

УДК 16.168

Теоретические схемы в прикладных исследованиях

В.С. Федоров¹

¹ Московский физико-технический институт (государственный университет)

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 14-03-00687.

Вводится понятие о теоретической схеме (англ. *theoretical framework*, дословно «теоретический каркас»), как методологической новации, оказавшей влияние на структуру прикладных исследований. Теоретическая схема – это особый, составной, вид моделей, используемых для описания и объяснения сложных явлений, изучаемых в прикладных исследованиях. Теоретическая схема – это некоторая система подмоделей, каждая из которых может иметь свою онтологию.

Рассмотрим один из примеров создания такой схемы - исследование турбулентных течений в водопроводах, проведенное Прандтлем. Он «проводит эксперимент, в котором паттерны потока жидкости у твердых объектов стали видимы. <...> он концептуально поделил ее на два региона и причинно-следственно объяснил поведение жидкости в каждом регионе». [1] Первый слой выделен около твердой поверхности, в котором градиент скорости перпендикулярный поверхности, настолько велик, что даже при малых значениях скорости вязкостью нельзя пренебречь и жидкость рассматривается как турбулентная. Во втором слое, где градиент скорости не такой большой, влиянием вязкости можно пренебречь и жидкость рассматривается как идеальная.

«Следующим важным шагом в методе Прандтля было связывание причинно-следственного объяснения и наблюдаемого феномена (линий потока жидкости) в теоретическую схему (*theoretical framework*) <...>» [1] для того, чтобы было возможно описывать жидкость в реальных задачах гидродинамики. Она хоть и использует существующую гидродинамику, но оперирует специфическим представлением о «слоях жидкости» для описания сложных течений. Это представление не относится напрямую ни к теоретической гидродинамике, где турбулентные жидкости вообще не рассматриваются, ни к гидравлике, где моделей для описания жидкости не строится вообще.

Разбиение объекта-жидкости на различные подобъекты-слои, каждый из которых описывается с помощью разных модельных и математических средств, оказалось мощным

и гибким средством. Эта гибкость приводит к тому, что теоретические схемы, появляющиеся в результате единичного прикладного исследования, могут оказаться мощным познавательным средством.

Эта гибкость приводит к тому, что теоретические схемы, появляющиеся в результате единичного прикладного исследования, могут оказаться мощным познавательным средством. Так, «Прандтлю удалось применить метод разделения физической системы на отдельные физические регионы и потом адаптировать его для других задач [гидродинамики] <...>» [1], преодолев затруднения возникающие, как у слишком общей классической гидродинамики, так и у нацеленной на узкий круг конкретных задач инженерной гидравлики.

Теоретическая схема, очищенная от конкретного содержания, может быть, как отдельно исследована, так и применена для других задач (уже с другим содержанием кадров в рамках). Так, если технические науки XIX века (типа гидравлики) позволяли описывать существующие конструкции, то применение теоретических схем позволяло исследовать целые классы возможных конструкций.

Гипотетически, в середине XX века отдельные прикладные исследования, предлагающие успешные теоретические схемы, стали выливаться в отдельные науки. Эти науки абстрагируются от теоретической схемы конкретного явления. Они нацелены на создание, исследование, совершенствование, обобщение и применение целого класса теоретических схем определенного вида.

К таким наукам относятся, например, химическая технология или информатика. Основные типы теоретических схемы, определяющие специфику этих наук рассмотрены далее.

Химическая технология возникла как инженерная дисциплина, посвященная построению целостного производства из последовательности взаимосвязанных реакторов, в каждом из которых происходит элементарная реакция.

Однако, в середине XX века химическая технология стала рассматривать сложные многоступенчатые и каталитические реакции, сопровождающиеся явлениями переноса энергии и вещества, происходящие внутри одного реактора. В связи с этим стали рассматривать оригинальные задачи, например, о явлениях переноса между фазами вещества, решений для которых не существовало в рамках существующей химии и физики.

Это привело к тому, что химическая технология стала оформляться как отдельная прикладная наука о процессах, возникающих внутри химического реактора. Инженерия химических производств сохранилась, как одно из направлений химической технологии, но находится вне центра ее внимания [2].

В химической технологии существуют модели разных уровней, организованных в иерархию в соответствии с их масштабом. Конкретные теоретические схемы (frameworks) химической технологии, называемые «математической моделью реактора», строятся из совокупности моделей (кадров) разного масштаба.

Модель химической реакции описывает реакцию в молекулярном масштабе. Считается, что «ее свойства <...> не зависят от масштаба реакции». [13] Следующим уровнем является кинетическая модель химической реакции – зависимость скорости реакции от условий .

Основным для химической технологии уровнем в иерархии моделей является модель химического процесса. «Химический процесс – система взаимосвязанных явлений <...> В химическом процессе происходит химическая реакция и явления переноса между фазами, обеспечивающие перемещение реагентов к месту их взаимодействия...» [13]. Далее, «полученная модель химического процесса <...> входит в следующий масштабный уровень – реакцию зону, в которую входят и структурные закономерности потока, и явления переноса в ее масштабе. И наконец, в масштабе реактора в составляющие процесса входят реакция зона, узлы смешения, теплообмена и др.» [13]. Для каждого типа процессов существуют собственные физико-химические аналитические модели, математические соотношения, связывающие характеристики протекающего процесса . Химический процесс выделяют таким образом, что он не зависит от масштаба. Таким образом эффекты, возникающие в связи с размером реактора можно начинать учитывать лишь на следующих ступенях иерархии моделей процессов.

Для конкретного процесса и реактора, например, каталитического крекинга нефти для получения бензина, строится своя конкретная теоретическая схема – математическая модель реактора, представляющая собой иерархию взаимосвязанных моделей (кадров в схеме).

Математическим моделированием реактора называют весь цикл исследования в химической технологии. В его начале исследователь имеет потенциальное химическое

превращение, а в результате должен получить математическую модель (включающую в себя модели всех уровней, описанных выше), исследовать ее, интерпретировать ее характеристики.

Если в химической технологии представлен лишь один вид теоретических схем, то в другой науке, работающей с теоретическими схемами, а именно информатике, существует несколько разнообразных видов схем (получивших в специальной литературе названия «стилей» или «парадигм»).

Литература

1. *Boon M. [et al.] How Science Is Applied In Technology // International Studies in Philosophy of Science – 2006. - V. 20, №1 - PP. 27-48.*
2. О кафедре химической технологии. Химический факультет МГУ и его кафедры.
<http://www.chem.msu.su/rus/teaching/zorkii/17%28safonov%29.html>
3. Бесков В.С. *Общая Химическая Технология*. М.: Академкнига, 2005, 452 с.