессы, ведущие к целостности, связанности и объединению элементов научного знания: объектов, методов и средств исследования, научных теорий, она играет особую роль в объединении различных форм знаний в некие целостные системы и сопровождается дифференциацией. Это два сопряженных, противоположно направленных процесса в становлении целостного научного знания. В настоящее время предложены различные варианты системного исследования научного знания.

А. В. Чайковский предложил исследовать интеграцию и дифференциацию научного знания с точки зрения параметрического варианта ОТС А. И. Уёмова [22].

А.И.Уёмов и Г.В.Штаксер предлагают описывать целостность и элементоавтономность систем с помощью системных дескрипторов. В основу определения мер целостности положена идея двойственного системного моделирования в рамках параметрического варианта ОТС [20].

Типология аналитико-синтетических процессов, разработанная А.И.Уёмовым [18], дает возможность ввести представление о реистической, атрибутивной и реляционной разновидностях процессов интеграции и дифференциации [15].

Дифференциации и интеграции в естественнонаучном познании посвящены работы М.С. Асимова и А.Турсунова [1], Ю.А. Золотова [5], Н.Т. Костюк, В.С. Лутая, В.Д. Белогуб [8], Л.С. Сычевой [14], М.Г.Чепикова [23].

Авторами подчеркивается необходимость исследования конкретных массивов научного знания для перехода к целенаправленному построению логически организованной, структурной системы.

В качестве модели для исследования механизмов интеграции и дифференциации выбрана одна из динамично развивающихся отраслей современной химии, в которой эти процессы протекают достаточно рельефно – аналитическая химия. А. Левенстам (Финляндия) и Ян М. Житков (США) утверждают: “Философия и аналитическая химия близки в одном смысле: любое созданное ими твердое знание природных явлений аннексируется другими областями.” [25, С.309]. Заслуживает внимания также следующее замечание авторов: “аналитическая химия может обогатить наше понимание науки в целом. Некоторые механизмы, общие для науки, могут быть обнаружены здесь в особенно чистом виде.” [25, С.312].

***Выделение нерешенных частей данной проблемы, которым посвящается данная статья.***

Интеграция научного знания понимается и как противоположность дифференциации, и как нечто большее, включающее совокупное знание в конкретной области. В ряде работ отсутствует понимание интеграции как процесса, при котором исходные науки продолжают существовать и развиваться в рамках целостности. Процессы междисциплинарного взаимодействия знаний в целом изучены хуже, чем внутридисциплинарные закономерности роста научного знания. Очевидна необходимость методологического исследования ситуации перехода от дисциплинарного изучения природы к междисциплинарным исследованиям и разработкам.

Недостаточно исследованы методологические и логико-системные аспекты данной проблемы. Методологический анализ процессов интеграции и дифференциации, на наш взгляд, во многих случаях подменяется метафорическим описанием. Существующие попытки формализации этих описаний представляются достаточно громоздкими. При этом упускаются существенные аспекты. Часто встречаются разночтения, где смысловые неопределенности свидетельствуют о необходимости пересмотра понятийно-категориального аппарата с позиций системной методологии и структурной онтологии. Исследователи обращают внимание на важное значение систематизации формирующихся понятий. Многоуровневыми являются не только сами научно-интегративные процессы, но и понятия, отражающие эти явления.

Различным образом квалифицируются и классифицируются интеграционные процессы в конкретных областях исследования. Представляется очевидной необходимость философско-методологического осмысления проблемы применительно к конкретным наукам [12].

***Формулировка целей статьи (постановка задания);***

Объектом исследования являются процессы интеграции и дифференциации, превратившие современную химию в систему наук.

Целью данной статьи является методологический анализ процессов дифференциации и интеграции, протекающих в различных отраслях химии, в частности, её математизация.

Для этого автор предполагает решить следующие задачи:

-выделить различные формы реализации процессов интеграции и дифференциации в современной химии;

-рассмотреть влияние процессов интеграции и дифференциации в современной химии на рост научного знания.

-рассмотреть математизацию химии как одну из форм реляционной интеграции [15].

***Изложение основного материала исследования с полным обоснованием полученных научных результатов.***

В процессе познания используются методы и теории смежных наук, применяемых к различным областям химических знаний. Вырабатываются новые общие понятия, категории, методы на основе общей концептуальной установки и общих методологических подходов. Спецификой интеграции и дифференциации является то, что эти сопряженные процессы приводят к возникновению пограничных областей знания, которые в свою очередь определяют появление новых форм и методов познания.

Уже к началу XX века внутри химии были четко дифференцированы органическая, аналитическая, физическая, общая и неорганическая химия.

Также можно выделить сравнительно молодые дисциплины – металлоорганическую химию, теоретическую химию, математическую и квантовую химию, нанохимию, координационную химию.

В XIX в. координационная теория и химия комплексных соединений рассматривались как весьма узкий и специальный раздел неорганической химии, то вследствие интеграции и дифференциации они превратились в область химии, сфера влияния которой распространились на аналитическую и органическую химию, биохимию, кристаллохимию и радиохимию[9].

В результате интеграционных процессов появились новые науки – астрохимия, биохимия, геохимия, биогеохимия, математическая и квантовая химия.

Интеграция химии и физики сопровождается дифференциацией новых многочисленных физико-химических отраслей знания. В результате возникают новые промежуточные пограничные отрасли науки, например на стыке физики и химии возникли химическая физика и физическая химия. Развитие ряда направлений физической химии, в свою очередь, привело к отделению от нее электрохимии, коллоидной химии, фотохимии, кристаллохимии. Рост научного знания в химии носит взрывной характер.

Характерный для новейшей химии, как и для всей науки в целом, процесс глубокой внутренней дифференциации в значительной степени связан с открытием качественного многообразия химических частиц. Их строение, превращения и свойства стали предметом изучения специальных разделов химии: электрохимии, химической кинетики, химии полимеров, коллоидной химии, химии высокомолекулярных соединений, нанохимии [11].

Особую значимость приобретают в химии математические методы. Способность математики создавать знаково-символические системы, адекватные определенному уровню химической науки, уплотнять информацию, вырабатывать наиболее рациональные способы ее обработки и преобразования, моделировать природные явления и процессы стимулирует развитие химии. Применение математики в химии в большой степени базируется на ранее разработанном математическом аппарате. Поэтому темпы математизации в значительной степени сдерживаются только уровнем развития самой химии.

Программа математизации химии была намечена еще М.В. Ломоносовым в 1741 г. в работе “Элементы математической химии”. Постановка вопроса о математизации химии М. В. Ломоносовым имеет неопределимое значение с точки зрения развития математической идеологии в химии. Исследования весовых и объемных характеристик химических явлений привели к использованию в химии элементарного аппарата арифметики и алгебры. Принципиально новый уровень математизации химической науки определило становление и развитие временных представлений в рассмотрении химических явлений. Исследования течения химических процессов во времени “внесли” в химию возможность описания химических явлений в виде дифференциальных уравнений. В 1910 году итальянский ученый А.Лотка на основе анализа системы дифференциальных уравнений предсказал возможность колебаний в химических системах. Исследование колебательных реакций во многом стимулировало появление синергетики.

Химическая кинетика базируется на системах обыкновенных дифференциальных уравнений, химическая гидродинамика - на уравнениях в частных производных. Кинетика химических процессов является обширной областью для применения математического моделирования в химии. На стыке химии, физики, математики, биологии и медицины развивается новое направление – кинетика колебательных реакций [10].

Совершенствование математического аппарата во многом связано с расширением областей исследования, которыми становятся экстремальные температуры, каталитические процессы, многокомпонентные и многофазные системы, химические реакции в твердой фазе. Развивается теория нестационарных и неравновесных реакций, которая подкрепляется всем арсеналом средств вычислительной математики. В химии применяются теория уравнений в частных производных и теория групп.

В 1892 Е.С. Федоров использовал теорию групп для теоретического описания 230 возможных типов симметрии атомов в кристаллах. Это позволило ему установить связь между химическим составом, внешней формой и внутренней структурой кристаллов и разработать теорию кристаллохимического анализа. Его предвидение было подтверждено опытами М.Лауэ по отражению рентгеновских лучей в начале XX века.

Широкое применение в химии находят математическая статистика и теория вероятностей, методы вычислительной математики, определяемые компьютеризацией решения прикладных математических задач [2], [24].

Перспективным направлением современной органической химии является математическое планирование эксперимента, которое можно считать одним из разделов математического моделирования. Для описания различных физических, химических, биологических и т.д. процессов и явлений применяются одни и те же математические модели. Одно и то же математическое уравнение ( или понятие ) может описывать совершенно различные процессы или характеристики. В общности математических моделей проявляется междисциплинарный характер и интегрирующая роль математики, ее методов.

В XX веке стали четко видны также и границы формализации и математизации химических знаний. В.И.Вернадский справедливо отмечал, что «математические символы далеко не могут охватить всю реальность и стремление к этому в ряде определенных отраслей знания приводит не к углублению, а к ограничению силы научных достижений» [4, С.116].

На сегодняшний день существует ряд программных пакетов, позволяющих проводить конформационный анализ и рассчитывать энергетические характеристики молекул и интермедиатов, в основном и переходном состояниях с учетом влияния некоторых внешних факторов (например, полярности среды). Это способствует более быстрому и точному описанию механизма реакции. Однако, используя программные пакеты, следует помнить о том, что квантово - механические расчеты тесно связаны с экспериментом и лишь подтверждают его, или подтверждаются им, но не существуют самостоятельно [7].

Среди задач и методов математического планирования эксперимента и математического моделирования стала выделяться новая область исследований, называемая "машинный дизайн в химии". Это направление включает планирование как состава и структуры соединений с заранее заданными свойствами, так и поиск оптимальных путей синтеза сложных органических соединений [3]. Названные задачи нового направления математической химии относятся к достаточно высокому порядку сложности.

Интеграция химии и математики происходит по двум направлениям, относящимся к численным и нечисленным разделам математики. Численные разделы математики позволяют развить количественные основы общей и неорганической химии. Этот количественный базис в общей и неорганической химии развивается параллельно с внедрением физических методов, использованием статистики и внедрением квантово-механических расчетов. Математическая и квантовая химия составляет основу современного учения о строении и динамике химических превращений веществ. Этот теоретический раздел химической науки использует математические методы и квантовую механику для разработки математических и квантово-химических моделей электронного и пространственного строения молекул. Математическая и квантовая химия включает создание и разработку математических методов, моделей строения и механизмов превращений химических соединений на основе представлений и методов квантовой механики, различных топологических методов, в частности теории графов, методов линейной алгебры, методов молекулярной механики и молекулярной динамики, а также методов нелинейной динамики. К математической и квантовой химии относят

также те разделы современной химической термодинамики и химической кинетики которые связаны с поиском и развитием новых математических моделей и методов описания свойств и превращений веществ. Наряду с рассмотрением свободных систем в задачи математической и квантовой химии входит теоретическое исследование поведения молекулярных систем в различных средах, в том числе в матрицах, в электромагнитных, акустических и других полях, а также в веществах, находящихся в экстремальных условиях.

Некоторые авторы считают более перспективным использование нечисленных разделов математики, таких как теория групп, теория графов, теория множеств, теория математической логики и алгебры [6].

Важным является то, что как численные, так и нечисленные разделы математики, а также физика в приложении к объектам общей и неорганической химии требуют компьютерной обработки данных. Использование компьютера позволяет обработать и проанализировать статистическую информацию. В результате интеграции аналитической химии и прикладной математики появилась хеометрика – интегративная дисциплина, содержанием которой является контроль и оптимизация химико-аналитических процедур на основе использования ЭВМ. Хеометрику считают частной областью применения математических методов в химии.

***Выводы из данного исследования и перспективы дальнейших разработок в данном направлении.***

Взаимодействие химии и математики можно рассматривать как процесс преимущественно односторонний. Химия практически не способствовала развитию новых областей математики, а заимствовала разработанные ранее разделы математической науки. Интеграция химии с математикой осуществляется посредством предварительного взаимодействия химии и физики. Математический аппарат, обслуживающий определенные разделы физики, находил применение для задач химии. Математические методы с применением ЭВМ могут дать численные значения, но они не могут предложить объяснения природы химических явлений.

В этой связи вызывают сомнения возможности превращения химии в «департамент» прикладной математики. Необходим методологический анализ адекватности применения математических моделей для формализованного описания химических процессов и объективная оценка ситуаций не критического отношения к использованию математических методов и коммерческих «хеометрических» программ для ЭВМ в химии [24].

На кафедре философии естественнонаучных факультетов ОНУ проведено исследование механизмов интеграции и дифференциации научного знания на примере аналитической химии. Представляет интерес изучение процессов интеграции и дифференциации научного знания с позиций системного подхода. Формальные схемы, составленные на основе системной методологии, предложенной А. В. Чайковским [22], удобны для описания механизмов дифференциации и интеграции науки, знания и познания. На наш взгляд, исследование механизмов процессов интеграции и дифференциации с позиций

системного подхода будет способствовать более глубокому пониманию общих закономерностей развития постнеклассической науки.

Чрезвычайно важным является применение системного подхода в методологии науки, систематизации знаний. Применения языка тернарного описания, правил и принципов параметрической общей теории систем, разработанные А.И. Уёмовым [17], [19] могут быть успешно использованы при постановке и обсуждении целого ряда проблем философии и методологии науки. Процессы интеграции и дифференциации возможно исследовать в рамках системно-параметрического метода, в котором они могут быть эксплицированы в рамках значений бинарных атрибутивных системных параметров. Математизация химии является проявлением реляционной интеграции научного знания. [16, С.102]

Представляет интерес системно-параметрическое изучение концептуальной, структурной, субстратной, организационной целостности идеальных систем (наук) с помощью особого типа системы – связанного списка. Связный список можно использовать как средство изучения целостности систем, относительно того или иного дескриптора, например, концепта или структуры. Степень связности такого списка, отождествляемая со степенью целостности его реляционной структуры, определяется формально.

В дальнейшем представляется возможным исследовать процессы интеграции и дифференциации с помощью двойственного системного моделирования.

### Список литературы

1. Асимов М.С., Турсунов А. Современные тенденции интеграции наук. // Вопросы философии. –1981. – №3. – С.57-67.
2. Батунер Л.М., Позин М.Е. Математические методы в химической технике. – М.: Химия, 1989. – 295 с.
3. Блехман И.И., Мышкис А.Д., Пановко Я.Г. Прикладная математика: предмет, логика, особенности подходов. Киев: Наукова думка, 1976.–269 с.
4. Вернадский В.И. Научная мысль как планетное явление / Отв.ред. А.Л.Яншин.- М.: Наука, 1991. – 271с.
5. Золотов Ю.А. Основные методологические проблемы аналитической химии // Всесоюзная конференция по истории и методологии аналитической химии (Москва, 19-21 ноября 1990 г.): Тезисы докладов: М., 1990. – С. 4-5.
6. Кикель П.В. Математизация научного знания. – Минск: Университетское, 1989. – 87 с.
7. Кларк Т. Компьютерная химия: Практическое руководство по расчетам структуры и энергии молекулы. – М.: Мир, 1990. – 381 с.
8. Костюк Н.Т., Лугай В.С., Белогуб В.Д. Интеграция современного научного знания: методологический анализ.– К.: Вища школа, 1984.–183 с.
9. Кукушкин Ю. Н. Химия координационных соединений. – М.: Высшая школа, 1985. – 455 с.
10. Математические методы в химической кинетике: Сборник научных трудов /Ред. В.И.Быков, АН СССР, Сибирское отделение, Красноярский ВЦ; - Новосибирск: Наука, 1990. – 287 с.
11. Рюк Ж. Поступ сучасних ідей: панорама новітньої науки. – Київ: Основи, 1998. – 669 с.
12. Стеклова И.В. Многообразие науки и современная научная парадигма // Философия, культура и современность. – 2000. – №2. – С.40-53.
13. Степин В.С. Философия науки. Общие проблемы. - М.: Гардарики, 2006.- 384 с.

14. Сычева Л.С. Современные процессы формирования наук. Опыт эмпирического исследования. Новосибирск, Наука, 1984.– 160 с.
15. Тихомирова Ф.А. Интеграция и дифференциация научного знания: системный аспект. // Вісник Національного авіаційного університету. Серія: Філософія. Культурологія. - 1(5). - К.: НАУ, 2007. - С.97-102.
16. Тихомирова Ф.А. К проблеме математической химии // Материалы международной научной конференции «Философия математики: актуальные проблемы», МГУ, 15 - 16 июня 2007 года.- М., Издатель Савин С.А.-2007.- С.352-356.
17. Уёмов А.И. Системный подход и общая теория систем. М.: Мысль, 1978.- 272 с.
18. Уёмов А.И. Методы, приемы и способы исследования. Гл. IX // Основы марксистско-ленинской философии: Учебник.- М., Политиздат, 1971.- С.205-216
19. Уёмов А., Сараева И., Цофнас А. Общая теория систем для гуманитариев. Варшава.- Uniwersitas Rediviva.– 2001.- 276 с.
20. Уёмов А.И., Штаксер Г.В. Определение целостности систем // Системные исследования. Методологические проблемы. Ежегодник-2002/Под ред. Д.М. Гвишиани, В.Н. Садовского и др. М.: Едиториал УРСС, 2004.- С.5-18.
21. Урсул А.Д. Технические науки и интегративные процессы: философские аспекты. Кишинев, : Штиинца. 1987. – 255 с.
22. Чайковский А.В. К проблеме исследования процессов дифференциации и интеграции науки // Философські пошуки. - Львів-Одеса. –2001.-Вип. XI-XII.- С.292-295.
23. Чепиков М.Г. Интеграция науки (философский очерк). 2-е изд. М.: Мысль, 1981.- 276 с.
24. Brereton R.G. // Analyst.-1987.-V.112.-№123.-P.1635.
25. Lewenstam A., Zytkow J.M. Is Analytical Chemistry an Autonomous Field of Science // Frezenius J. Anal. Chem. – 1987. –326. -№4. –P.308-313

***Ф.А.Тіхомірова. Інтеграція наукового знання в сучасній хімії.***

*Стаття присвячена інтеграції та диференціації наукового знання, зокрема процесу математизації сучасній хімії. Аналітичну хімію може бути використано для моделювання процесів інтеграції та диференціації. Запропоновано дослідження логіко-системних засад механізмів в категоріях системно-параметричного методу, розробленого школою А.І. Уйомова.*

**Ключові слова:** *диференціація, інтеграція, системно-параметричний метод, математична хімія.*

***F.A.Tihomirova. Integration of scientific knowledge in modern chemistry.***

*In the article the analysis of science integration and differentiation processes is defined. A.I. Ujomov school offered the original modern system-parametric methodology of investigation integration and differentiation of science. Is researched the influence of the mathematics ideas on the development of modern chemistry.*

**Keywords:** *analysis, synthesis, differentiation, integration, system-parametric methodology, modern chemistry.*

Поступило в редакцію 03.09.2007