СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ «ТЕОРИЯ И ПРАКТИКА НАУЧНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА» (В ПОРЯДКЕ ОБСУЖДЕНИЯ)

Стариков В.Н.
Мичуринский государственный аграрный университет
vnst@mail.ru

Ниже предлагается для обсуждения фрагмент рабочей программы специальной дисциплины «Теория и практика научного эксперимента (НЭ)» для студентов-бакалавров педагогических направлений математических профилей (в объеме 16 ч. лекций, 30 ч. практических занятий и 62 ч. С.Р.) и отдельные особенности ее преподавания. НЭ, как интегрированный естественно-научный эксперимент, имеет 4 составляющие: техническую (метрологическую и физическую), химическую, биологическую, математическую, которые учтены. Дисциплина полностью обеспечена УМК, готовым к работе с использованием современных ИТ, содержит межпредметные связи с другими учебными дисциплинами и видами учебной деятельности студентов.

Мы предлагаем для обсуждения следующие **темы лекций** (16 ч):

Сущность исследования. Связь понятий “исследование”, “эксперимент”, “опыт”, “анализ”, “обследование”. Цели исследований и понятие «герменевтический круг». Метатеория, идея, доктрина, парадигма, проблема, задача, гипотеза. Гипотеза, ее роль и выдвижение. Виды исследований. Структура научного знания по В.С. Ледневу.

Измерение и вычисление (*in silico*). Измерение в математике. Соизмеримые и несоизмеримые отрезки. Понятие действительного числа. Ошибки вычислений и измерений. Абсолютная и относительная погрешности. Теоремы о предельных абсолютной и относительной погрешностях. Нижняя и верхняя граница приближенного числа и их связи с погрешностями. Виды количественных и качественных измеряемых признаков. Измерительные шкалы: наименований (номинативная), порядковая (ранговая, ординарная), интервалов и отношений. Физические и геометрические измерения. Гауссова теория нормально распределенных ошибок. Действие ошибок наблюдений на кривые частот, приводящее в нормальном распределеиии к рядам Эджворта или Грама-Шарлье.

Моделирование и измерение. Физические, математические и информационные модели. Динамические и вероятностные модели. Детерминированные и случайные эксперименты. Выборка и совокупность. Способы отбора. Особенности биологических экспериментов. Проблема взаимодействия генотипа со средой. Наблюдения в естественных условиях. Полевые опыты. Рандомизация. Лабораторные биологические эксперименты (*in vitro, in situ, in vivo, in utero, ex vivo*). Особенности психологических экпериментов. Виды наблюдений. Верификация: надежность, валидность и возможность генерализации (обобщения).

Особенности физических, химических и технических экспериментов. *Точность* методики выполнения измерений в метрологии: *правильность* и *прецизионность* (*повторяемость* и *воспроизводимость*). Мысленный эксперимент (МЭ). МЭ Галилея с падающими телами. Парадокс близнецов в теории относительности. МЭ Эйнштейна с лифтом. Демон Максвелла. МЭ Гейзенберга и его соотношение неопределенностей (СН) в квантовой механике (КМ). Минимизация соотношения неопределенностей (МСН) Гейзенберга в сверхточных измерениях. Простая задача КМ по МСН, приводящая к распределению Пуассона для средних значений**.**

Основы метрологии. Оценка погрешности измерений. Введение в метрологию. Классификация погрешностей измерений. Вероятностная оценка случайной погрешности. Обработка результатов прямых, косвенных и совместных измерений. Измерительный эксперимент. Виды распределения погрешностей (РП): нормальное, равномерное, треугольное, трапециевидное и антимодалъные *AI* и *AII* РП, экспоненциальное и Вейбулла РП**.**

Моделирование объекта и планирование эксперимента. Моделирование и экспериментальные измерения. Пассивный и активный эксперимент. Однофакторный, многофакторный и полный факторный эксперимент.

Построение функциональных зависимостей по экспериментальным данным. Построение функциональной зависимости (ФЗ) при однофакторном эксперименте. Быстрые методы построения ФЗ. Сглаживание экспериментальных временных рядов. Интерполяция, экстраполяция и аппроксимация.

Моделирование сложных процессов. Классификация моделей. Физическое моделирование. Математическое моделирование. Основные математические структуры.

Мы предлагаем для обсуждения следующие **темы практических занятий** (30 ч):

Методология математического моделирования. Концепция последовательного усложнения разрабатываемой модели. Переход к безразмерным переменным. Редукция сложных систем. Анализ моделей.

Эмпирические и теоретические методы исследования. Эмпирические методы исследования (явление, факт, наблюдение, ощущение, восприятие, представление, воображение, счет, измерение, оценивание, сравнение, моделирование, натуральное, моделирование, натуральное, экспериментирование и др.). **Мыслительно-логические методы исследования**. Научные категории (понятие, положение, аксиома (постулат), теорема, категория, суждение, умозаключение, принцип, закон, теория). Виды мыслительной деятельности (абстрагирование, идеализация; формализация, классификация и типология, обобщение, доказательство, дедукция, индукция, анализ, синтез, интеллектуальное (абстрактное) моделирование, мыслительный (мысленный) эксперимент, аналогия, сопоставление и др.). **Сущность оценивания.**

Фазы доказательства и его виды. Тезис. Аргументы. Демонстрация. Виды доказательств (от определения, от обратного (от абсурдного), на основе анализа свойств исследуемого объекта, на основе классификации факторов, аксиоматическое, фактологическое, концептуальное, экспериментальное, по концентрации фактов).

Виды анализа. Классификация методов анализа, используемых в исследованиях (на основе таблицы четырех полей, дискриминантный, вариационный, факторный, регрессионный, кластерный, многомерное шкалирование, балансовый метаанализ, дисперсионный, контент-анализ, оценочный, агрегирующий, горизонтальный, вертикальный, детерминированный, стохостический). Характеристика методов анализа с позиций решаемых ими задач.

Вариационный анализ. Вариация (В). Виды вариационных рядов: ранжированный, дискретный, интервальный. Среднее арифметическое (СА) значение**.** Показатели В: размах В; среднее линейное отклонение; общая В признака; дисперсия признака (П); среднее квадратическое отклонение (СКО); относительное линейное отклонение П; коэффициент осцилляции; простой коэффициент вариации (КВ). Значения основных статистических показателей: ошибка СА; ошибка СКО; ошибка КВ. Точность опыта. Достоверность вычисления.

Дисперсионный анализ (ДА). Понятие ДА. Подготовка данных к ДА. Однофакторный ДА для несвязных и связных выборок.

Ранговый корреляционный анализ. Коэффициенты ранговой корреляции (КРК) Спирмена и Кендалла. Множественный КРК (коэффициент конкордации *W***).** Бисериальъный коэффициент корреляции.

Корреляционно-регрессионный анализ. Метод наименьших квадратов. Линейное уравнение регрессии (УР). Адекватность УР. Методы многомерных группировок (многомерной классификации).

Факторный анализ (ФА). Детерминированный ФА. Стохастический ФА.

Планирование эксперимента. Примерный алгоритм планирования эксперимента. Пример парного факторного эксперимента (ПФЭ). Общий вид двухфакторного ПФЭ. Исходные данные для составления системы нормальных уравнений (исходная матрица).

Обработка результатов измерений. Проверка гипотезы соответствия эмпири-

ческого распределения погрешностей теоретическому (нормальному).

Выявление различий в распределении признака. Обоснование задачи сравнения распределений признака. χ^2-критерий и λ-критерий.

Дискриминантный анализ и кластерный анализы.

Примечание. В качестве примера рассмотрим фрагмент лекции [1] «**Моделирование и измерение.** Физические, математические и информационные модели... Простая задача квантовой механики по минимизации СН, приводящая к распределению Пуассона для средних значений».

Пусть мы решаем уравнение Шредингера с гамильтонианом гармонического осциллятора (ГО). Запишем гамильтониан в виде $\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\hat{h},\ \hat{h} = \left(\frac{\hat{p}_x}{p_0}\right)^2 + \left(\frac{\hat{x}}{x_0}\right)^2$, где $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$, а $p_0 = \hbar/x_0 = \sqrt{\hbar m\omega}$. Нормированный (безразмерный) гамильтониан $\hat{h}$ представим в факторизованном виде: $\hat{h} = \left(\frac{\hat{x}}{x_0} - i\frac{\hat{p}_x}{p_0}\right)\left(\frac{\hat{x}}{x_0} + i\frac{\hat{p}_x}{p_0}\right) - i\left[\frac{\hat{x}}{x_0}, \frac{\hat{p}_x}{p_0}\right]$, и введем эрмитово сопряженные друг другу операторы $\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\hat{x}}{x_0} + i\frac{\hat{p}_x}{p_0}\right),\ \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\hat{x}}{x_0} - i\frac{\hat{p}_x}{p_0}\right),\ [\hat{a}, \hat{a}^+] = 1,$ где учтено, что $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$ и $x_0p_0 = \hbar.$ Задача свелась к нахождению спектра (λ) и нормированных собственных векторов (СВ) φ_λ эрмитова оператора $\hat{N} = \hat{a}^+\hat{a}$. Итак, $\hat{N}\varphi_\lambda = \lambda\varphi_\lambda,\ ||\varphi_\lambda|| = 1.$ Отсюда получаем: $\lambda = (\varphi_\lambda, \hat{N}\varphi_\lambda) = (\hat{a}\varphi_\lambda, \hat{a}\varphi_\lambda) = ||\hat{a}\varphi_\lambda||^2 \ge 0,\ ||\hat{a}\varphi_\lambda|| = \sqrt{\lambda}.$ Следовательно, спектр энергии ГО ограничен снизу: $E_\lambda = \hbar\omega\left(\lambda + \frac{1}{2}\right) \ge \frac{1}{2}\hbar\omega$. Итак, $\lambda \ge 0,$ причем наименьшему собственному значению $\lambda = 0$ отвечает вектор $\varphi_0,$ удовлетворяющий уравнению $\hat{a}\varphi_0 = 0.$ Далее заметим, что $\hat{a}\hat{N} = \hat{a}\hat{a}^+\hat{a} = (1 + \hat{a}^+\hat{a})\hat{a} = (1 + \hat{N})\hat{a},$ или $[\hat{a}, \hat{N}] = \hat{a}.$ Используя этот коммутатор, получаем $\hat{a}\hat{N}\varphi_\lambda = \lambda\hat{a}\varphi_\lambda = (1 + \hat{N})\hat{a}\varphi_\lambda,$ откуда $\hat{N}(\hat{a}\varphi_\lambda) = (\lambda - 1)\hat{a}\varphi_\lambda.$ Следовательно, $\hat{a}\varphi_\lambda = C_\lambda^{(-)}\varphi_{\lambda-1},\ C_\lambda^{(-)}||\hat{a}\varphi_\lambda|| = \sqrt{\lambda}.$ Получаем нормированный СВ $\varphi_{\lambda-1} = \frac{1}{\sqrt{\lambda}}\hat{a}\varphi_\lambda.$ Подействовав *k* раз оператором $\hat{a}$ на вектор $\varphi_\lambda,$ получим нормированный СВ $\varphi_{\lambda-k} = [\lambda(\lambda-1)\cdots(\lambda-k)]^{1/2}\varphi_\lambda.$

Мы уже доказали, что $\lambda \ge 0.$ Поэтому процедура должна оборваться при достижении СВ φ_0. Это возможно только при $\lambda = n = 0, 1, 2, \ldots.$ В результате мы получили спектр энергии ГО: $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right).$ Покажем теперь, что все СВ могут быть построены по вектору $\varphi_0.$ Воспользуемся коммутатором $[\hat{N}, \hat{a}^+] = [\hat{a}, \hat{N}]^+ = \hat{a}^+.$ Имеем $\hat{N}\hat{a}^+\varphi_n = \hat{a}^+(\hat{N} + 1)\varphi_n = (n + 1)\hat{a}^+\varphi_n.$ Значит,

$\hat{a}^+\varphi_n = C_n^{(+)}\varphi_{n+1}.$ Далее, $||\hat{a}^+\varphi_n||^2 = (\varphi_n, \hat{a}\hat{a}^+\varphi_n) = (\varphi_n, (1 + \hat{N})\varphi_n) = n + 1,\ C_n^{(+)} = \sqrt{n+1}.$ В итоге получим:

$\varphi_n = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}}\varphi_0,\ ||\varphi_n|| = 1;\ \hat{a}^+\varphi_n = \sqrt{n+1}\varphi_{n+1},\ \hat{a}\varphi_n = \sqrt{n}\varphi_{n-1},\ \hat{a}\varphi_0 = 0.$ Применим полученные формулы в координатном представлении для вывода явных выражений для волновых функций ГО. Имеем $\begin{pmatrix} \hat{a} \\ \hat{a}^+ \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\hat{x}}{x_0} \pm i\frac{\hat{p}_x}{p_0}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi \pm \frac{\partial}{\partial\xi}\right).$ Для определения волновой функции основного состояния получаем простое уравнение $\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right)\varphi_0 = 0.$ Его решение $\varphi_0 = C_0e^{-\xi^2/2}.$ Нормировочный коэффициент определяем из условия $||\varphi_0||^2 = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx|\varphi_0|^2 = |C_0|^2x_0\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\xi^2} = 1,$ откуда (выбирая соответствующий фазовый множитель) $C_0 = \left(x_0\sqrt{\pi}\right)^{-1/2}.$ Волновую функцию состояния с номером *n*>0 находим по общей формуле: $\varphi_n = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}}\varphi_0 = \frac{C_0}{\sqrt{2^n n!}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2/2}$. Далее воспользуемся легко проверяемым операторным тождеством: $\xi - \frac{d}{d\xi} = -e^{\xi^2/2}\frac{d}{d\xi}e^{-\xi^2/2}$, откуда $\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n = (-1)^n e^{\xi^2/2}\frac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2/2}$. В результате получим волновые функции осциллятора в окончательном виде (здесь введены $H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2}$ - *полиномы Эрмита*): $\varphi_n = C_n H_n(\xi)e^{-\xi^2/2}$, $C_n = (x_0\sqrt{\pi}2^n n!)^{-1/2}$, $H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2}$.

Когерентные состояния гармонического осциллятора. Состояния, минимизирующие произведение в соотношении неопределенностей (СН) координаты и импульса частицы, подчиняются уравнению (см. ниже) $\left(\frac{\hbar}{2\sigma^2}(\hat{x} - x_0) + i(\hat{p}_x - p_0)\right)\varphi = 0.$ Для осциллятора оно может быть, очевидно, записано в виде: $\hat{a}\phi_a = \alpha\phi_a$; где α - *произвольное комплексное число*. Итак, минимизирующие СН состояния описываются собственными векторами оператора $\hat{a}$. Комплексность собственных значений объясняется *неэрмитовостью* $\hat{a}$. Найдем выражение для ϕ_a в базисе из СВ гамильтониана (*энергетическое представление*). Имеем $\phi_a = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\varphi_n$, $\hat{a}\phi_a = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\sqrt{n}\varphi_{n-1} = \alpha\sum_{n=0}^{\infty} c_n\varphi_n$, откуда следует рекуррентное соотношение для коэффициентов:
$c_{n+1} = \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}}c_n$, и $c_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}c_0$. Коэффициент c_0, полагая его действительным, находим из нормировочного условия:
$(\phi_a, \phi_a) = 1 = c_0^2\sum_{n,n'}\frac{(\alpha^*)^{n'}\alpha^n}{\sqrt{n'!n!}}(\varphi_{n'}, \varphi_n) = c_0^2\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(|\alpha|^2)^n}{n!}$, $c_0 = e^{-|\alpha|^2/2}$, где учтено условие ортонормированности $(\varphi_{n'}, \varphi_n) = \delta_{n'n}$. Итак, $\phi_a = e^{-|\alpha|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\varphi_n$. Следовательно, вероятность обнаружить осциллятор в стационарном состоянии с энергией E_n равна $w_n = |(\varphi_n, \phi_a)|^2 = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!}e^{-|\alpha|^2}$. Мы получили известное *распределение Пуассона*, что и требовалось доказать. При этом физический смысл параметра $|\alpha|^2$ таков: $|\alpha|^2 = \langle n \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} n w_n$. До сих пор мы рассматривали состояние осциллятора ϕ_a в фиксированный момент времени t=0. Состояние χ_a при t>0 получим очевидной заменой базисных векторов в разложении $\phi_a = \sum c_n\varphi_n : \varphi_n \to \psi_n = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right)\varphi_n$.

Полностью нормированное решение
$\chi_a = e^{-i\omega t/2}\phi_{a_t} = (\sqrt{\pi}x_0)^{-1/2}\exp\left[-\frac{i}{2}\omega t + \frac{1}{4}(\alpha_t - \alpha_t^*)^2 - \frac{1}{2}(\xi - \sqrt{2}\alpha_t)^2\right]$, представляющее собой *нерасплывающийся волновой пакет* (Шредингер,1926). Координаты в состоянии χ_a распределены по нормальному закону:
$\rho(x) = |\chi_a|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}x_0}\exp\left[-\frac{1}{x_0^2}(x - A\cos(\omega t + \theta))^2\right]$. Используя эту теорию, Рой Глаубер стал лауреатом Нобелевской премии по физике 2005 г. «за вклад в квантовую теорию оптической когерентности». Нерасплывающиеся волновые пакеты χ_a названы им *когерентными состояниями.*

Осталось доказать, что состояния, минимизирующие произведение в соотношении неопределенностей (СН) координаты и импульса частицы, подчиняются указанному выше уравнению. Будем искать состояния ψ, в которых достигается минимум СН, т.е. точное равенство в СН $\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p_x)^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$. Пусть две наблюдаемых оператора $\hat{A}$ и $\hat{B}$ не коммутируют. Тогда их коммутатор имеет вид: $[\hat{A},\hat{B}]=i\hat{C}$,где $\hat{C}$- эрмитов оператор. Покажем, что дисперсии величин наблюдаемых операторов в произвольном состоянии ψ удовлетворяют СН: $\langle(\Delta A^2)\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle\geq\frac{1}{4}\langle C^2\rangle$. Введем наблюдаемые $\hat{a}=\hat{A}-<A>,\ \hat{b}=\hat{B}-<b>,\ [\hat{a},\hat{b}]=i\hat{C},$ и рассмотрим неотрицательную функцию действительного параметра λ: $F(\lambda)=||\lambda\hat{a}-i\hat{b}||^2=((\lambda\hat{a}-i\hat{b})\psi,\lambda\hat{a}-i\hat{b}\psi)=(\psi,(\lambda\hat{a}+i\hat{b})(\lambda\hat{a}-i\hat{b})\psi)=$

$=(\psi,(\lambda^2\hat{a}^2+\hat{b}^2+\lambda\hat{C})\psi)=\lambda^2<a^2>+\lambda<C>+<b^2>\geq 0.$ Ввиду произвольности λ дискриминант полученного квадратного трехчлена должен быть неположительным: $<C>^2\ -4<a^2><b^2>\leq 0.$

Пусть $\hat{A}=\hat{x},\ \hat{B}=\hat{p}_x$. Тогда $[\hat{x},\hat{p}_x]=i\hbar,$ и мы получаем СН Гейзенберга: $<(\Delta x)^2><(\Delta p_x)^2>\geq\frac{\hbar^2}{4}$. Получаем для них систему уравнений: $(\lambda\hat{a}-i\hat{b})\psi=0,\ \lambda^2<a^2>+\lambda<C>+<b^2>=0,\ <A^2><b^2>=\frac{1}{4}<C>^2$.

Отсюда находим $\lambda=-\frac{<C>}{2<a^2>}$, и уравнение для определения *состояния, минимизирующего произведение неопределенностей*, принимает вид: $\left(\frac{<C>}{2<a^2>}\hat{a}+i\hat{b}\right)\psi=0.$ Рассмотрим случай координаты и импульса: $\hat{a}=\hat{x}-x_0,\ \hat{b}=\hat{p}_x-p_0,\ \hat{C}=\hbar.$ В координатном представлении $\hat{x}=x_0,\ \hat{p}_x=-i\hbar\partial/\partial x,$ и получаем уравнение: $\left[\frac{d}{dx}+\frac{x-x_0}{2\sigma^2}-\frac{p_0}{\hbar}\right]\psi(x)=0.$, что и требовалось доказать. Здесь $\sigma^2=<(\Delta x)^2>,\ x_0=<x>,\ p_0=<p_x>$.

Выводы. По нашему мнению, предложенная программа поможет сформировать целостное представление об основных этапах становления современной теории и практики научного эксперимента (НЭ), их структуре, об основных категориях, понятиях и методах, о роли и месте НЭ в профессиональной подготовке педагога.

Литература

1. Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М., 1971. С. 51-53.