

ФОРМИРОВАНИЕ НОВОГО НАУЧНОГО НАПРАВЛЕНИЯ И ЕГО ОТЛИЧИЕ ОТ РАСШИРЕНИЯ СУЩЕСТВУЮЩИХ ПОДХОДОВ: ПРИМЕР ИНФОХИМИИ

Ашихмина М.С., Филозов В.С., Старикова А.А., Скорб Е.В.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург

DOI 10.55959/MSU012444-6-2026-22-122-126

Развитие современной науки характеризуется высокой динамикой и значительным накоплением знаний, сопровождающимся появлением новых исследовательских направлений и междисциплинарных областей. Несмотря на достигнутые результаты, сохраняется широкий круг нерешённых задач, требующих дальнейшего теоретического и методологического осмысления. В этих условиях особенно актуальна проблема отсутствия единого определения нового научного направления. Это затрудняет различение между расширением существующих методов и формированием принципиально новых исследовательских подходов. Одной из областей, в которых указанная проблема проявляется особенно наглядно, является современная химия.

В последние годы развитие химии характеризуется активным формированием междисциплинарных направлений, объединяющих вычислительные методы, анализ данных и искусственный интеллект. Этот переход отражает смену научной парадигмы – от описательного подхода к предсказательному, основанному на обработке больших массивов данных и построении моделей, способных выявлять скрытые закономерности в химических системах [3, 4]. Особое значение уделяется концепции цифровой химии и инфохимии [2, 3]. В связи с этим возникает вопрос о критериях, позволяющих отличить формирование нового научного направления от расширения существующих методов и подходов. К таким критериям можно отнести: изменение

подхода к постановке задач (концептуальный уровень), появление новых типов задач и методов работы с данными (методологический уровень), формирование междисциплинарных исследовательских сообществ и организационных структур (организационный уровень). Всё это влияет на развитие новых исследовательских компетенций. Более того, получение квалификации в новых областях позволяет выпускникам получать высокооплачиваемые позиции наряду с компаниями химического сектора в IT высокотехнологичных компаниях.

Одновременно с этим в химии накопился значительный объём данных о молекулах, реакциях, материалах и биологических процессах. Эти данные распределены по статьям, базам, лабораторным журналам и патентам. Однако результаты, как правило, сильно различаются по формату представления, качеству исследований и условиям получения. В рамках классического научного подхода это приводит к тому, что знания остаются фрагментированными и слабо связанными между собой. Проблема заключается не столько в недостатке данных, сколько в отсутствии удобной структуры для работы с ними.

Кроме того, развитие технологической базы, рост вычислительных мощностей позволяют не только анализировать данные, но и строить прогностические модели. Использование вычислительных экспериментов как стандартного инструмента позволяет формировать цифровые представления химических процессов. В свою очередь, это делает возможным переход к более системному описанию химии.

Таким образом, сочетание накопленного эмпирического материала и развитие инструментов для его анализа послужило фундаментом для становления Инфохимии как самостоятельного исследовательского направления. В данном подходе химические системы рассматриваются не только как совокупности веществ и протекающих между ними реакций, но и как структуры, способные хранить, передавать и преобразовывать информацию. Такой подход дополняет традиционные представления, позволяя по-новому интерпретировать процессы.

Также важно определить, в каких случаях можно говорить о формировании нового научного направления, а не о расширении

существующих методов. Формирование нового научного направления определяется совокупностью взаимосвязанных признаков. На концептуальном уровне это проявляется в изменении характера постановки научных задач и способов интерпретации результатов. На методологическом уровне – в появлении новых типов задач и способов работы с данными, выходящих за пределы существующих подходов. На организационном уровне – в формировании междисциплинарных исследовательских коллективов, развитии специализированных поднаправлений и создании условий, обеспечивающих воспроизводимость результатов. На уровне исследовательских компетенций – в возникновении требований к подготовке специалистов, способных интегрировать знания из различных областей и работать с новыми инструментами анализа.

Под новым научным направлением понимается исследовательский подход, в котором новизна проявляется не только на уровне используемых методов, но и на уровне постановки задач, интерпретации результатов и структуры исследовательских компетенций.

Рассмотренные признаки формирования нового научного направления могут быть прослежены на примере современных инфохимических исследований. В частности, развивается направление инфохимических исследований, ориентированное на анализ сложных стохастических систем с использованием методов компьютерного зрения и искусственного интеллекта. Например, в работе 2025 года показано, что анализ пузырьковой динамики в сложных жидкостях с использованием нейронных сетей позволяет выявлять скрытые зависимости между химическим составом и макроскопическими свойствами системы [1]. Подобные подходы демонстрируют принципиально новый уровень интерпретации химических процессов, при котором экспериментальные данные рассматриваются как высокоразмерные информационные массивы.

Параллельно с этим развивается направление, в котором объединяются автоматизация, хемоинформатика и методы анализа данных. Современные исследования показывают, что цифровая химия

включает не только расчёт отдельных молекул, но и переход к построению комплексных систем и автоматизированных исследовательских платформ [5, 6]. Такие системы становятся основой для создания «цифровых двойников» химических процессов, что важно для изучения сложных фазовых переходов и неравновесных явлений. При этом используемые цифровые и вычислительные методы выступают не только как инструменты анализа, но и как элементы, формирующие саму исследовательскую среду.

Формирование новых научных направлений, таких как инфохимия, связано не только с трансформацией исследовательских подходов, но и с изменением требований к подготовке специалистов. В этих условиях особое значение приобретает развитие научного мышления студентов, включающего способность к постановке исследовательских задач, работе с данными и интерпретации сложных систем.

Существенным является не только использование новых инструментов, но и изменение характера постановки задач. Так, если в рамках традиционного подхода задача формулируется как установление зависимости между параметрами системы или как описание механизма реакции, то в инфохимии она может ставиться как выявление скрытых закономерностей в высокоразмерных данных или как построение модели, способной прогнозировать поведение системы. Например, анализ динамики пузырьков в сложных жидкостях может рассматриваться не только как физико-химический процесс, но и как источник информации, позволяющий выявлять взаимосвязи между составом системы и её макроскопическими свойствами.

Инфохимия как междисциплинарное направление создаёт условия для развития указанных компетенций за счёт интеграции химии, анализа данных и методов искусственного интеллекта. Это способствует переходу от описательного к аналитическому и прогностическому типу мышления, соответствующему современным научным подходам. Таким образом, меняется и представление о самой системе: она рассматривается не только как совокупность веществ и реакций, но и как носитель информации, подлежащий анализу, интерпретации

и моделированию. Это способствует переходу от описательного к аналитическому и прогностическому типу мышления, соответствующему современным тенденциям развития науки.

Развитие цифровых решений в химии позволяет перейти от общего анализа химических систем к детальному изучению конкретных процессов на молекулярном уровне. Кроме того, применение инфохимического подхода к исследованию структурно сложных и стохастических систем может играть важную роль в исследовании межмолекулярных взаимодействий.

Таким образом, инфохимия может рассматриваться как пример формирующегося научного направления, становление которого определяется не только расширением методического инструментария, но и изменением характера постановки задач, структуры исследовательских компетенций и организационных форм научной деятельности. В этом смысле её анализ позволяет уточнить критерии, по которым возможно различать внедрение новых методов и формирование нового научного направления.

ЛИТЕРАТУРА

1. Aliev T. [и др.]. Rosé or white, glass or plastic: computer vision and machine learning study of cavitation bubbles in sparkling wines // *RSC Advances*. 2025. № 7 (15). С. 5151–5158.
2. Bräse S. Digital chemistry: navigating the confluence of computation and experimentation – definition, status quo, and future perspective // *Digital Discovery*. 2024. № 10 (3). С. 1923–1932.
3. Dalmau D., Alegre-Requena J. V. Integrating digital chemistry within the broader chemistry community // *Trends in Chemistry*. 2024. № 8 (6). С. 459–469.
4. Hardian R. [и др.]. Artificial intelligence: the silver bullet for sustainable materials development // *Green Chemistry*. 2020. № 21 (22). С. 7521–7528.
5. Li J. [и др.]. Autonomous laboratories in China: an embodied intelligence-driven platform to accelerate chemical discovery // *Digital Discovery*. 2025. № 7 (4). С. 1672–1684.
6. Salas M. [и др.]. AI-powered open-source infrastructure for accelerating materials discovery and advanced manufacturing // *Communications Materials*. 2026. № 1 (7). С. 65.