

С. В. Шалагин, Г. Э. Шалагина

КОГНИТИВНЫЕ ПРОБЛЕМЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ИНФОРМАЦИОННОЙ ХИМИИ: ТЕХНИЧЕСКИЙ И ГУМАНИТАРНЫЙ АСПЕКТЫ

Ключевые слова: когнитивные проблемы, компьютерное моделирование, информационная химия.

Представлены проблемы когнитивного барьера и аберрации когнитивного процесса в информационной химии. Идентифицирован когнитивный предел компьютерного моделирования при исследовании естественнонаучных объектов по мере снижения объемов анализируемых образцов и/или уровней их концентрации. Эти проблемы актуальны с одной стороны, в постмодерном гуманитарном контексте, в условиях информационного общества, с другой стороны – для философии науки, учитывая возрастание в целостной научной парадигме, в том числе в современной химии, роли технических наук и информатики.

Keywords: cognitive problems, computer modeling, infochemistry.

The problems of cognitive barrier and aberration cognitive process in infochemistry are presents. The cognitive limit of computer modeling is identified in the study of natural objects as reduce the volume of samples and/or concentration levels. These problems are actual on the one hand, in postmodern humanitarian context, in the information society, on the other hand - for the philosophy of science, given the increase in integral research paradigm, including modern chemistry, the role of technical sciences and informatics.

Введение

Технические науки обладают особым статусом в качестве наук о материальной культуре при необходимой их близости к естествознанию. Предмет естествознания (природа) каузирует объективистскую, материалистическую общенаучную методологию, в то время как науки социальные (об обществе), гуманитарные (о духе) и технические (об искусственной технике) разворачивают исследователя к осознанию важности духовной (культурной) компоненты реальности. Актуальность постановки вопроса о когнитивных проблемах компьютерного моделирования в информационной химии связана с активным осмыслением в постмодерной культуре, философии места и роли информатики, новейших ее разработок в антропологической перспективе, в аспекте их влияния на статус, природу и судьбу человека в новой информационной социальной реальности. О возрастании в целостной научной парадигме роли информационных наук пишут многие исследователи [1 – 3]. Химия не осталась в стороне от этой тенденции: она также претерпевает сегодня методологическое влияние информатики.

В химии информационный подход традиционно был связан с новыми возможностями вычислительной техники по обработке результатов экспериментов [4 – 8]. Иное дело – осмыслить роль информатики в контексте принципиально новой методологической системы отсчета, в условиях возрастания в целостной научной парадигме роли информационных наук. Информационная химия – это не экзотический раздел химии, а, как пишет А.П.Свитин, раздел информологии как целостной информационной теории реальности, это «информологическая химия», основанная на приложении принципов так понимаемой информологии к химическим объектам [9]. При этом именно информационное мышление, по мысли автора, является в химии более органичным, более соответствующим самой природе химических объектов. Так, для химии более естественно динамическое, континуальное, а не статическое и

дискретное мышление. Особая роль в постдискретной химии придается переходному состоянию, совокупности переходных состояний (поток), в то время как технологическое мышление расчленяющее.

Научное творчество в области компьютерного моделирования в ходе своего осуществления упирается в когнитивный барьер и когнитивную аберрацию, то есть в антропологически заданные границы применимости технического мышления [3]. Когнитивный предел при выполнении компьютерного моделирования заключается в том, что 1) компьютерная модель сложной системы трудно формализуема, оказываясь сложнее самой реальности; 2) аудиовизуальные отображения, производимые ЭВМ, накладываются на действительность, вытесняя представления о самой действительности. Как сказанное проявляется в информационной химии, ключевой проблемой которой, по мысли А.П.Свитина, является именно задача восполнения моделей объектов химической реальности?

Когнитивные проблемы информационной химии

Во многом благодаря успехам информационной химии промышленность (или, согласно [10], индустриальная среда) широко использует ее достижения для разработки новых материалов и технологий (НМТ). Благодаря создаваемым компьютерным моделям существенно сокращается время и стоимость получения НМТ при сохранении приемлемой точности. Вместе с тем, в [10] обозначена проблема обеспечения баланса между временем, стоимостью и точностью получения и/или анализа НМТ. Технические возможности, которыми располагает современная химия, позволяют работать с пробами материалов малого объема и малых уровней концентраций. Обратная сторона данных возможностей – получение представительной пробы может быть почти таким же трудоемким, как и сам процесс анализа [10, стр. 34].

Таким образом, когнитивная проблема анализа НМТ в современной информационной химии заключается в том, что дальнейшее снижение объемов анализируемых образцов и уровней их концентрации существенно затрудняет как процесс получения представительной пробы, так и процесс анализа. Данная проблема заключается в возможностях и в доступности современных средств, применяемых для исследования НМТ, тем самым идентифицируя физический когнитивный барьер для анализа НМТ.

Рассмотрим и другой аспект, связанный с созданием компьютерных моделей, позволяющих разрабатывать НМТ. В современной химии эксперименту всегда предшествует процесс анализа свойств и характеристик НМТ, которые предполагается получить. В современных химических лабораториях вычислительная техника (ВТ) играет решающую роль при решении задач прогнозирования синтеза и химических реакций при получении НМТ. Формализованное представление химической информации позволяет осуществить стратегическое планирование химического эксперимента с участием новых и/или малоизученных процессов. Развитие современных средств ВТ, безусловно, расширило возможности для хранения, обработки и оперативного доступа к массивам информации о НМТ. Согласно [11], «колоссальная память и быстроедействие компьютера позволяют найти и оценить огромное число возможных вариантов синтеза того или иного соединения, выбрать из них оптимальный план синтеза, который таким образом может быть осуществлен с минимальными затратами и максимальными шансами на успех». Вместе с тем, как показано в [3] научное творчество в области компьютерного моделирования в ходе своего осуществления упирается в когнитивный барьер и когнитивную аберрацию, то есть в антропологически заданные границы применимости технического мышления к естественным наукам. Когнитивный предел при выполнении компьютерного моделирования заключается в том, что 1) компьютерная модель сложной системы трудно формализуема, оказываясь сложнее самой реальности; 2) аудиовизуальные отображения, производимые ЭВМ, накладываются на действительность, вытесняя представления о самой действительности.

В учебно-научной литературе определены три основных этапа компьютерного моделирования [12]. Этап 1 – построение концептуальной модели и ее формализация. Этап 2 – алгоритмизация модели и ее машинная реализация. Этап 3 – получение и интерпретация результатов моделирования.

Неотъемлемая часть этапа 1 – сопоставление объекта и его компьютерной модели (КМ) по характеристикам, которые являются существенными для исследования, т.е. верификация и валидация КМ [12].

Вычислительная сложность расчетов, выполняемых на этапе 2, ограничена возможностями технических средств ВТ. Выполнение этапа 2 производится при наличии на входе формализованного описания объекта моделирования.

Остановимся более детально на первом этапе. Выполнение этапа 1 изначально предполагает кон-

цептуализацию и формализацию создаваемой модели. При этом актуализируется проблема когнитивного барьера компьютерной модели, обозначаемая следующим образом.

С одной стороны, производится абстрагирование от определенных характеристик объекта моделирования – новых материалов и технологий, которые, по мнению исследователя, являются не существенными. При этом исследователь, согласно [13, стр. 42] руководствуется собственной интуицией и опирающейся на постановку прикладной задачи и понимание природы объекта моделирования. Кроме того, имеет место упрощение характера связей между характеристиками объекта. Например, линейаризация связей между параметрами КМ с целью ее упрощения, при наличии у исследователя информации о нелинейном характере указанных связей. Следствием подобного абстрагирования и упрощения является создание идеального образа моделируемого объекта. Подобная идеализация неизбежно влечет за собой ограничения на адекватность создаваемой КМ. Внутренние и выходные характеристики моделируемого объекта отображаются с приемлемой точностью только на ограниченной области адекватности в пространстве входных параметров КМ.

С другой стороны, учет всех параметров объекта моделирования и нелинейного характера связей между ними ведет к существенному усложнению процессов верификации и валидации создаваемой КМ. Определение области адекватности КМ – сложная процедура, которая требует существенных вычислительных затрат. Указанные затраты экспоненциально возрастают при росте количества отображаемых параметров моделируемого объекта [12].

В результате, совокупные вычислительные затраты, направленные на определение области адекватности создаваемой КМ сложного объекта, становятся существенно выше, чем затраты на выполнение совокупности вычислительных экспериментов над создаваемой КМ. При компьютерном моделировании первая задача практически не отделима от второй [13, 14]. Но с увеличением сложности создаваемой КМ объекта, на ее верификацию и валидацию, в частности, идентификацию области адекватности вновь создаваемой КМ, требуется затрачивать существенно больше усилий, чем на получение новых знаний об объекте моделирования.

Обозначенная проблема когнитивного барьера разрешима различными методами в зависимости от того, в какой степени формализуема КМ исследуемого объекта. Когнитивный барьер возможно «отодвинуть» двумя способами. Первый способ предполагает наличие для моделируемого объекта адекватного формального описания, выполненного на этапе 1. В данном случае ограничения на сложность алгоритма и машинной реализации КМ, выполняемой на этапе 2, определяется возможностями технических средств моделирования и является проблемой технической, а не философской. Второй способ предполагает научный поиск адекватного формального описания исследуемого объекта – сложной системы, без которого выполнение этапа 2,

а, значит, и адекватное компьютерное моделирование указанного объекта будет принципиально невозможно. Вопрос об успешности и целесообразности подобного научного поиска в естественных науках является проблемным с когнитивной точки зрения по мере дальнейшего получения новых знаний об объекте моделирования. В частности, знаний о новых материалах и технологиях в области инфохимии.

При компьютерном моделировании сложных систем в информационной химии актуальна также проблема аберрации когнитивного процесса. При выполнении компьютерного моделирования НМТ, целостное и всестороннее представление об изучаемом объекте существует не у каждого исследователя и даже не у каждой группы исследователей. В данной связи, при выполнении этапа 1, трудоемкие процессы верификации и/или валидации создаваемой КМ в отдельных случаях бывают выполнены не достаточно качественно. Существует два источника аберрации когнитивного процесса при выполнении компьютерного моделирования: 1) ограничения на проверку степени адекватности создаваемой КМ, естественные или искусственные и 2) субъективная ограниченность знаний исследователей, создающих КМ, о НМТ.

Заключение

Компьютерные модели, область адекватности которых не идентифицирована, безусловно, выполняют когнитивную функцию, но применимы в процессе познания только лишь на уровне постулатов и рабочих гипотез. Хотя явное введение постулатов в процессе естественнонаучного познания – процесс ответственный, многотрудный, но необходимый, требуется учитывать следующее важное обстоятельство. Из-за объективизации и натурализации результатов, полученных на компьютерной модели с не идентифицированной областью адекватности, и давления указанных результатов на понимание исследователей, имеет место опасность аберрации когнитивного процесса при компьютерном моделировании новых материалов и технологий. Вместе с тем, идентифицированные аберрации между КМ и реальными процессами и явлениями являются «питательной средой» для развития современной химии как науки.

Литература

1. Кутырёв В.А. *Время Mortido* /В.А.Кутырёв. СПб: Алетей, 2012. 336 с.
2. Эпштейн М.Н. *Техника – религия – гуманистика. Два размышления о духовном смысле научно-*

технического прогресса/ М.Н.Эпштейн // Интелпрос: Интеллектуальная Россия [электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.intelpros.ru/subject/figures/mikhail-yeprshitejn/11280-texnika-religiya-gumanistika-dva-razmyshleniya-o-duhovnom-smysle-nauchno-texnicheskogo-progressa.html>, свободный, 26.01.14

3. Галанова Г.Э., Шалагин С.В. Когнитивные проблемы компьютерного моделирования в контексте культуры постмодерна. *Вестник КГТУ им. А.Н.Туполева*. 2014. № 1. С. 5 – 9.
4. Степанова Т.И., Бессарабов А.М., Гришин М.А., Поляков А.В., Стоянов О.В. Автоматизированная разработка технологических регламентов производства веществ особой частоты на основе информационных calcs-технологий // *Вестник Казанского технологического университета*. 2013. Т. 16. № 14.
5. Мухутдинов А.Р., Вахидова З.Р. Результаты изучения картины процесса горения твердого топлива с использованием информационных технологий // *Вестник Казанского технологического университета*. 2013. Т. 16. № 3.
6. Бессарабов А.М., Иванов М.Я., Вендило А.Г., Степанова Т.И., Стоянов О.В. Информационный calcs-проект плазмохимического синтеза нанопорошков особой частоты// *Вестник Казанского технологического университета*. 2012. Т. 15. № 23.
7. Бессарабов А.М., Трынкина Л.В., Трохин В.Е., Вендило А.Г., Стоянов О.В. Разработка информационной CALS-системы технических условий для широкого ассортимента органических растворителей особой частоты // *Вестник Казанского технологического университета*. 2012. Т. 15. № 21.
8. Вендило А.Г., Бессарабов А.М., Ковалева Н.Е., Попов К.И., Степанова Т.И., Стоянов О.В. Разработка технологии получения ассортимента ионных жидкостей на основе информационного calcs-стандарта // *Вестник Казанского технологического университета*. 2012. Т. 15. № 21.
9. Свитин А.П. *Философские основания и принципы становления информационной химии. Автореферат дисс...докт. филос. наук. (На правах рукописи)*. Красноярск, 2005.
10. *Аналитическая химия. Проблемы и подходы: В 2 т: Пер. с англ./ Под ред. Р.Кельнера, Ж.-М.Мерме, М.Отто, Г.М.Видмера. М.: Мир: АСТ, 2004. Т.1. 608 с.: ил.*
11. Зефиров Н.С. Компьютерный синтез/ Н.С.Зефиров// *Соросовский образовательный журнал*. № 7. 1997. с. 52 – 56.
12. Советов Б.Я. *Моделирование систем: Учеб. для бакалавров / Б.Я.Советов, С.А.Яковлев. – 7-е изд. – М.: «Юрайт», 2012. – 343 с.*
13. Бусленко Н.П. *Моделирование сложных систем/ Н.П.Бусленко. - М.: Наука, 1968. - 356 с.*
14. Шеннон Р. *Имитационное моделирование систем — искусство и наука: пер. с англ. / Р.Шеннон. - М.: Мир, 1978. - 424 с.*

© С. В. Шалагин доктор технических наук, доцент, доцент кафедры КС Казанского национального исследовательского технического университета им. А.Н.Туполева, sshalagin@mail.ru; Г. Э. Шалагина - кандидат философских наук, доцент, доцент кафедры ФиН КНИТУ, galanova@rambler.ru.

© S. V. Shalagin, Doctor of Technical Science degree holder, docent, docent of the Computer Systems department of Kazan national research technical university named after A.N.T upolev, sshalagin@mail.ru; G. E. Shalagina, “kandidatskaya” degree in philosophy holder, docent, docent of the Philosophy and History of Science department of Kazan national research technological university, galanova@rambler.ru.