

ОБ ИСТОРИИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-СТАТИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Т.В. Ляшенко (Одесса)

В строительном материаловедении эксперимент, главный источник информации, как правило, ресурсоемкий (по материальным затратам, по протяженности во времени процессов структурообразования и деструкции). Вероятно, это одна из причин того, что в этой области исследований сформировалась и широко применяется методология Экспериментально-Статистического Моделирования. Термин появился в написанной В.А. Вознесенским блестящей (по глубине, новизне, масштабу обобщения и конкретизации условий и задач, тонкости методического инструментария) первой главе книги [1]¹.

Глава называется «Системный подход, эксперимент и моделирование – триединая основа оптимизации рецептурно-технологических решений». В ней сформулированы аспекты, принципиально важные для развития материаловедения и прогрессивных технологий, положение о необходимости и принципы решения оптимизационных задач. Показана взаимосвязь между основными подсистемами технологии композиционных материалов, рассматриваемой как сложная стохастическая система [2-4]. Названы и проанализированы 7 связанных с моделированием рисков аналогии. Определены основные пункты стратегии и приведена циклическая схема анализа и оптимизации композиционных материалов (конкретизируя общие положения, сформулированные в [4] и ранее). Приведены постановки и решения 17 задач, «решаемых по одной модели».

ЭС-моделирование, ЭСМ – это совокупность представлений, методов и алгоритмов, которая *связывает* математическое планирование эксперимента, регрессионный анализ и другие средства прикладной статистики с содержательным анализом моделей и *направлена* на наиболее полное извлечение из опытных данных информации об исследуемом объекте (системе) [1, 5-9]. Этот комплекс средств исследования² включает четыре основных блока взаимосвязанных действий.

1. Определение, обоснованный выбор условий эксперимента, его «предпланирование» [4, 11-12], «метризация» [13]. Отбор (на основе системного подхода) варьируемых в эксперименте факторов (управляемых входов, уровни которых могут быть назначены, зафиксированы) и измеряемых критериев (выходов, откликов, свойств объекта), а также определение диапазонов варьирования проводятся с учетом физико-химических, технологических и других априорных по отношению к данному эксперименту знаний. Все это согласуется с его методическими и метрологическими особенностями, инструментальными возможностями исследования объекта.

2. Планирование оптимального многофакторного эксперимента [1, 4, 6, 11, 14-18]. Учитываются структура вектора факторов, рациональная для данной задачи форма регрессионной модели, заранее заданные «технологом» обязательные опыты (при определенных сочетаниях уровней факторов) и «запрещенные» зоны факторной области [1, 5-7, 19-23].

3. Построение по опытным данным регрессионных моделей, очищенных от статистически незначимых эффектов и признаваемых адекватными результатам эксперимента (при принятом риске или уровне погрешности); в ряде ситуаций допустимо использовать алгоритм «с генерируемой ошибкой эксперимента» [8, 24-25].

¹ Возможно, термин встречается и в более ранних работах В.А. Вознесенского. В главе VI той же книги [1] описан 1-ый вариант известной системы COMPEX, реализованный в виде комплекса разработанных Т.В. Ляшенко программ (ДОС ЕС, Фортран).

² Часть из них соответствуют известной в США «Методологии поверхности отклика» [10].

4. Решение научных и технологических задач по каждой отдельной ЭС-модели и их комплексу [1, 5-6, 8], с помощью специальных средств визуализации («квазиодно-факторных» кривых, диаграмм «квадраты на квадрате», «треугольники на квадрате» и т.д.). Это задачи анализа, интерпретации, оптимизации; более 20 из них – типовые: определение допустимых и оптимальных решений, минимизация ресурсов, оценка роли факторов, оценка доверительных интервалов для инженерных рекомендаций и др.

Введенное в книге [1] понятие рассмотрено с философской точки зрения в работах [26-27] и вошло как одно из основополагающих в учебник [6]. Необходимость экспериментальной базы для перехода от теоретических представлений к конкретным композиционным материалам и их многокомпонентность делают ЭС-модели **незаменимым инструментом** при их разработке. Корректное ЭС-моделирование **обеспечивает** [5]: а) минимизацию интеллектуальных, временных и материальных ресурсов **при поиске** требуемого инженерного решения в сложной технологической ситуации; повышение достоверности и информативности экспериментальных исследований; б) улучшение качества и **конкурентоспособности продукта**, ресурсосбережение при обеспечении многокритериальных требований к качеству.

Идеологическое и методическое ядро ЭС-моделирования – **планирование эксперимента (ПЭ)**, теоретической основой которого является математическая теория эксперимента (МТЭ). Идея планировать многофакторный эксперимент, для агробиологических опытов, принадлежит Р. Фишеру (конец 1920-х, монография – 1935, [28]). Для химико-технологических и физико-технических исследований методика моделирования на основе математической статистики и других разделов математики впервые была изложена в 1951 г. (G. Vox, K. Wilson [29]). В последующее двадцатилетие Дж. Бокс и его сотрудники в Принстонском и Висконсинском университетах, хорошо понимая проблемы экспериментаторов, разработали варианты ПЭ в зависимости от изученности объекта, постановки задачи, характера факторов, метрологических возможностей, что нашло отражение в фундаментальной работе [30].

В СССР идеологом и организатором широкого применения ПЭ практически во всех областях науки и техники, а также развития МТЭ был Василий Васильевич Налимов [31-34], создавший в 60-70 годах плодотворную научную школу, в которую неформально входили группы из МГУ им. Ломоносова, Совета по кибернетике АН СССР, Гиредмета, МЭИ и др. Участники этого «незримого коллектива» за первое десятилетие подготовили



Учебно-методический семинар по ПЭ в Чирчике (апрель 1969), слева Т.И. Голикова, в центре Е.В. Маркова, В.В. Налимов, справа Ю.В. Грановский, В.А. Вознесенский

ряд книг методического характера (Ю.П. Адлер [35], В.А. Вознесенский [2, 15], Ю.П. Адлер, Е.В. Маркова, Ю.В. Грановский [11]), оказавшихся привлекательными для экспериментаторов из разных областей знаний. В это же время появляются фундаментальные работы [16, 36-37], представляющие новые результаты (по сравнению с американскими публикациями). Следует отме-

тить, что в книге [2] (1969) уже нашел отражение принцип управления качеством «до производства», которому соответствует концепция G. Taguchi (*Off-Line Quality Control*, [38-40]); этот принцип аргументирован [4] разницей на порядки в стоимости исправления ошибок на предпроектной и производственной стадиях создания продукта.

В последующее до 1991 г. время МТЭ и ПЭ в СССР интенсивно развивались. Были изданы десятки книг теоретического, прикладного и отраслевого характера, в частности, посвященные исследованиям смесевых систем [41-43]. В программы вузов разных профилей были включены специальные курсы, изданы учебные пособия. Среди них важную роль в экспериментальных науках сыграли два издания книги С.Л. Ахназаровой и В.В. Кафарова [44-45], а в прикладной математике – С.М. Ермакова и А.А. Жиглявского [46]. Глава III, «Элементы математической теории эксперимента», занимает половину объема учебника [6] для студентов специальности «*Производство строительных изделий и конструкций*»! В сотрудничестве с советскими коллегами разные аспекты МТЭ развивали И. Вучков в Болгарии [47-49], К. Hartmann в ГДР [50] и др. Прошло 10 Всесоюзных конференций по планированию и автоматизации эксперимента в Москве (и много других конференций, школ, семинаров). Для НИИ и заводских лабораторий были выпущены многочисленные отраслевые рекомендации, вышел ГОСТ 24026-80 «Исследовательские испытания. Планирование эксперимента. Термины и определения». Тиражом 6200 экземпляров издан каталог планов [51], объемом более 700 с. Интенсивно применялось ПЭ в диссертационных работах, поднимая эмпирические исследования на качественно новый, более высокий уровень.

В последние годы ПЭ оказалось широко востребованным в развитых странах, особенно в США, в силу необходимости создавать в рекордное время, в компьютеризированной среде, конкурентоспособные продукты (обеспечивая для этого качество, закладывая его в проект продукта – *Built-in-Quality, BiQ*) [52]. Это стимулирует разработку стратегий исследований (*Strategy of Experiments, SoE*), общих подходов и специальных планов, издание монографий [10, 53-54], обсуждение на многочисленных конференциях (ежегодных *Joint Statistical Meetings, Fall Technical* и *Applied Statistics in Industry Conferences* и др.), дорогостоящие обучающие курсы и вебинары. Большинство программных систем по статистике (*Statgraphics, Statistica* и др.) включают мощные подсистемы по DOE (*Design of Experiments*); специализированная система *Design-Expert Software* позволяет выбрать для реализации практически все известные подходы и возможности ПЭ.

Начало применения ПЭ в исследованиях строительных материалов (с 1964 г.) отмечено статьями, посвященными: мелкозернистым бетонам [55] и полимеросодержащим композитам (В.А. Вознесенский*, Кишиневский ПИ), трехфракционным смесям щебня (И.Г. Зедгенидзе, ГрузПИ), режимам обогащения заполнителей (А.С. Ильин, ВНИИЖелезобетон), жаростойким и теплоизоляционным материалам (Ю.М. Климов, УралНИИСтромпроект), стекловолокну (М.С. Асланова, НИИстекловолокно), легким заполнителям (А.Е. Рохваргер, ВНИИСтром), обжигу клинкера (З.Б. Энтин, НИИцемент). Для координации растущего числа исследований с применением ПЭ в 1968 г. Минпромстройматериалов СССР создало научный совет (его возглавил В.В. Налимов). Сформировались группы в Москве (НИИЖБ – Э.Г. Соркин, МИСИ – А.П. Меркин, НИИстекло – В.Е. Маневич, НИИасбестоцемент – Э.О. Долинская), в Ленинграде (ЛТИ им.Ленсовета – М.М. Сычев), в Тольятти (ВНИИНеруд – Э.М. Менчер), в Братскгэстрострое (Гершанович Г.Л.), а также в вузах Харькова (под руководством О.П. Мchedлова-Петросяна защитили диссертации А.М. Питерский, В.И.Шеин и др.), Днепропетровска (В.Г. Зазимко, Б.В. Гусев), Ровно (Л.И. Дворкин), Одессы

* Здесь и далее названы первые соавторы работ.

(Э.Н. Репьев). Кроме общеметодических книг [2, 15] вышли в свет работы, связанные с исследованиями бетона [56-57], пористых заполнителей и керамики [58]. В 1975 г. в Одессе (при участии более 150 докторов и кандидатов наук) прошла Всесоюзная конференция по применению математического моделирования в строительстве и технологии стройматериалов, которая фактически завершала первый этап «экспансии» ПЭ в эти области науки и техники.

К этому времени стала проявляться дискредитирующая планирование эксперимента ограниченность результатов исследований, в которых ПЭ проводилось без выполнения всех четырех составляющих ЭС-моделирования. Анализ априорной информации не был связан с планируемым экспериментом, отсутствовало его методическое и метрологическое обоснование. Формы модели выбирались без учета цели исследования (много ошибок было сделано из-за использования удобных для ручных расчетов линейных моделей и моделей со смешанными эффектами взаимодействия). Проявились последствия формального применения ПЭ: только расчета моделей, без какой-либо интерпретации; формального поиска оптимума, без анализа конкретных путей оптимизации; интерпретации линейной части модели, пренебрегая именно той частью, где заложены возможности нетривиальных решений [59]. Яркий пример более полного извлечения информации из экспериментальных данных, по модели, показан в [3], где к 6 выводам, опубликованным в одной из статей, добавлено еще 7, полученных по 27 из 427 приведенных в ней результатов.

Планирование эксперимента вошло в практику исследований строительных материалов в Болгарии (Н. Баровски, В. Велев, Я. Иванов, И. Николов – во многом, благодаря работе там и циклам лекций В.А. Вознесенского), в Польше (L. Czamecki, Z. Piasta).

Среди важных шагов к ЭС-моделированию следует отметить: типовые технические задания по ПЭ, а также бланки априорной информации о факторах и выходах [4]; преобразования факторов и выходов при неравных интервалах варьирования и моделировании вероятностных показателей, принимающих значения от 0 до 1 [4, 60]; модели «смеси, технология – свойство» [5, 21, 61], для которых по специальным алгоритмам [1, 5, 20, 62] синтезировались оптимальные планы; применение в десятках исследований отражающей их логику и структуру циклической схемы [1, 4] – анализа и оптимизации композиционных материалов на основе ЭСМ. Накапливаемый опыт планирования эксперимента дополнялся работами, направленными на более полное извлечение из результатов моделирования содержательных знаний (материаловедческих, технологических...). Это привело в 80-х годах к формированию той ветви количественного анализа в строительном материаловедении, которая была названа [1] экспериментально-статистическим моделированием.

Полезные для методологии ЭС-моделирования результаты нашли отражение в нескольких версиях (с начала 80-х годов) программной системы COMPEX (созданной в ОИСИ – ОГАСА), а затем также в системе MIORIT (кафедра кибернетики химико-технологических процессов КПИ, Киев).

Наиболее полно экспериментально-статистическое моделирование как ветвь моделирования в материаловедении представлено в монографии «ЭВМ и оптимизация композиционных материалов» [5], изданной (1989) советско-болгарским коллективом*. Книга не только отразила достигнутый уровень возможностей ЭСМ в исследованиях и разработках строительных композитов, но и наметила качественный скачок этих возможностей – через включение ЭС-моделей (как моделей рецептурно-технологических полей) в компьютерное материаловедение [25, 63-65].

* За эту книгу авторы награждены премией Госкомобразования СССР (1990).

1. Современные методы оптимизации композиционных материалов / Под ред. В.А. Вознесенского. – К.: Будівельник, 1983. – 144 с. 2. Вознесенский В.А. Статистические решения в технологических задачах. – Кишинев: Картя молдовеняскэ, 1968. – 232 с. 3. Вознесенский В.А. Статистические решения в задачах анализа и оптимизации качества строительных материалов (методология и опыт применения): Автореф. дис. д-ра техн. наук: 05.23.05 / Моск. инж.-стр. ин-т. – М., 1970. – 44 с. 4. Вознесенский В.А. Статистические методы планирования эксперимента в технико-экономических исследованиях. – 2-ое изд. – М.: Финансы и статистика, 1981. – 263 с. 5. ЭВМ и оптимизация композиционных материалов / В.А. Вознесенский, Т.В. Ляшенко, Я. Иванов, И. Николов. – К.: Будівельник, 1989. – 240 с. 6. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Огарков Б.Л. Численные методы решения строительно-технологических задач на ЭВМ. – К.: Вища школа, 1989. – 328 с. 7. Voznesensky V.A., Lyashenko T.V. Experimental-statistical modeling in computational materials science // Proc. 3rd Int. Applied Statistics in Industry Conf., v. 1. – Wichita, KS (USA): ACG Press. – 1995. – P.287-298. 8. Методические рекомендации по применению экспериментально-статистических моделей для анализа и оптимизации состава, технологии и свойств композиционных материалов на основе щелочных вяжущих систем / Науч. ред. В.А. Вознесенский, П.В. Кривенко. – ОГАСА, НИИВМ им. В.Д. Глуховского. – К., 1996. – 105 с. 9. Voznesensky V., Lyashenko T. Experimental-statistical modelling in computational materials science. – Одесса: Астропринт, 1998. – 32 с. 10. Myers R.M., Montgomery D.C. Response Surface Methodology: Process and Product Optimization Using Designed Experiments. – 2nd ed. – John Wiley & Sons, 2002. – 814 p. 11. Адлер Ю.П., Маркова Е.В., Грановский Ю.В. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий. – М.: Наука. – 2-е изд., 1976. – 279 с. 12. Предпланирование эксперимента / Ю.П. Адлер. – М.: Знание, 1978. – С. 17-36. 13. Адлер Ю.П. Метризация // Повторение не-



повторимого. – М.: Стандарты и качество, 2007. – С. 47-60. 14. Налимов В.В., Чернова Н.А. Статистические методы планирования экстремальных экспериментов. – М.: Наука, 1965. – 340 с. 15. Вознесенский В.А. Статистические методы планирования эксперимента в технико-экономических исследованиях. – М.: Статистика, 1974. – 192 с. 16. Федоров В.В. Теория оптимального эксперимента. – М.: Наука, 1971. – 312 с. 17. Mitchell T.J. An Algorithm for the Construction of «D-optimal» Experimental

Designs // Technometrics, V. 16, 1974, N 2. – P. 203-210. 18. Таблицы планов эксперимента для факторных и полиномиальных моделей. Спр. изд. / под ред. Налимова В.В. – М.: Металлургия, 1982. – 752 с. 19. Ляшенко Т.В. Построение Д-оптимальных экспериментальных планов // Вопросы строительства. – Рига: Звайгзне, 1975. – Вып. 4. – С. 222-229. 20. Даниленко Е.Л., Ляшенко Т.В. Расчет точных оптимальных планов на выпуклых многогранниках. – Заводская лаборатория, 1979, Т. 45, №3. – С. 249-251. 21. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В. Особенности планирования эксперимента и решения инженерных задач в системах «смесь I, смесь II, технология – свойства». – Заводская лаборатория. – 1986. – Т. 52, №12. – С. 52-53. 22. Ляшенко Т.В. Опыт синтеза специальных планов при исследовании многокомпонентных систем // Математические методы планирования эксперимента: Тез. респ. конф. – Киев: РДНТП. – 1991. – С. 31. 23. Экспериментально-статистическое моделирование и оптимизация вероятностных показателей качества композиционных материалов / В.А. Вознесенский, С.В. Коваль, Т.В. Ляшенко, В.А. Феофанов. – К.: Общ-во “Знание” Украины, 1991. – 32 с. 24. Вознесенский В.А. Модели с генерированной ошибкой эксперимента для специальных критериев качества компози-

вознания. – К.: Изд-во КГУ. – 1988. – Вып. 66. – С. 120-126. **28.** Fisher R.A. The Design of Experiments. 6-th ed. – London, Oliver and Boyd, 1951*. **29.** Box G.E.P., Wilson K.G. On the experimental attainment of optimum conditions // J. of the Royal Statistical Society, B. – 1951. – V. 13. – P. 1-45. **30.** Box G.E.P., Hunter W.G., Hunter J.S. Statistics for Experimenters. – John Wiley & Sons, 1978. – 667 p. **31.** Налимов В.В. Статистические методы описания химических и металлургических процессов. – М.: Металлургия, 1963. – 59 с. **32.** Налимов В.В., Чернова Н.А. Статистические методы планирования экстремальных экспериментов. – М.: Наука, 1965. – 340 с. **33.** Налимов В.В. Теория эксперимента. М.: Наука, 1971. – 208 с. **34.** Налимов В.В., Голикова Т.И. Логические основания планирования эксперимента. М.: Металлургия. – 1-е изд., 1976. – 128 с. – 2-е изд., 1981. – 152 с. **35.** Адлер Ю.П. Введение в планирование эксперимента. – М.: Металлургия, 1969. – 155 с. **36.** Новые идеи в планировании эксперимента / Под ред. В.В. Налимова. – М.: Наука, 1969. – 336. **37.** Успенский А.Б., Федоров В.В. Вычислительные аспекты метода наименьших квадратов при анализе и планировании регрессионных экспериментов. – М.: изд-во МГУ, 1975. – 168 с. **38.** Kacker R.N. Off-line quality control, parameter design, and the Taguchi method // Journal of Quality Technology, 1985, V. 17, N4. – P. 176-188. **39.** Hunter J.S. Statistical design applied to product design // Journal of Quality Technology. – 1985. – V. 17, N4. – P. 210-221. **40.** Адлер Ю.П. Новое направление в статистическом контроле качества – методы Тагути // Качество и надежность изделий. – М.: Знание, 1988. – №2. – С. 3-25. **41.** Зедгенидзе И.Г. Планирование эксперимента для исследования многокомпонентных систем. – М.: Наука, 1976. – 390 с. **42.** Новик Ф.С., Арсов Я.Б. Оптимизация процессов технологии металлов методами планирования экспериментов. – М.: Машиностроение, София: Техника, 1980. – 304 с. **43.** Новик Ф.С. Планирование эксперимента на симплексе при изучении металлических систем. – М.: Металлургия, 1985. – 256 с. **44.** Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии. – М.: Высшая школа, 1978. – 319 с. **45.** Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Методы оптимизация эксперимента в химической технологии. 2-е изд. – М.: Высшая школа, 1985. – 327 с. **46.** Ермаков С.М., Жиглявский А.А. Математическая теория оптимального эксперимента. – М.: Наука, 1987. – 320с. **47.** Божанов Е.С., Вучков И.Н. Статистически методи за моделиране и оптимизиране на многофакторни обекти. – София: Техника, 1973. – 529 с. **48.** Вучков И.Н., Йончев Х.А. Планиране и анализ на эксперимента при изследване на свойствата на смеси и сплави. – София: Техника, 1979. – 356 с. **49.** Вучков И.Н., Стоянов С.К. Математическо моделиране и оптимизация на технологични обекти. – София: Техника, 1980. – 336 с. **50.** Хартман К., Лецкий Э., Шефер В. Планирование эксперимента в исследованиях технологических процессов. – М.: Мир, 1977. – 552 с. **51.** Таблицы планов эксперимента для факторных и полиномиальных моделей. Спр. изд. / под ред. Налимова В.В. – М.: Металлургия, 1982. – 752 с. **52.** Hann G., Hoerl R. Key Challenges for Statisticians in Business and Industry // Technometrics, 1998, V. 40, N 3. – P. 195-213. **53.** Cox D.R., Reid N. The Theory of the Design of the Experiments. – Chapman & Hall / CRC PRESS, 2000. – 336 p. **54.** Cornell J.A. Experiments with Mixtures: Designs, Models, and the Analysis of Mixture Data. 3rd ed. – John Wiley & Sons, 2002. – 670 p. **55.** Вознесенский В.А. Планирование эксперимента по технологии мелкозернистого бетона. – Заводская лаборатория. – 1964. – Т. 30, №3. – С. 337-339. **56.** Баженов Ю.М., Вознесенский В.А. Перспективы применения математических методов в технологии сборного железобетона. – М.: Стройиздат, 1974. – 192 с. **57.** Львовский Е.Н. Пассивный и активный эксперимент при исследовании механических характеристик бетона. – Кишинев: Картя молдовеняскэ, 1970. – 176 с. **58.** Рохваргер А.Е., Шевяков А.Ю. Математическое планирование научно-технических исследований (статистический подход). – М.: Наука, 1975. – 440 с. **59.** Вознесенский В.А., Ковальчук А.Ф. Принятие решений по статистическим моделям. – М.: Статистика, 1978. – 192 с. **60.** Математическая теория эксперимента и управление качеством композиционных материалов. – К.: Общ-во “Знание” Укр. ССР, 1979. – 27 с. **61.** Ляшенко Т.В. Оптимизация наполнителей полиэфирных связующих на основе моделей нового класса: Автореф. канд. техн. наук: 05.23.05. – Харьков, 1984. – 20 с. **62.** Ляшенко Т.В. Алгоритм и программа расчета точных оптимальных планов на выпуклых многогранниках // Методы математической теории эксперимента и ЭВМ в задачах разработки материалов. – М: ЦНИИэлектроника, сер. 6. – 1978. – Вып. 2 (115). – С.16-18. **63.** Вознесенский В.А. Компьютерное материаловедение и экспериментально-статистическое моделирование в задачах технологии древесных композиционных материалов // Древесина и композиционные материалы в строительстве: Сб. реф. междунар. симп. – Одесса, 1992. – С. 10-11. **64.** Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В. Экспериментально-статистическое моделирование и оптимизация в материаловедении. – К.: О-во “Знание” Украины, 1993. – 16 с. **65.** Вознесенский В.А. Компьютерное материаловедение, экспериментально-статистическое моделирование и оптимизация композиционных строительных материалов // Строительство в России: прогресс науки и техники. – М.: Инженерная академия РФ, 1993. – №1. – С. 98-101.

* Указана ссылка из книги [11].