УДК 001:1(063)+[016.3]

П.Н.ДЕВЯТКИН
Металлургический факультет, аспирант кафедры общей и физической химии

СОВРЕМЕННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ СТАТИСТИКА: МЕТОДОЛОГИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ

В настоящее время трудно представить себе науку существующей вне всякой связи с экспериментом. Само понятие эксперимента претерпело за последние десятилетия существенные изменения. Ранее суть эксперимента сводилась к изучению хорошо организованных систем. Однако в наше время получила развитие тенденция перехода от изучения хорошо организованных систем к плохо организованным, диффузным системам или к изучению задач с так называемой плохой структурой. Можно указать на два существенно различных подхода к изучению плохо организованных систем, четко проявившиеся за последние десятиления. Первый подход состоит в использовании идей и методов многомерной математической статистики, второй представляет собой чисто логический анализ процесса управления ими. Здест мы уже имеем дело с кибернетическим подходом. В настоящее время проблема исследования плохо организованных систем приобретает первоочередное значение ввиду того, что большинство реальных систем относится именно к этой категории систем. Более того, можно с уверенностью говорить о том, что методология однофакторного эксперимента не отвечает в подавляющем числе случаев современным реальным целям и задачам эксперимента. При изучении таких систем часто приходится оперировать сочетанием как кибернетического, так и статистического подходов с целью получения наиболее полных представлений о сущности и характере исследуемого процесса или системы.

At present time it is difficult to imagine since existing of outside of any connection with experiment. The conception of experiment has undergone considerable changes for the last decades. Earlier the essence of experiment was reduced to study well-organized systems. However, nowadays the tendency of turning from the study of well-organized systems to badly organized diffuse systems or to analysis problems with so-called poor structure have got development. It is possible to point out that two essentially different approaches to study of badly-organized systems, which have been exhibited distinctly for the last decades. The best approach consists in using some ideas and methods of multidimensional mathematical statistics, the second one is the only logical analysis of control. Here we already deal with a cybernetic approach. At present the problem of investigation of badly organized systems gains a primary significance in view the fact that the majority of actual systems concerns just this category of systems. Moreover, it can be said with confidence that the methodology of one-factor experiment doesn't meet modern actual targets and problems of experiment in most cases (in the majority of cases). When studying such systems we often have to operate the combination of both cybernetic and statistical approaches with the purposes of obtaining the fullest notions about nature and character of investigated process or system.

В настоящее время трудно представить себе науку существующей вне всякой связи с экспериментом. Само понятие эксперимента претерпело за последние десятилетия существенные изменения. Ранее суть эксперимента сводилась к изучению хорошо организованных систем, сейчас проявляется тенденция иного рода – стремление перейти к изучению плохо организованных – диффузных систем или к изучению задач с так называемой плохой структурой.

Со времен Ньютона и до начала XX в. точные науки стремились иметь дело с хорошо организованными системами, в кото-

рых можно было выделить явления или процессы одной физической природы, зависящие от небольшого числа переменных. Результаты исследований можно было представлять хорошо интерпретируемыми функциональными связями, которым приписывалась роль неких абсолютных законов. В течение более чем 200 лет экспериментаторы полагали, что единственно правильной является методология однофакторного эксперимента. Предполагалось, что исследователь может с любой степенью точности стабилизировать все независимые переменные (факторы) своей системы и поочередно варьируя некоторые из них, установить интересующие его зависимости. Лишь в начале XX в. математическая статистика стала делать первые шаги по изучению плохо организованных, диффузных систем, в которых четко выделить отдельные явления невозможно. В этих системах нельзя четко разграничить действие переменных различной физической природы. Такие системы иногда называют также большими системами, поскольку их исследование требует учета многих и разнородных факторов, определяющих различные по своей природе, но тесно взаимодействующие процессы. Почти любой технологический процесс может рассматриваться как пример такой плохо организованной системы. Известно, например, что в химико-технологических процессах одновременно надо учитывать такие не поддающиеся в реальных условиях разграничению процессы, как теплопередача, аэродинамические и гидродинамические процессы, а также кинетику множества одновременно протекающих реакций. Примером плохо организованной системы может служить и хорошо известный процесс эмиссионного спектрального анализа.

Можно указать на два существенно различных подхода к изучению плохо организованных систем, четко проявившиеся в последние десятилетия. Первый связан с использованием идей и методов многомерной математической статистики. Это направление начало развиваться в 20-30 гг. XX в.

Многомерная математическая статистика – это, по существу, хорошо логически обоснованная формализация эмпирических методов изучения диффузных систем, применяемых, когда исследователь сознательно хочет отказаться от детального, традиционного изучения механизма всех явлений, протекающих в системе. К задаче здесь можно подойти чисто эмпирически: найти оптимальные условия протекания процесса, варьируя одновременно возможное большее число переменных. Тогда возникнут проблемы выбора оптимальной стратегии эксперимента и обработки результатов наблюдений. Это типичные задачи математической статистики.

Второй подход к изучению диффузных систем – чисто логический анализ процесса управления ими. Здесь мы уже имеем дело с кибернетическим подходом, возникновение которого связано с именем Н.Винера. Естественно, что как только возникло представление о плохо организованных системах как самостоятельных структурах, подлежащих изучению, встал вопрос об исследовании процесса управления ими, ибо этот процесс является существенным элементом самого понятия диффузной системы. Кибернетический подход к задаче позволяет исследователю устанавливать функциональную связь между входными и выходными параметрами системы, абстрагируясь от сложных и плохо изученных физико-химических, гидродинамических и других явлений, происходящих в системе.

Оба эти подхода (статистический и кибернетический) существенно различны, хотя объект изучения один – плохо организованные системы. Нередко мы можем видеть, как одна и та же система изучается одновременно и совершенно независимо двумя методами.

Переход от изучения хорошо организованных систем к изучению диффузных систем повлиял и на общеметодологические концепции науки. Стали изменяться некоторые гносеологические представления, задающие понятие истинности и ложности в научных построениях и выводах. Здесь говорится о гносеологии не как о некоторой философской науке, а как о системе взглядов, которой пользуются научные работни-

ки в своей повседневной работе. Эта система, может быть, никогда четко не сформулированная, постепенно изменяется, часто малозаметным для людей одного поколения образом.

В связи с этим изменились требования, предъявляемые к математическому описанию наблюдаемых явлений. Понятие закона в науке заменяется более широким, хотя и довольно расплывчатым понятием модели. Иными стали и сама система построения научных выводов и представление о том, что допустимо и что недопустимо в науке. Этот процесс еще далеко не закончился – быть может, он только начался. Более того, пока рядом с учеными, занимающимися изучением плохо организованных систем, работают ученые традиционного направления, и таких ученых большинство.

Пользуясь методами современной математической статистики, можно найти формальное математическое описание процесса в условиях, когда теория этого процесса недостаточно известна, а описание его при помощи кинетических, термодинамических и гидродинамических уравнений невозможно. Эти задачи всегда решаются некоторым оптимальным для данной ситуации способом. Методологические приемы обычно обсуждаются с позиций их оптимальности.

Существенные затруднения для химических и металлургических систем часто возникают из-за того, что в малоизученном состоянии находятся процессы, связанные с анализом химического состава вещества и измерением его физических характеристик. В ряде случаев приходится прекращать технологические эксперименты и переходить к изучению метрологических вопросов. Часто экспериментатор умеет измерять только физические характеристики вещества и имеет весьма смутное представление о том, как они связаны с технологическими параметрами вещества, по которым должен быть оптимизирован процесс и которые не представляется возможным измерять непосредственно при получении вещества. Большое беспокойство вызывает отсутствие четких экономических критериев оптимизации – в ряде случаев экспериментатор не может четко сформулировать цели исследования.

Следует отметить, что возможности математической статистики не ограничиваются обработкой результатов так называемых «пассивных экспериментов», при которых экспериментатор регистрирует переменные, спонтанно изменяющиеся в некотором фиксированном интервале, и затем методом наименьших квадратов находит коэффициенты регрессии. Такой подход к задаче только в редких случаях позволяет получить достаточную информацию о процессе.

В качестве примера плохо организованного процесса можно рассмотреть процесс пенной флотоэкстракции никеля из сточных вод с получением товарной продукции – никелевого купороса высших сортов, активно исследуемый в настоящее время на кафедре общей и физической химии в рамках диссертационной работы. Процесс носит крайне сложный характер, в нем одновременно меняется целый ряд технологических параметров и характеристик, более того, кинетика процесса мало изучена. Поэтому при изучении и исследовании данного процесса целесообразно исходить из основ методологии многофакторного эксперимента, применяя для его описания полуэмпирические зависимости, активно используя аппарат, предоставляемый математической статистикой, сочетая в разумных пределах и кибернетический и статистический подходы.

Таким образом, в настоящее время проблема исследования плохо организованных систем становится все более актуальной ввиду того, что большинство реальных систем относится именно к этой категории систем. Более того, можно с уверенностью сказать, что методология однофакторного эксперимента в подавляющем числе случаев не отвечает современным целям и задачам эксперимента.

Научный руководитель профессор, д.ф.н. *Б.Я.Пукшанский*