Реферат по дисциплине

«История и философия науки»

**Метод моделирования в химии**

**Москва**

**2009 г.**

**Содержание**

Введение

Философские аспекты моделирования как метода познания окружающего мира

Гносеологическая специфика модели

Классификация моделей и виды моделирования

Этапы моделирования

Моделирование в химии

Моделирование молекул, химических процессов и реакций

Теоретическое моделирование

Заключение

Список литературы

**Введение**

Моделирование (лат. *modus* – мера, образ, способ) издавна применялось в научном познании. Например, возникновение представлений Демокрита и Эпикура об атомах, их форме, и способах соединения, об атомных вихрях и ливнях, объяснения физических свойств различных веществ с помощью представления о круглых и гладких или крючковатых частицах, сцеп ленных между собой. Эти представления являются прообразами современных моделей, отражающих ядерно-электронное строение атома. В науке Нового времени первоначально применялись различные механические модели. Постепенно метод моделирования стал приобретать все большее распространение, проникая во все отрасли научного знания. XX век принес методу моделирования новые успехи, связанные с расцветом кибернетики.

Моделирование на современном этапе приобрело значение общенаучного метода. Его особенностью является то, что для изучения объекта используется опосредующее звено – объект-заместитель. Исходный объект исследования при моделировании называется оригиналом, объект-заместитель – моделью.

По мнению большинства выдающихся химиков, в том числе лауреата нобелевской премии Г. Сиборга, теоретическое моделирование является основным методом познания в химии. Сущность химических явлений скрыта от непосредственного наблюдения исследователя, поэтому познание осуществляют путем построения модели невидимого объекта по косвенным данным.

В данной работе рассматриваются гносеологические аспекты моделирования, классификация моделей и место моделирования в химической науке.

**Философские аспекты моделирования как метода познания окружающего мира**

***Гносеологическая специфика модели***

В настоящее время можно найти множество различных определений понятий «модель» и «моделирование». Рассмотрим некоторые из них.

«Под моделью понимают отображение фактов, вещей и отношений определенной области знаний в виде более простой, более наглядной материальной структуры этой или другой области». Такое определение модели приводит Г. Клаус **[6, с.262]**.

Ещё одно определение «модели» приведено в учебнике **[7, с. 482]**: «Модель … представляет собой аналог того или иного фрагмента действительности (вещного или мыслительного) – оригинала модели».

В западной философии эталонным является определение, которое дает В.А. Штофф в своей книге «Моделирование и философия»: «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» **[9, с. 19]**.

По мнению В.В. Давыдова, несмотря на то, что в понимании модели существует широкий «разброс» - от моделирующей установки до теории познания вообще, во всех случаях употребления понятия «модель» можно выделить следующие общие моменты: 1) модель представляет собой средство научного познания; 2) модель всегда выступает как такой представитель оригинала, заместитель прототипа, который в каком-либо отношении более удобен для изучения, и можно перенести полученные при этом знания на исходный объект; 3) как модели, так и прототипы являются системой, характеризующейся существенными структурными свойствами и определенными отношениями; 4) модели охватывают только те свойства прототипа, которые существенны в данной ситуации и которые являются объектом исследования; 5) модели однозначно соответствуют оригиналу **[5, с. 140]**.

По нашему мнению, определение, данное В.А. Штоффом **[9, с.19]**, наиболее полно отражает сущность метода моделирования. Суть этого метода заключается в:

* наличии объекта-посредника;
* существенном сходстве объекта-посредника и оригинала;
* возможности эвристически плодотворного изучения объекта-посредника.

Модели не простые заместители объектов. Модели и связанные с ними представления являются продуктами сложной познавательной деятельности, включающей, прежде всего, мыслительную переработку исходного чувственного материала, его «очищение» от случайного и т.д. Модели выступают как продукты и как средство осуществления этой деятельности.

Важнейшей особенностью модели является ее сходство с оригиналом. Это соответствие модели и оригинала может быть пространственным или физическим, структурным или функциональным. Именно оно позволяет переносить данные, полученные при изучении модели, на оригинал, осуществляя таким образом «обратную связь». Другой основной принцип моделей – наглядность. Он позволяет мысленно воссоздать образ моделируемого объекта и его свойства **[8].**

Объект-оригинал может быть воспроизведен с помощью разных моделей. Достоинства той или иной модели в полной мере зависят от конкретной цели исследования, от принятого концептуального ракурса.

***Классификация моделей и виды моделирования***

Единая классификация видов моделирования затруднительна в силу уже показанной многозначности понятия «модель» в науке и технике. Её можно проводить по различным основаниям:

* по характеру моделей (т. е. по средствам моделирования);
* по характеру моделируемых объектов;
* по сферам приложения моделирования (моделирование в технике, в физических науках, в химии, моделирование процессов живого, моделирование психики и т. п.)
* по уровням («глубине») моделирования, начиная, например, с выделения в физике моделирования на микроуровне (моделирование на уровнях исследования, касающихся элементарных частиц, атомов, молекул).

В связи с этим любая классификация методов моделирования обречена на неполноту, тем более, что терминология в этой области опирается не столько на «строгие» правила, сколько на языковые, научные и практические традиции, а ещё чаще определяется в рамках конкретного контекста и вне его никакого стандартного значения не имеет.

Наиболее известной является классификация по характеру моделей. Согласно ей различают следующие пять видов моделирования **[3]**:

1. Предметное моделирование, при котором модель воспроизводит геометрические, физические, динамические или функциональные характеристики объекта. Например, модель моста, плотины, модель крыла самолета и т.д.

2. Аналоговое моделирование, при котором модель и оригинал описываются единым математическим соотношением. Примером могут служить электрические модели, используемые для изучения механических, гидродинамических и акустических явлений.

3. Знаковое моделирование, при котором в роли моделей выступают схемы, чертежи, формулы. Роль знаковых моделей особенно возросла с расширением масштабов применения ЭВМ при построении знаковых моделей.

4. Со знаковым тесно связано мысленное моделирование, при котором модели приобретают мысленно наглядный характер. Примером может в данном случае служить модель атома, предложенная в свое время Бором.

5. Наконец, особым видом моделирования является включение в эксперимент не самого объекта, а его модели, в силу чего последний приобретает характер модельного эксперимента. Этот вид моделирования свидетельствует о том, что нет жесткой грани между методами эмпирического и теоретического познания.

Предметным называется моделирование, в ходе которого исследование ведётся на модели, воспроизводящей основные геометрические, физические, динамические и функциональные характеристики «оригинала». На таких моделях изучаются процессы, происходящие в оригинале — объекте исследования или разработки (изучение на моделях свойств строительных конструкций, различных механизмов, транспортных средств и т. п.). Если модель и моделируемый объект имеют одну и ту же физическую природу, то говорят о физическом моделировании.

Явление (система, процесс) может исследоваться и путём опытного изучения какого-либо явления иной физической природы, но такого, что оно описывается теми же математическими соотношениями, что и моделируемое явление. Например, механические и электрические колебания описываются одними и теми же дифференциальными уравнениями; поэтому с помощью механических колебаний можно моделировать электрические и наоборот. Такое «предметно-математическое» (аналоговое) моделирование широко применяется для замены изучения одних явлений изучением других явлений, более удобных для лабораторного исследования, в частности потому, что они допускают измерение неизвестных величин. Так, электрическое моделирование позволяет изучать на электрических моделях механические, гидродинамические, акустические и другие явления. Электрическое моделирование лежит в основе аналоговых вычислительных машин (сейчас, правда, практически не использующихся)

При знаковом моделировании моделями служат знаковые образования какого-либо вида: схемы, графики, чертежи, формулы, графы, слова и предложения в некотором алфавите (естественного или искусственного языка)

Важнейшим видом знакового моделирования является математическое (логико-математическое) моделирование, осуществляемое средствами языка математики и логики. Знаковые образования и их элементы всегда рассматриваются вместе с определенными преобразованиями, операциями над ними, которые выполняет человек или машина (преобразования математических, логических, химических формул, преобразования состояний элементов цифровой машины, соответствующих знакам машинного языка, и др.). Современная форма «материальной реализации» знакового (прежде всего, математического) моделирования - это моделировании на цифровых электронных вычислительных машинах, универсальных и специализированных. Такие машины - это своего рода «чистые бланки», на которых в принципе можно зафиксировать описание любого процесса (явления) в виде его программы, т. е. закодированной на машинном языке системы правил, следуя которым машина может «воспроизвести» ход моделируемого процесса.

Действия со знаками всегда в той или иной мере связаны с пониманием знаковых образований и их преобразований: формулы, математические уравнения и прочие выражения применяемого при построении модели научного языка определенным образом интерпретируются (истолковываются) в понятиях той предметной области, к которой относится оригинал. Поэтому реальное построение знаковых моделей или их фрагментов может заменяться мысленно-наглядным представлением знаков и операций над ними. Эту разновидность знакового моделирования иногда называется мысленным моделированием. Впрочем, этот термин часто применяют для обозначения «интуитивного» моделирования, не использующего никаких чётко фиксированных знаковых систем, а протекающего на уровне «модельных представлений». Такое моделирование есть непременное условие любого познавательного процесса на его начальной стадии.

Таким образом, можно прежде всего различать «материальное» (предметное) и «идеальное» моделирование; первое можно трактовать как «экспериментальное», второе — как «теоретическое» моделирование, хотя такое противопоставление, конечно, весьма условно не только в силу взаимосвязи и обоюдного влияния этих видов моделирования, но и наличия таких «гибридных» форм, как «мысленный эксперимент». «Материальное» моделирование подразделяется, как было сказано выше, на физическое и предметно-математическое моделирование, а частным случаем последнего является аналоговое моделирование. Далее, «идеальное» моделирование может происходить как на уровне самых общих, быть может даже не до конца осознанных и фиксированных, «модельных представлений», так и на уровне достаточно детализированных знаковых систем; в первом случае говорят о мысленном (интуитивном) моделировании, во втором — о знаковом моделировании (важнейший и наиболее распространённый вид его — логико-математическое моделирование). Наконец, моделирование на ЭВМ (часто именуемое «компьютерным») является «предметно-математическим по форме, знаковым по содержанию» **[1].**

По характеру той стороны объекта, которая подвергается моделированию, уместно различать моделирование структуры объекта и моделирование его поведения (функционирования протекающих в нем процессов и т. п.). Это различение сугубо относительно для химии или физики, но оно приобретает чёткий смысл в науках о жизни, где различение структуры и функции систем живого принадлежит к числу фундаментальных методологических принципов исследования, и в кибернетике, делающей акцент на моделирование функционирования изучаемых систем.

Схожая классификация есть у Б.А. Глинского в его книге «Моделирование как метод научного исследования», где наряду с обычным делением моделей по способу их реализации, они делятся и по характеру воспроизведения сторон оригинала:

* субстанциональные
* структурные
* функциональные
* смешанные

А.Н. Кочергин **[2]** предлагает рассматривать и такие классификационные признаки, как: природа моделируемых явлений, степень точности, объем отображаемых свойств и др. Но, следует признать, что данные признаки не являются существенными, потому подобные классификации выглядят несколько искусственно.

***Этапы моделирования***

Процесс как теоретического, так и экспериментального моделирования состоит из следующих шагов:

1. Построение модели.
2. Изучение модели.
3. Экстраполяция – перенос полученных данных на область знаний об исходном объекте.

На первом этапе, при осознании невозможности или нецелесообразности прямого изучения объекта, создается его модель. Целью этого этапа является создание условий для полноценного замещения оригинала объектом-посредником, воспроизводящим его необходимые параметры.

На втором этапе производится изучение самой модели – настолько детальное, насколько это требуется для решения конкретной познавательной задачи. Здесь исследователь может вести наблюдения за поведением модели, проводить над ней эксперименты, измерять или описывать ее характеристики – в зависимости от специфики самой модели и от исходной познавательной задачи. Цель второго этапа – получение требуемой информации о модели.

Третий этап (экстраполяционный) представляет собой «возвращение» к исходному объекту, т.е. интерпретацию полученных знаний о модели, оценку их приемлемости и, соответственно, приложение их к оригиналу, позволяющее в случае успеха решить исходную познавательную задачу.

Эти шаги реализуют своеобразный цикл моделирования, в ходе которого модель и оригинал соотносятся друг с другом *(рис.1).*

создание модели

изучение модели

экстраполяция

объект-оригинал (знание до исследования)

объект-оригинал (знание после исследования)

**модель**

полученная информация о модели

***Рис. 1.*** *Этапы моделирования*

**Моделирование в химии**

***Моделирование молекул, химических процессов и реакций***

Материальное (экспериментальное) моделирование широко используется в химии для познания и изучения строения веществ и особенностей протекания химических реакций, для выявления оптимальных условий химико-технологических процессов и др.

**В биохимии и фармакологии** моделирование играет очень большую роль. Прогресс фармакологии характеризуется непрерывным поиском и созданием новых, более совершенных препаратов. В последние годы при создании новых препаратов за основу берется не биологически активное вещество, как это делалось ранее, а субстрат, с которым оно взаимодействует (рецептор, фермент и т.п.). Для таких исследований необходимы максимально подробные данные о трехмерной структуре тех макромолекул, которые являются основной мишенью для препарата. В настоящее время имеется банк таких данных, включающих значительное число ферментов и нуклеиновых кислот. Прогрессу в этом направлении способствовал ряд факторов. Прежде всего, был усовершенствован рентгеноструктурный анализ, а также разработана спектроскопия, основанная на ядерно-магнитном резонансе. Последний метод открыл принципиально новые возможности, так как он позволил устанавливать трехмерную структуру веществ в растворе, т.е. в некристаллическом состоянии. Существенным моментом явилось и то, что с помощью генной инженерии удалось получить достаточное количество субстратов для подробного химического и физико-химического исследования.

Используя имеющиеся данные о свойствах многих макромолекул, удается с помощью компьютеров моделировать их структуру. Это дает четкое представление о геометрии не только всей молекулы, но и ее активных центров, взаимодействующих с лигандами. Исследуются особенности топографии поверхности субстрата, характер его структурных элементов и возможные виды межатомного взаимодействия с эндогенными веществами или ксенобиотиками. С другой стороны, компьютерное моделирование молекул, использование графических систем и соответствующих статистических методов, позволяет составить достаточно полное представление о трехмерной структуре фармакологических веществ и распределении их электронных полей. Такая суммарная информация о физиологически активных веществах и субстрате должна способствовать эффективному конструированию потенциальных лигандов с высокими комплиментарностью и аффинитетом. До сих пор о таких возможностях можно было только мечтать — сейчас они становятся реальностью.

Компьютерное моделирование молекул основывается на многочисленных приближениях и допущениях. Так, предполагается, что энергия молекул определяется только координатами их атомов в пространстве. Но в реальности молекулы не являются неподвижными, а энергетические расчёты на компьютере проводятся на статических молекулах. Сейчас разрабатываются методы молекулярной динамики, которые позволяют учитывать тепловое движение молекул, но до сих пор нет подходов, которые бы достоверно учитывали энтропийную составляющую энергии. К тому же в разумные сроки можно рассчитать время жизни системы порядка нескольких пикосекунд.

Большие сложности представляет изучение трёхмерной структуры белков. На сегодняшний день нет методов, которые могли бы точно предсказать трёхмерную структуру белка на основе его аминокислотной последовательности. Хотя используется метод аналогий, когда предполагается, что идентичные аминокислотные участки разных белков укладываются аналогичным образом. Экспериментальное же получение трёхмерных изображений сопряжено с множеством трудностей: для проведения рентгеноструктурного анализа требуется кристаллизация белка (что возможно только для растворимых белков), а возможности ядерного магнитного резонанса ограничиваются молекулярным размером белков.

Роль молекулярного моделирования, как для фундаментальных, так и для прикладных исследований в области молекулярной биологии и биохимии неуклонно растёт. Это связано и с совершенствованием математического аппарата, и с ростом производительности вычислительной техники, и накоплением огромного количества фактического материала, требующего анализа.

**Моделирование химических реакторов** применяется для предсказания результатов протекания химико-технологических процессов при заданных условиях в аппаратах любого размера. Попытки осуществить масштабный переход от реактора малого размера к промышленному реактору при помощи физического моделирования оказались безуспешными из-за несовместимости условий подобия химических и физических составляющих процесса (влияние физических факторов на скорость химического превращения в реакторах разного размера существенно различно). Поэтому для масштабного перехода преимущественно использовались эмпирические методы: процессы исследовались в последовательно увеличивающихся реакторах (лабораторная, укрупнённая, опытная, полупромышленная установки, промышленный реактор).

Исследовать реактор в целом и осуществить масштабный переход позволило математическое моделирование. Процесс в реакторе складывается из большого числа химических и физических взаимодействий на различных структурных уровнях — молекула, макрообласть, элемент реактора, реактор. В соответствии со структурными уровнями процесса строится многоступенчатая математическая модель реактора. Первому уровню (собственно химическому превращению) соответствует кинетическая модель, уравнения которой описывают зависимость скорости реакции от концентрации реагирующих веществ, температуры и давления во всей области их изменений, охватывающей практические условия проведения процесса. Характер следующих структурных уровней зависит от типа реактора. Например, для реактора с неподвижным слоем катализатора второй уровень — процесс, протекающий на одном зерне катализатора, когда существенны перенос вещества и перенос тепла в пористом зерне. Каждый последующий структурный уровень включает все предыдущие как составные части, например математическое описание процесса на одном зерне катализатора включает как уравнения переноса, так и кинетические. Модель третьего уровня включает, кроме того, уравнения переноса вещества, тепла и импульса в слое катализатора и т. д. Модели реакторов других типов (с псевдосжиженным слоем, колонного типа с суспендированным катализатором и др.) также имеют иерархическую структуру.

С помощью математического моделирования выбираются оптимальные условия проведения процесса, определяются необходимое количество катализатора, размеры и форма реактора, параметрическая чувствительность процесса к начальным и краевым условиям, переходные режимы, а также исследуется устойчивость процесса. В ряде случаев сначала проводится теоретическая оптимизация — определяются оптимальные условия, при которых выход полезного продукта наибольший, независимо от того, смогут ли они быть осуществлены, а затем, на втором этапе, выбирается инженерное решение, позволяющее наилучшим образом приблизиться к теоретическому оптимальному режиму с учётом экономических и других показателей. Для осуществления найденных режимов и нормальной работы реактора необходимо обеспечить равномерное распределение реакционной смеси по сечению реактора и полноту смешения потоков, различающихся составом и температурой. Эти задачи решаются физическим (аэрогидродинамическим) моделированием выбранной конструкции реактора.

Для исследования различных процессов, в которых протекают фазовые и химические превращения, применяются **методы термодинамического моделирования**.

Термодинамическое моделирование фазово-химических превращений основывается, с одной стороны, на законах и методах химической термодинамики, с другой - на математическом аппарате решения экстремальных задач. Полноценное сочетание этих двух подходов позволяет реализовать методику расчета, которая не имеет принципиальных ограничений на природу и компонентность исследуемых систем.

Для исследования различных практических и теоретических задач, связанных с фазовыми и химическими превращениями, необходимо глубокое и детальное исследование физико-химической сущности процесса, выявление закономерностей протекающих при этом фазовых и химических превращений, влияния на них и на выход продукта параметров состояния (температуры, давления, состава реакционной смеси и др.).

Сложность большинства реальных физико-химических процессов не позволяет решить описанные проблемы исключительно экспериментальным путем. Анализ возможных подходов показывает эффективность привлечения современных теорий и методов физико-химического и математического моделирования и расчета с использованием термодинамических представлений. C помощью данных методов можно проводить детальное исследование фазовых и химических превращений.

***Теоретическое моделирование***

Роль теоретического моделирования в развитии химической науки особенно значима, так как мир атомов и молекул скрыт от непосредственного наблюдения исследователя. Поэтому познание осуществляется путем построения моделей невидимых объектов по косвенным данным.



Рис. 2. Построение и изменение моделей

Процесс теоретического моделирования, как уже было сказано выше, осуществляется поэтапно: построение модели, изучение модели и экстраполяция. На каждом этапе можно выделить определенные действия, необходимые для его осуществления *(рис 2).* Модели могут дополняться, изменяться и даже заменяться новыми моделями. Такие процессы происходят, если исследователи сталкиваются с новыми фактами, противоречащими построенной модели. Новая модель – результат переосмысления противоречий старой модели и вновь полученных данных.

Рассмотрим специфику процесса познания при теоретическом моделировании.

Идеальное моделирование является одним из методов теоретического познания. Таким образом, такие структурные компоненты теоретического знания, как проблема, гипотеза и теория, должны составлять основу теоретического моделирования.

После накопления фактологического материала и его анализа выявляется и формулируется проблема. Проблема - форма теоретического знания, содержанием которой является то, что еще не познано человеком, но что нужно познать. Иначе говоря, это знание о незнании, вопрос, возникший в ходе познания и требующий ответа. Проблема не есть застывшая форма знания, а процесс, включающий два основных момента (этапа движения познания) - ее постановку и решение. Правильное выведение проблемного знания из предшествующих фактов и обобщений, умение верно поставить проблему - необходимая предпосылка ее успешного решения. "Формулировка проблемы часто более существенна, чем ее разрешение, которое может быть делом лишь математического или экспериментального искусства. Постановка новых вопросов, развитие новых возможностей, рассмотрение старых проблем под новым углом зрения требуют творческого воображения и отражают действительный успех в науке" **[13]**.

В. Гейзенберг отмечал, что при постановке и решении научных проблем необходимо следующее: а) определенная система понятий, с помощью которых исследователь будет фиксировать те или иные феномены; б) система методов, избираемая с учетом целей исследования и характера решаемых проблем; в) опора на научные традиции, поскольку, по мнению Гейзенберга, "в деле выбора проблемы традиция, ход исторического развития играют существенную роль", хотя, конечно, определенное значение имеют интересы и наклонности самого ученого.

Как считает К. Поппер, наука начинает не с наблюдений, а именно с проблем, и ее развитие есть переход от одних проблем к другим - от менее глубоких к более глубоким. Проблемы возникают, по его мнению, либо как следствие противоречия в отдельной теории, либо при столкновении двух различных теорий, либо в результате столкновения теории с наблюдениями.

Тем самым научная проблема выражается в наличии противоречивой ситуации (выступающей в виде противоположных позиций), которая требует соответствующего разрешения. Определяющее влияние на способ постановки и решения проблемы имеют, во-первых, характер мышления той эпохи, в которую формулируется проблема, и, во-вторых, уровень знания о тех объектах, которых касается возникшая проблема. Каждой исторической эпохе свойственны свои характерные формы проблемных ситуаций.

Для решения выявленной проблемы ученым формулируется гипотеза. Гипотеза - форма теоретического знания, содержащая предположение, сформулированное на основе ряда фактов, истинное значение которого неопределенно и нуждается в доказательстве. Гипотетическое знание носит вероятный, а не достоверный характер и требует проверки, обоснования. В ходе доказательства выдвинутых гипотез одни из них становятся истинной теорией, другие видоизменяются, уточняются и конкретизируются, третьи отбрасываются, превращаются в заблуждения, если проверка дает отрицательный результат. Выдвижение новой гипотезы, как правило, опирается на результаты проверки старой, даже в том случае, если эти результаты были отрицательными.

Так, например, выдвинутая Планком квантовая гипотеза после проверки стала научной теорией, а гипотезы о существовании "теплорода", "флогистона", "эфира" и др., не найдя подтверждения, были опровергнуты, перешли в заблуждения. Стадию гипотезы прошел и открытый Д.И. Менделеевым периодический закон.

Д.И. Менделеев считал, что в организации целеустремленного, планомерного изучения явлений ничто не может заменить построения гипотез. "Они, - писал великий русский химик, - науке и особенно ее изучению необходимы. Они дают стройность и простоту, каких без их допущения достичь трудно. Вся история наук это показывает. А потому можно смело сказать: лучше держаться такой гипотезы, которая может со временем стать верною, чем никакой".

Согласно Менделееву, гипотеза является необходимым элементом естественнонаучного познания, которое обязательно включает в себя: а) собирание, описание, систематизацию и изучение фактов; б) составление гипотезы или предположения о причинной связи явлений; в) опытную проверку логических следствий из гипотез; г) превращение гипотез в достоверные теории или отбрасывание ранее принятой гипотезы и выдвижение новой. Д.И. Менделеев ясно понимал, что без гипотезы не может быть достоверной теории: "Наблюдая, изображая и описывая видимое и подлежащее прямому наблюдению - при помощи органов чувств, мы можем при изучении надеяться, что сперва явятся гипотезы, а потом и теории того, что ныне приходится положить в основу изучаемого".

Таким образом, гипотеза может существовать лишь до тех пор, пока не противоречит достоверным фактам опыта, в противном случае она становится просто фикцией. Она проверяется (верифицируется) соответствующими опытными фактами (в особенности экспериментом), получая характер истины. Гипотеза является плодотворной, если может привести к новым знаниям и новым методам познания, к объяснению широкого круга явлений.

Гипотеза как метод развития научно-теоретического знания в своем применении проходит следующие основные этапы.

1. Попытка объяснить изучаемое явление на основе известных фактов и уже имеющихся в науке законов и теорий. Если такая попытка не удается, то делается дальнейший шаг.

2. Выдвижение догадки, предположения о причинах и закономерностях данного явления, его свойств, связей и отношений, о его возникновении и развитии и т.п. На этом этапе познания выдвинутое положение представляет собой вероятное знание, еще не доказанное логически и не настолько подтвержденное опытом, чтобы считаться достоверным. Чаще всего выдвигается несколько предположений для объяснения одного и того же явления.

3. Оценка основательности, эффективности выдвинутых предположений и отбор из их множества наиболее вероятного на основе указанных свыше условий обоснованности гипотезы.

4. Развертывание выдвинутого предположения в целостную систему знания и дедуктивное выведение из него следствий с целью их последующей эмпирической проверки.

5. Опытная, экспериментальная проверка выдвинутых из гипотезы следствий. В результате этой проверки гипотеза либо "переходит в ранг" научной теории, или опровергается, "сходит с научной сцены". Однако следует иметь в виду, что эмпирическое подтверждение следствий из гипотезы не гарантирует в полной мере ее истинности, а опровержение одного из следствий не свидетельствует однозначно о ее ложности в целом. Эта ситуация особенно характерна для научных революций, когда происходит коренная ломка фундаментальных концепций и методов и возникают принципиально новые идеи.

Таким образом, решающей проверкой истинности гипотезы является в конечном счете практика во всех своих формах, но определенную (вспомогательную) роль в доказательстве или опровержении гипотетического знания играет и логический (теоретический) критерий истины. Проверенная и доказанная гипотеза переходит в разряд достоверных истин, становится научной теорией.

**Заключение**

Моделирование глубоко проникает в теоретическое мышление. Более того, развитие любой науки, в том числе и химии, можно трактовать — в весьма общем, но вполне разумном смысле, — как «теоретическое моделирование». Важная познавательная функция моделирования состоит в том, чтобы служить импульсом, источником новых теорий. Нередко бывает так, что теория первоначально возникает в виде модели, дающей приближенное, упрощенное объяснение явления, и выступает как первичная рабочая гипотеза, которая может перерасти в «предтеорию» — предшественницу развитой теории. При этом в процессе моделирования возникают новые идеи и формы эксперимента, происходит открытие ранее неизвестных фактов. Такое «переплетение» теоретического и экспериментального моделирования особенно характерно для развития физических теорий (например, молекулярно-кинетической или теории ядерных сил). Моделирование — не только одно из средств отображения явлений и процессов реального мира, но и объективный практический критерий проверки истинности наших знаний, осуществляемой непосредственно или с помощью установления их отношения к другой теории, выступающей в качестве модели, адекватность которой считается практически обоснованной. Применяясь в органическом единстве с другими методами познания, моделирование выступает как процесс углубления познания, его движения от относительно бедных информацией моделей к моделям более содержательным, полнее раскрывающим сущность исследуемых явлений действительности.

Для развития химической науки важную роль играет не только теоретическое, но и экспериментальное моделирование химических процессов, позволяющее изучать сложные химико-технологические процессы, подбирать оптимальные условия их протекания, рассчитывать состав и выход продуктов реакций.

**Список литературы**

1. Батоpоев К.Б. Кибеpнетика и метод аналогий. - М.: Высшая школа, 1974.
2. Кочеpгин А.Н. Моделиpoвание мышления. - М.: Наука, 1969.
3. Сичивица О.М. Методы и формы научного познания. - М.: Высшая школа, 1993., С. 95.
4. Новик И.Б. О философских вопросах кибернетического моделирования. - М.: Знание, 1964.
5. В.В. Давыдов, А.У. Варданян. Учебная деятельность и моделирование. – Ер.: Луйс, 1981.
6. Клаус Г.. Кибернетика и философия. М.: И.Л., 1963, с. 262.
7. Философия: Учебное пособие для высших учебных заведений. – Ростов н/Д.: Феникс, 2002.
8. Химия: методика преподавания, №4, 2003, с. 10-13.
9. Штофф В.А. Моделирование и философия. – М.: Наука, 1966.
10. Ушаков Е.В. Введение в философию и методологию науки: учебник / Е.В.Ушаков. – М.: КНОРУС, 2008, с. 149 – 163.
11. Фролов М.Т. Гносеологические проблемы моделирования. – М.: Наука, 1961.
12. Тумаркин А. «Философские аспекты моделирования как метода познания окружающего мира. Применение моделирования в различных отраслях человеческого знания и деятельности», 1994.
13. Алексеев П.В., Панин А.В. Теория познания и диалектика. М., 1991.
14. Экспеpимент. Модель. Теоpия. М.— Беpлин, Наука, 1982.