

A!

Aalto University
School of Chemical
Technology

Hyvä tieteellinen käytäntö

*Eero Kontturi
Biotuotteiden ja biotekniikan laitos
Kemian tekniikan korkeakoulu*

Luennon tarkoitus

Oppimistavoitteet:

- Mitä *tieteellinen käytäntö* tarkoittaa?
- Mikä on opinnäytetyön tarkoitus?
- Erot kirjallisuustyön, kokeellisen raportin ja tieteellisen (kokeellisen) tutkimuksen välillä
- Vilpillisten menetelmien tunnistaminen: plagiointi, tulosten väärentäminen, tulosten kaunistelu
- Tutkijan eettiset velvoitteet

Sisältö

(1) Erilaiset tieteelliset tekstit

- Raportti, selvitys
- Kirjallisuuskatsaus, kirjallisuustutkimus
- Kokeellinen tutkimus (tieteellinen julkaisu)
- Opinnäytetyöt

(2) Tieteellisten julkaisujen kirjoittaminen

- Muoto
- Johdanto
- Kokeiden raportointi
- Tulosten tarkastelu
- Viittaaminen

(3) Vilppi

- Tulosten vääristely/kaunistelu
- Plagiointi

Tiede

Wikipedian määritelmä:

Tiede tarkoittaa todellisuuden ilmiöiden ja niiden välisten suhteiden järjestelmällistä ja arvostelevaa tutkimista sekä sen avulla saatua tietojen jäsentynyttä kokonaisuutta.

Oxford Dictionaryn määritelmä:

The intellectual and practical activity encompassing the systematic study of the structure and behaviour of the physical and natural world through observation and experiment.

- Tiedettä toteutetaan tieteellisen tutkimuksen menetelmin

Tieteellinen tutkimus

Tutkimukseen kuuluvat:

- Tutkimusidean keksiminen
 - Olemassa olevien aineistojen tuntemus ja arviointi (kirjallisuus)
 - Hypoteesi
 - Kokeiden suunnittelu
 - Kokeiden tekeminen
 - Tulosten tarkastelu, johtopäätökset
 - Tulosten raportointi
 - Johtopäätösten raportointi
- } Yleensä samanaikaista
} Yleensä samanaikaista
- Kun tarpeeksi monet kokeelliset havainnot vahvistavat hypoteesin, siitä tulee teoria
 - Yksikin ristiriitainen tulos kaataa teorian

Huomio tieteellisen tutkimuksen käytännöstä

Tulosten tarkastelu → Tulkinta → Johtopäätökset

- *Tulkinta* ei välttämättä ole täsmällinen määritelmä toiminnasta, jota tehdään tulosten tarkastelun yhteydessä tai sen jälkeen
- Usein tutkija luo tulosten perusteella *malleja*, jotka ovat johdonmukaisia tulosten kanssa

Tieteellinen raportointi, julkaiseminen

Tieteellinen raportointi

- Raportti, selvitys
- Kirjallisuuskatsaus
- Kokeellinen tutkimus (tieteellinen julkaisu)

Raportit ja selvitykset

- Yleisiä teollisuudessa ja tilaustutkimuksissa
- Deskriptiivisiä raportteja
- Usein johtopäätös on hyvin yksinkertainen (esim. jokin asia joko toimii tai ei toimi)
- Selvityksistä puuttuu yleensä ns. tieteellistä ymmärrystä yleisesti edistävä (filosofinen) näkökulma

Kirjallisuuskatsaus

- Syvällinen ja kattava katsaus tieteelliseen kirjallisuuteen joltakin alueelta
- Sisältää aina katsauksen tutkimuksen nykytilaan (state of the art) ja usein myös historiallisen katsauksen
- Hyvä kirjallisuuskatsaus sisältää uusia näkökulmia, johtopäätöksiä ja jopa uusia tieteellisiä avauksia

Tieteelliset julkaisut

- Tieteellinen tutkimus julkaistaan tieteellisissä julkaisuissa
- Julkaisut (scientific publications) julkaistaan säännöllisesti ilmestyvissä tieteellisissä lehdissä (scientific journals)
- Joskus julkaisuja tehdään myös kirjoissa sekä kirjasarjoissa (nykyisin harvinaisempaa ainakin luonnontieteiden alalla)
- Tieteelliset julkaisut ovat *aina* vertaisarvioituja (peer reviewed), eli muut tutkijat arvioivat, ovatko tekstit julkaisukelpoisia ja jos ovat, minkälaisia korjauksia ne vaativat ennen julkaisua

Tieteellisten julkaisujen eri formaatit

”Pitkät” formaatit:

- Kirjallisuustutkimus (Literature Review, ei sisällä alkuperäistä dataa)
- Artikkelit (Full Article / Article, sisältää alkuperäistä dataa)

”Lyhyet” formaatit:

- Communication / Short Communication ← Alustavia julkaisuja, joissa on yleensä yksi merkittävä löytö
- Letter }
• Note / Short Note }
 } Kuin artikkelit,
 } mutta lyhyempiä
- Lyhyet formaatit ovat lyhyempiä; ne sisältävät vähemmän tuloksia ja niukemmin keskustelua (discussion) tuloksista
- Nykyisin monet korkean profiilin lehdet julkaisevat pääasiassa lyhyen formaatin julkaisuja

Tieteellisten julkaisujen eri formaatit

Esimerkkejä, kuinka tieteelliset lehdet määrittelevät lyhyen ja pitkän formaatin erot

Communications:

These must report preliminary research findings that are highly original, of immediate interest and are likely to have a high impact on the scientific community.

Full articles:

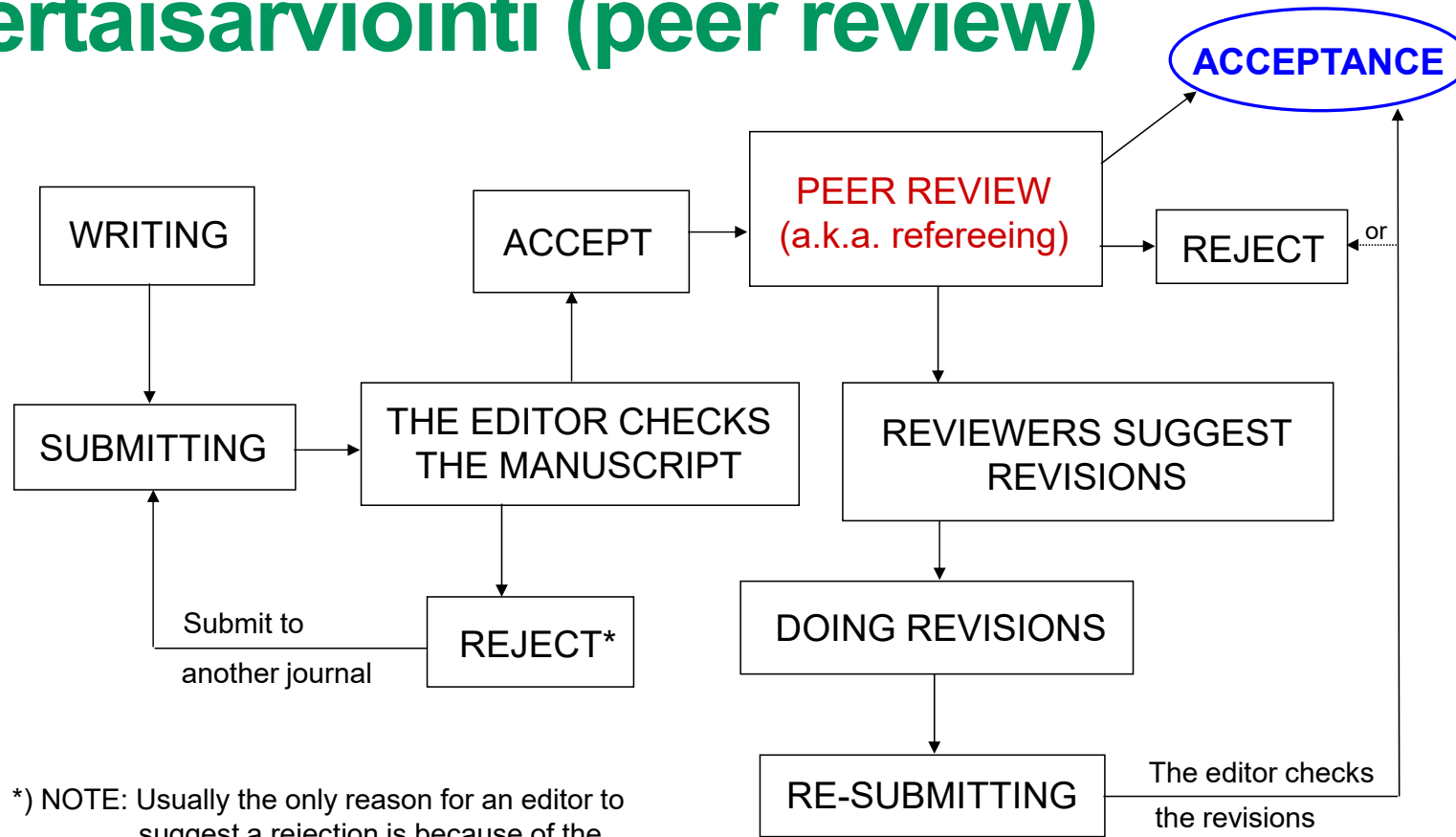
These must represent a significant development in the particular field and are judged according to originality, quality of scientific content and contribution to existing knowledge.

Tieteellisten julkaisujen eri formaatit

- Lyhyen formaatin painoarvo on käytännössä yhtä iso kuin pitkänkin formaatin, molemmat ovat tieteellisiä julkaisuja
- Monet lehdet suosivat lyhyttä formaattia, etenkin korkean painokertoimen (impact factor) lehdet kuten Nature, Science, Angewandte Chemie International Edition, Journal of the American Chemical Society jne.
- Usein lyhyen formaatin pituudelle on yläraja, esimerkiksi: 1500 sanaa (Nature), 15 000 merkkiä (Angewandte Chemie Int. Ed.), 2200 sanaa (Journal of the American Chemical Society)

- Nyrkkisääntö: ei ole hyvän tieteellisen tavan mukaista pilkkoa yhtä pitkän formaatin kokonaista artikkelia useaan lyhyen formaatin julkaisuun
- Ei välttämättä pidä enää paikkansa: lyhyen formaatin julkaisut saattavat suosionsa takia nykyisin sisältää yhtä paljon informaatiota kuin pitkän

Vertaisarviointi (peer review)



*) NOTE: Usually the only reason for an editor to suggest a rejection is because of the subject (outside the scope of journal)

Vertaisarvionti (peer review)

- Arvioijat ovat käytännössä aina nimettömiä
- Vain lehden toimittaja tietää arvioijien identiteetin
- Arvioijalla on suuri vastuu:
 - Pitää varmistaa tutkimuksen laadukkuus ja eettisyys
 - Toisaalta tunteet (henkilökohtaiset suhteet, kilpailuasetelmat) eivät saisi vaikuttaa arvioon
- Nyrkkisääntö: *jos tutkimusta ei ole julkaistu vertaisarvioidussa tieteellisessä lehdessä, sitä ei ole olemassa*

Konferenssiesitykset ja -julkaisut

- Tieteellistä tutkimusta julkistetaan myös konferenssiesitysten muodossa usein kansainvälisissä konferensseissa
- Toisinaan konferenssiesitykset kerätään kirjaan kirjoitettujen julkaisujen muodossa (conference proceedings)
- Monilla aloilla (mm. kemia ja fysiikka) konferenssijulkaisut eivät kuitenkaan ole vertaisarvioituja, eli niillä ei ole ollenkaan samaa painoarvoa kuin varsinaisilla tieteellisillä julkaisuilla
- Joillain aloilla (mm. tietotekniikka) konferenssijulkaisut ovat usein vertaisarvioituja, jolloin niillä on sama painoarvo kuin ”normaaleilla” tieteellisillä julkaisuilla

Opinnäytetyöt

- Kandityöt, diplomityöt, pro gradu –tutkielmat, lisenssiaattityöt, väitöskirjat
- Opinnäytetyön pääasialliset tarkoitukset ovat tutkimustyön opettelu ja oppineisuuden osoittaminen
- Muita funktioita: työmarkkinoille pääsy, meritoituminen, verkottuminen, tieteellisen tiedon tuottaminen
- Opinnäytetyöt voivat sisältää myös negatiivisia tuloksia (jokin *ei* toiminut), joita ei voi yleensä sisällyttää tieteellisiin julkaisuihin kuin erikoistapauksessa
- Formaatti on pidempi, mutta käytännössä sama kuin muillakin tieteellisillä julkaisuilla

Tieteellisen kirjoittamisen menetelmät

Tieteellisen julkaisun muoto: IMRaD

IMRaD: Introduction, Methods, Results and Discussion.

Introduction – Importance of or reason for the study, theoretical background, literature references, research questions and approach, the tested hypothesis or the purposes delimitations ...

Methods – The experiments and test arrangements, equipment and test facilities, test materials, analytical methods and their repeatability and accuracy ...

Results – The worked data of measurements (Inc. pictures and tables) and experiences; the answer to the research questions, findings ...

Discussion - The answer infer and its meaning, fitting with what other researchers findings, possibilities for the generalization of findings, perspectives for future research, conclusions ...

Johdanto

- Usein vaikein kirjoitettava tieteellisessä julkaisuissa
- Pitää vastata kysymyksiin:
 - Miksi tutkimus on tehty (**hypoteesi**, johon kokeet perustuvat)?
 - Mikä on viitekehys ja tausta?
 - Mitä alalta tiedetään aikaisemmin (kirjallisuus)?
 - Miten tutkimus edistää tiedeyhteisön ymmärrystä?
 - Mikä on tutkimuksen *uutuusarvo*?
- Johdanto tulee esittää hyvin täsmällisesti ja täysin ymmärrettävästi, mutta niin lyhyesti kuin mahdollista
- Hypoteesin selkeä kuvaus on johdannon tärkeimpiä tehtäviä; tutkimuksen tulee perustua johonkin uuteen hypoteesiin – tutkimuksen motivaationa *ei* saisi esittää pelkästään aukkoa tutkimuskirjallisuudessa, ts. että asiaa ei ole aiemmin tutkittu

Kokeiden raportointi

- Käytetyt materiaalit ja tehdyt kokeet tulee raportoida täsmällisesti ja siten, että kuka tahansa saman koulutuksen saanut pystyy toistamaan kokeet
- Materiaaleista pitää mainita valmistaja sekä puhtaus (purity) ja olennaiset arvot (esim. polymeereistä molekyylipaino)
- Jos käytetään instrumentaalimenetelmiä, laitteen valmistaja sekä kaikki mahdolliset parametrit pitää mainita

Tulosten tarkastelu

- Tuloksista etsitään trendejä:
 - Vastaako hypoteesia?
 - Jos ei vastaa, miksi ei?
 - Tehdäänkö uusi hypoteesi?
- Kun trendi on tunnistettu ja hypoteesi todennettu, tarkastellaan, voidaanko tulokset selittää jollakin teorialla
- Parhaiten teorian sopivuuden voi todistaa matemaattisella mallilla, esimerkiksi sovittamalla datan johonkin yhtälöön (esim. kineettinen mallinnus)
- Jos mikään teoria ei päde, voidaan tehdä uusi

Tulosten tarkastelu vs. kokeiden suunnittelu

- Jos tuloksia on vaikea selittää, tarvitaan usein lisäkokeita
- Tulosten tarkastelu tässä mielessä on vahvasti sidoksissa kokeiden suunnitteluun:
 - Koesuunnittelussa kannattaa aluksi keskittyä ääripisteisiin, joiden avulla voidaan havaita karkea trendi tai sen puute
 - Ääripisteiden avulla kannattaa suunnitella, mitä koepisteitä tai menetelmiä käytetään seuraavaksi
 - Usein kokeiden suunnitteluun palataan moneen kertaan jo silloin kun kokeet ovat käynnissä

Tulosten tarkastelu vs. kokeiden suunnittelu

- Lisäkokeiden määrä voi helposti kasvaa hallitsemattomaksi
- Usein lisäkokeilla saadaan lisäarvoa tulosten tulkinnalle, mutta usein ei saada
- Joskus on pakko vetää raja, jonka jälkeen enää ei tehdä lisää kokeita
- Kokemus (ohjaus) on erityisen tärkeätä rajan vedossa

Do not, under any circumstances, wait that the project is complete.
George Whitesides (Harvard University)

Tulosten tarkastelu: hypoteesi vs. teoria

- Tieteellinen tutkimus perustuu aina johonkin hypoteesiin
- Hypoteesi saattaa kyseenalaistaa jonkin olemassa olevan teorian
- Jos teoria kyseenalaistetaan, siinä täytyy ensin osoittaa jokin vajavaisuus, vika tai epätäydellisyys
- Teorian kyseenalaistaminen osoittamatta selkeästi teorian epätäydellisyyttä, on tieteellisesti epäpätevää
- Esimerkiksi argumentti, että jokin teorian osa tai kokonaisuus *tuntuu* epäloogiselta, ei ole millään tavoin hyväksyttävä
- *Hypoteesista tulee teoria vasta, kun se pystytään todistamaan kokeellisesti*

Tulosten tarkastelu: kvalitatiivinen vs. kvantitatiivinen

Kvalitatiivinen tarkastelu:

- Miksi jokin ilmiö tapahtuu?

Kvantitatiivinen tarkastelu

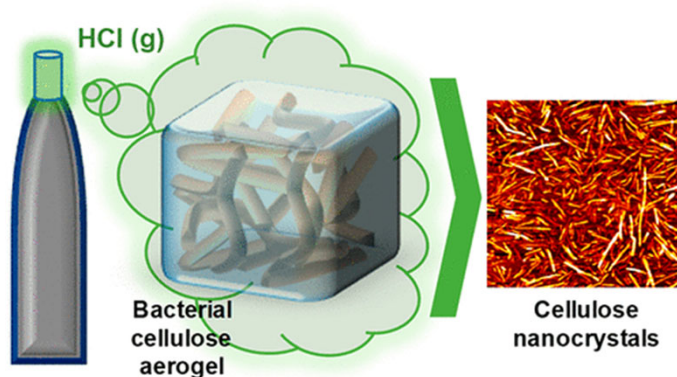
- Miten jokin ilmiö voidaan täsmällisesti (matemaattisesti) selittää?
- Usein pelkkä kvalitatiivinen tutkimus voidaan tulkita “käsien heilutteluksi”
- Hyppäys kvalitatiivisesta kvantitatiiviseen saattaa tuntua valtavalta haasteelta
- Pelkällä kvalitatiivisella tutkimuksella on paikkansa ja meriittinsä
- Kvantitatiivisessa tutkimuksessa virhetarkastelu on *välttämätöntä*

Tulosten raportointi

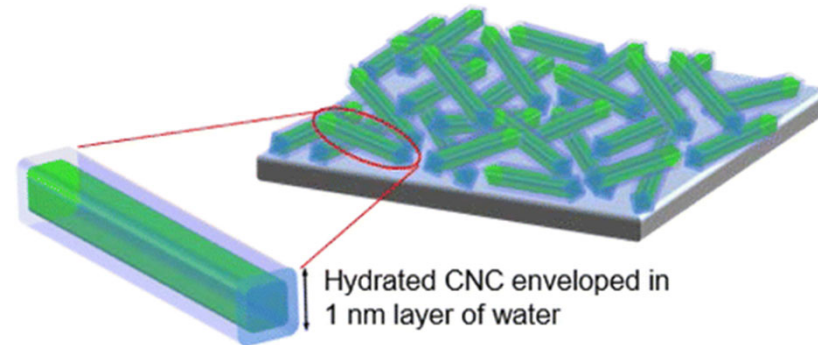
- Kuvat ovat erityisen tärkeitä: kuvaajat, mikroskooppikuvat, skemaattiset kuvat jne.
- Usein tieteellisen julkaisun tulososa on kuviin tukeutuva kertomus
- Nykyisin yleensä tulosten raportointi ja niistä keskustelu on yhdistetty samaan osioon (Results and Discussion)
- Tuloksista keskustellessa on tärkeitä verrata tuloksia aiemmin julkaistuun tuloksiin, myös kvantitatiivisesti
- Keskustelun perusteella voidaan piirtää uusia kuvia, joilla selkeytetään havaintoja ja johtopäätöksiä (skemaattisia kuvia ja myös kuvaajia)

Koko artikkelia kuvaava skematiikka

- Nykyisin artikkelin pääasiallisesta tuloksesta kuuluu piirtää skemaattinen kuva, ns. Table of Contents Graphics (tai Graphical Abstract)



Artikkelin otsikko:
Sustainable High Yield Route to
Cellulose Nanocrystals from
Bacterial Cellulose



Artikkelin otsikko:
Water Vapor Uptake of Ultrathin Films of
Biologically Derived Nanocrystals: Quantitative
Assessment with Quartz Crystal Microbalance
and Spectroscopic Ellipsometry

Supporting Information

- Nykyisin saatetaan sisällyttää suuri määrä tuloksia ns. Supporting Information osioon, joka ei kuulu ns. pääartikkeliin vaan on ainoastaan saatavilla netissä
- Nämä tulokset eivät ole oleellisia artikkelin yleisen viestin ymmärtämiseen, mutta ne saattavat kiinnostaa pienempää (erikoistuneempaa) yleisöä
- Supporting Infoissa oleviin tuloksiin pitää aina viitata pääartikkelissa ymmärrettävästi
- Supporting Info saattaa sisältää esim. todistusten kannalta hyvin oleellisia tuloksia tai tietoa, mutta jos todistuksen pystyy vain lyhyesti toteamaan pääartikkelissa, sen voi hyvin sisällyttää vain Supporting Infoon
- Nykyisin monissa lyhyen formaatin julkaisuissa myös Materials and Methods on sisällytetty miltei kokonaan Supporting Infoon
- Yksi tärkeistä tieteellisen julkaisemisen käytännöistä on valinta, mitä tulee pääartikkeliin ja mitä laitetaan Supporting Infoon

Viittauskäytännöt

- Viittaaminen on erityisen tärkeää johdannossa ja tulososassa

Johdanto:

- Viitteet luovat todistusaineiston johdannossa kuvatulle viitekehykselle ja taustoitukselle

Tulososa (Results and Discussion):

- Viitteet ovat vertailukohta omille tuloksille ja johtopäätöksille

Viittaaminen johdannossa

- Viitteiden valitseminen ja keskinäiset suhteet ovat tärkeitä
- Viitteitä ei saa olla liian vähän mutta ei missään nimessä liikakaan
- Eriävät mielipiteet, näkemykset ja tulkinnat tulee rakentavasti ja selkeästi tuoda esiin johdannossa
- Jos artikkelin pääasiallinen johtopäätös on ristiriidassa jonkin koulukunnan näkemyksen kanssa, sitä ei saa tahallaan jättää pois johdannosta
- Henkilökohtaiset syyt ja kilpailuasetelmat eivät saa vaikuttaa viitteiden valinnan tasapuolisuuteen
- Pääasiallinen kriteeri viitteen valinnalle on, että se on tavalla tai toisella relevantti

Viittaaminen johdannossa

Esimerkki:

“Method xxxx has extensively been used in the characterization of material yyyy.”

- Jos sekä metodi että materiaali ovat tunnettuja, viitteitä löytyy satoja, ehkä tuhansia; kaikkiin ei tarvitse eikä pidä viitata
- Yleensä tällaisen lauseen jälkeen 1-3 viittausta riittää, mieluiten kattaviin review-artikkeleihin

Viittaaminen johdannossa

Esimerkki:

“YYY is known to exhibit distinct behaviour under water, toluene, hexane, formaldehyde, and ethanol.”

- Tässä tapauksessa jokaisen liuottimen jälkeen pitää lisätä täsmällinen viite sellaiseen julkaisuun (tai pariinkin julkaisuun), jossa asiaa on tutkittu

Viittaaminen tulososassa

- Hyvän keskustelun (discussion) ehdoton perusedellytys on viitteisiin perustuva tulosten vertailu
- Täsmällisyys ja tasapuolisuus on tärkeää
- Tulotarvoja on tärkeää vertailla kvantitatiivisesti viitteisiin
- Jos kvantitatiivista vertailua on paljon, viitteiden perusteella voi koota taulukoita tai jopa piirtää kuvaajia

Yleishuomioita viittauksista

- Viitteet pitää myös lukea: on suuri houkutus viitata tutkimukseen samalla tavoin kuin joku muu on aiemmin viitannut – joskus kuitenkin viittaukset voivat olla virheellisiä (esim. kirjoittaja on ymmärtänyt viittessä esitetyn asian väärin)
- Alkuperäisiä viitteitä on usein hyvä käyttää; relevanssi ja täsmällisyys ovat kuitenkin avainsanoja
- Akateemiseen yleissivistykseen kuuluvat faktat ja ilmiöt eivät vaadi viittauksia; esimerkiksi termodynamiikan toisesta pääsäännöstä puhuttaessa ei tarvitse viitata Clausiukseen eikä nesteen tilavuuden syrjäyttämässä Arkimedekseen – ellei spesifisesti haasta näitä teorioita

Vilppi

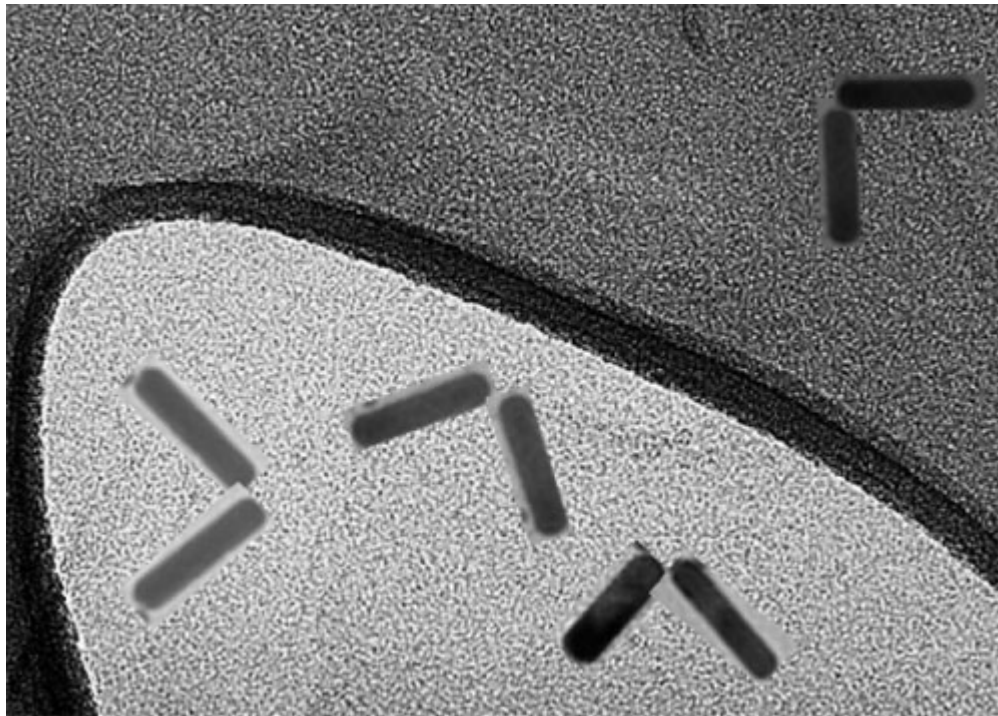
Tulosten vääristely

- Pahimmassa tapauksessa tuloksia vääristellään, ja tuloksia on jopa kokonaisuudessaan saatettu keksiä, esimerkiksi kuvaajia piirretty täysin keksityistä arvoista
- Kuuluisin tapaus viime ajoilta on Jan Hendrik Schön (Bell Laboratories)*
- Kun vilppi paljastui, lehdet vetivät pois melkein kaikki Schönin julkaisut (mukana 8 Science ja 7 Nature julkaisua), ja hänen tohtorinarvonsa peruttiin

*) http://www.science20.com/science_20/jan_hendrik_sch%C3%B6n_world_class_physics_fraud_gets_last_laugh_whole_book_about_himself

Tulosten vääristely

Älä mielellään edes yritä tällaista:



“Nanochopsticks” julkaisun kirjoittajat väittivät, että pystyvät tuomaan kaksi kultananokeppiä päistä yhteen ja säätelemään niiden välistä kulmaa.

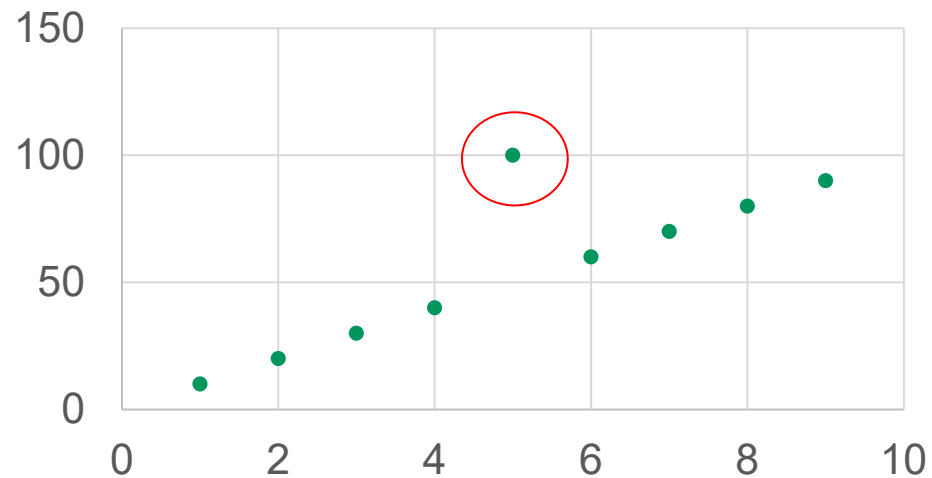
Tulosten vääristely

Tämä on aito esimerkki julkaistusta tieteellisestä julkaisusta (tosin Supporting Information osuudessa)

Emma, please insert NMR data here! where are they? and for this compound, just make up an elemental analysis...

Pt(II)((*M,S_S,S_S*)-*p*-tolyl-binaso)(acac)(BF₄)₂ (154): A vial was charged with 100 mg (0.126 mmol) **5a** and 24 mg (0.126 mmol) AgBF₄. 2 mL CH₂Cl₂ was added, the vial was

Tulosten kaunistelu



- Jos ympyröidyn pisteen jättää kuvaajaasta pois, se on tulosten kaunistelua
- Piste voidaan jättää pois, jos ollaan varmoja, että kyse on kokeellisesta virheestä, esimerkiksi tekemällä 10 toistoa, jotka kaikki antavat kuvaajaan sopivan tuloksen

Plagiointi

- Muiden tulosten kopiointi on plagiointi
- Muiden tulkintojen uudelleen esittäminen ilman niihin viittaamista on plagiointi
- Muiden tekstin kopiointi on plagiointi ellei kyse ole siitatista, jotka ovat tieteellisessä tekstissä hyvin harvinaisia – muista aina kertoa asiat omin sanoin ja oman ymmärryksesi mukaan
- Muiden kuvien kopiointi (“leikkaa-liimaa”) on plagiointi, ellei siihen ole asianmukaista viitettä
 - Opinnäytetöissä viite kuvatekstissä riittää
 - Tieteellisissä julkaisuissa tulee pyytää lupa julkaisutaloilta (tekijänoikeuden suoja) – julkaisuissa muiden kuvien suora käyttäminen onkin harvinaista muutoin paitsi review-artikkeleissa

Itsensä plagiointi

- Myös omien tulosten, tekstin tai kuvien uudelleen käyttäminen ilman asianmukaista viittausta on plagiointia
- Itseplagiointi (self-plagiarism) on avian yhtä tuomittavaa kuin “tavallinen” plagiointi
- Itsensä plagiointi on tiedeyhteisössä yleisempää kuin muiden suora plagiointi

Yhteenveto

- Tieteellinen käytäntö on läsnä kaikissa tutkimuksen osa-alueissa: ideoinnissa, kokeiden suunnittelussa ja toteutuksessa sekä tutkimuksen julkaisemisessa
- Tutkimuksen julkaisu tieteellisten julkaisujen muodossa on hyvin tärkeä osa itse tutkimusta
- Tutkimusta ei ole olemassa ellei sitä ole julkaistu vertaisarvioituissa lehdissä
- Tutkijan eettiseen vastuuseen kuuluu omien tulosten lisäksi myös eri näkemysten tasapuolinen esittäminen ja viittaaminen
- Vilppi on aina tuomittavaa: sitä voi esiintyä tulosten vääristelynä, kaunisteluna tai esimerkiksi tekstin, tulosten tai kuvien plagiointina