Министерство образования Российской Федерации

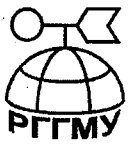
Российский Государственный Гидрометеорологический

Университет

Бекряев В. И.

ОСНОВЫ ТЕОРИИ ЭКСПЕРИМЕНТА

учебное пособие



Санкт-Петербург

2002

УДК 551.509.3; 519.24; 389.001

Уч. к. 1159

Бекряев В. И. Основы теории эксперимента.
Учебное пособие. – СПб.: Изд. РГГМУ, 2001 – 266 с.

Рассматриваются вопросы обработки и анализа результатов экспериментов, планирование экспериментов: законы распределения случайных величин, суммирование погрешностей, исключение промахов; сравнения средних и дисперсий; последовательный и дисперсионный анализы; корреляция между случайными величинами; аппроксимация зависимостей между случайными величинами – функции отклика; планирование экспериментов для нахождения функции отклика и дискриминантной функции.

Пособие адресовано студентам и аспирантам гидрометеорологических факультетов университетов. Может оказаться полезным инженерам и научным работникам, связанным с проведением экспериментов, обработкой и анализом экспериментальных данных.

Табл. 28. Рис. 35. Библ. 29.

Российский государственный гидрометеорологический институт
БИБЛИОТЕКА
195196, СПб, Малоохтинский пр., 98

© РГГМУ, 2002
© В. И. Бекряев

ПРЕДИСЛОВИЕ

Теория и эксперимент являются двумя неразрывными звеньями единой цепи познания окружающего нас мира. Не имеет смысла говорить о приоритете любого из них, но уместно отметить, что эксперимент поглощает львиную долю людских и материальных ресурсов, затрачиваемых человечеством на научные исследования. Современный научный эксперимент оказывается настолько сложным, трудоемким и дорогостоящим, что он сам стал предметом исследования. Родилось и стремительно развивается новое научное направление – теория эксперимента. Используя и умножая достижения математической статистики и кибернетики, эта теория дает исследователю четкие и логичные рекомендации по планированию и проведению экспериментов, анализу их результатов.

Математическая теория эксперимента обогатила практику концепциями многофакторности (одновременного исследования влияния большого числа факторов), рандомизации (случайного отбора), последовательного анализа, полного использования факторного пространства и др. Достижения математической теории эксперимента, представленные в виде пакетов прикладных программ для ЭВМ, стали доступны для экспериментаторов. Однако использование этих пакетов без достаточной подготовки, без понимания логических основ тех или иных методов не может быть эффективным.

Как учебная дисциплина, теория эксперимента не имеет устоявшихся границ. Содержание курса в зависимости от специальности изменяется от строго теоретического для математиков-профессионалов до утилитарно-прикладного для физиков экспериментаторов.

Для инженерных специальностей в технических вузах традиционно читаются курсы метрологии. Методы математической статистики успешно используются в них в частности в разделах, посвященных обработке результатов измерений и оцениванию погрешностей. Однако за пределами таких курсов остаются вопросы планирования экспериментов и оперативного анализа данных. Представляется более логичным все эти задачи рассматривать в одном курсе.

Настоящее учебное пособие представляет собой конспект лекций, которые автор в течение ряда лет читал студентам, специализирующимся по экспериментальной физике атмосферы. Пособие рассчитано на лиц, прослушавших базовый для технических университетов курс теории вероятности и математической статистики. Часто адресованная экспериментаторам учебная и техническая литература грешит рецептурностью: методы и процедуры решения задач излагаются без их теоретического обоснования. Там, где это не связано с проведением громоздких выкладок, мы старались дать необходимые пояснения. Отсюда – некоторые повторы в изложении.

1. ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ ИЗ МЕТРОЛОГИИ

Измерения являются основным источником объективной информации о свойствах объектов или явлений. Без измерений невозможно представить ни эффективное техническое производство, ни медицинское обслуживание, ни торговлю, ни обеспечение достойных бытовых условий. Стоимость измерений в современных наукоемких отраслях достигает 50 – 70 % от общих производственных затрат. Исключительную роль измерения играют в научных исследованиях. Еще Д. И. Менделеев утверждал, что любая наука начинается с измерения. Измерения являются важнейшей частью метеорологии как науки и гидрометеорологической службы как отрасли хозяйственной деятельности. Успешное прогнозирование погоды невозможно без надежной и полной информации о предшествующих и текущем состояниях полей метеорологических величин в региональном или даже планетарном масштабах.

Глобальный характер получения и использования метеорологической информации подтверждает необходимость единства измерений. Под *единством измерений* в метрологии понимают унификацию единиц, систему их воспроизведения и передачи рабочим средствам измерений, проведение измерений с погрешностью, не превышающей установленные пределы. Единство измерений обеспечивается деятельностью метрологических служб, которые разрабатывают государственные стандарты и другие нормативно-технические документы и контролируют их выполнение. Комплекс нормативной документации, направленной на достижение и поддержание единства измерений в стране, называется *государственной системой обеспечения единства измерений (ГСИ).* Основополагающими в системе ГСИ являются ГОСТ 16263-70 «ГСИ. Метрология. Термины и определения» и ГОСТ 8.417-81 «ГСИ. Единицы физических величин».

1. Измерения. Термины и определения

Представления о наиболее общих свойствах предметов и явлений в сознании человека складываются в понятия. Слова или словосочетания, отражающие понятия, называются *терминами.* Пояснение сути терминов с помощью распространенных слов и других терминов есть определение термина.

Законодательная метрология в уже названном ГОСТ 16263-70 приводит определения около трехсот различных терминов. Со времени принятия этого стандарта прошло более 30 лет. Некоторые из терминов или их определений устарели, не прижились или требуют уточнений. Тенденции развития терминологической базы отражены в словаре-справочнике «Основные термины в области метрологии». Подробное изучение и

сопоставление этих источников рекомендуется учащемуся для самостоятельной работы. Здесь мы ограничимся рассмотрением лишь основных терминов. Определения терминов, выделенные ниже курсивом, соответствуют формулировкам словаря-справочника.

Начнем с ключевого слова – «измерение».

Измерение физической величины есть совокупность операций по применению технического средства, хранящего единицу физической величины, заключающихся в сравнении (в явном или неявном виде) измеряемой величины с ее единицей с целью получения значения этой величины (или информации о ней) в форме, наиболее удобной для использования.

Громоздкость и тяжеловесность этого и ряда других определений оправдывается необходимостью формулировок, исключающих любые неточности, недоговоренности, возможности субъективных трактовок. Впрочем, оставим в стороне тему об изяществе стиля и обратимся к сути. Термин и его определение содержат в свою очередь четыре других термина: *физическая величина, единица физической величины, значение физической величины, технические средства измерений.* Приведем их определения.

Физическая величина – характеристика одного из свойств физического объекта (физической системы, явления или процесса), общая в качественном отношении многим физическим объектам, но в количественном отношении индивидуальная для каждого объекта.

Единица физической величины – физическая величина фиксированного размера, которой условно присвоено числовое значение, равное 1, и применяемая для количественного выражения однородных физических величин.

Значение физической величины – оценка размера физической величины в виде некоторого числа принятых для нее единиц.

Средство измерений – техническое средство (или их комплекс), предназначенное для измерений, имеющее нормированные метрологические характеристики, воспроизводящее и (или) хранящее единицу физической величины, размер которой принимается неизменным (в пределах установленной погрешности) в течение известного интервала времени.

В определении термина «измерение» раскрываются три аспекта понятия:

– *метрологический* (сравнение с единицей),

– *технический* (совокупность операций) и

– *гносеологический* (получение значения величины).

Как всякое сложное и емкое понятие, измерения классифицируются по различным признакам. В частности, по точности – *равноточные и неравноточные;* по числу измерений в ряду, серии – *однократные и многократные;* по характеру изменения измеряемой величины – *статические и динамические*; по метрологическому назначению

– *метрологические и технические*; по общим приемам получения результатов – *прямые, косвенные, совместные и совокупные.*

Понятие значения физической величины соответствует основному уравнению измерений

$$x = N[x], \tag{1.1}$$

где x – значение физической величины, $[x]$ ее размерность, N – числовое значение.

Стандарт предостерегает от неверного использования терминов.

1. Не следует вместо существительного «измерение» и соответствующего ему глагола «измерять» использовать бытовые однокоренные слова «мерить», «обмерить», «замерить», «промеры», «замеры» и др. Например, не следует писать и говорить: «выполнить промеры глубины ... », «замерить скорость потока», «мерить расстояние» и т. п. Во всех подобных случаях правильно использовать исходные термины «измерить», «измерения».

2. В метрологии термин «величина» является сокращенным вариантом словосочетания «физическая величина». В связи с этим слово «величина» не следует употреблять для выражения количественной стороны свойства. Не допускается писать «величина давления достигала ... », «максимальная величина скорости ветра составила ... », «измерение величины массы» и т.п., поскольку давление, скорость ветра, масса, температура – это уже величины. Следует говорить: «значение давления достигало ... », «значение максимальной скорости ветра составляло ... » и т. п. Метрология рекомендует в таких случаях использовать также выражения «размер величины» («размер длины», «размер мощности»), определяя термин *размер физической величины* как количественную определенность свойства, независящую от единицы измерения. Однако этот термин с трудом внедряется в лексикон измерителей.

Истинное значение – значение физической величины, которое идеальным образом отражало бы в качественном и количественном отношениях соответствующую физическую величину.

Действительное значение – значение физической величины, найденное экспериментальным путем и настолько близкое истинному значению, что для поставленной измерительной задачи может его заменить.

При метрологических измерениях действительные значения находят, используя образцовые средства измерения более высокого разряда. При технических измерениях в качестве действительного значения принимают среднее арифметическое многократных измерений $x_{\text{дейст.}} = \bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$, $i = \overline{1,n}$, n – число измерений. Значение $\bar{x}$ называют также *результатом измерений (или результатом многократных измерений)* в отличие от

результата отдельного (единичного) измерения x_i. (Практически измерения считаются уже многократными, если $n \geq 4$).

Таким образом, значение физической величины есть результат измерения (однократного или многократного). Поэтому неграмотно звучит выражение «измерение значения величины», например, неправильно писать «блок измерения значений мгновенной скорости ветра». Правильно – «блок измерения мгновенной скорости ветра».

Из всего многообразия средств измерений, используемых на практике и отраженных в ГОСТ'е, приведем здесь определения лишь родовых понятий.

Мера физической величины – средство измерений, предназначенное для воспроизведения и (или) хранения физической величины одного или нескольких заданных размеров, значения которых выражены в установленных единицах и известны с необходимой точностью.

Измерительный прибор – средство измерений, предназначенное для получения значений измеряемой физической величины в установленном диапазоне.

Измерительный преобразователь – техническое средство, служащее для преобразования измеряемой величины в другую величину или сигнал измерительной информации, удобный для обработки, хранения, дальнейших преобразований, индикации или передачи и имеющее нормированные метрологические характеристики.

Измерительная установка – совокупность функционально объединенных мер, измерительных приборов, измерительных преобразователей и других устройств, предназначенных для измерения одной или нескольких физических величин, и расположенная в одном месте.

Измерительная система – совокупность функционально объединенных мер, измерительных приборов, измерительных преобразователей, ЭВМ и других технических средств, размещенных в разных точках контролируемого пространства (среды, объекта и т. п.) с целью измерений одной или нескольких физических величин, свойственных этому пространству (объекту, среде и т. п.).

Измерительная информационная система – измерительная система, предназначенная для целей представления измерительной информации в виде, необходимом потребителю.

Отметим, что в словосочетании измерительно-информационная система на первом месте должно стоять слово измерительная, поскольку оно является главным компонентом метрологического термина.

Очень часто неточно и неряшливо используются термины «принцип», «метод» и «методика измерений». Метрология трактует их следующим образом.

Принцип измерений – физическое явление или эффект, положенные в основу измерений тем или иным типом средств измерений.

Метод измерений – прием или совокупность приемов сравнения измеряемой физической величины с ее единицей в соответствии с реализованным принципом измерений.

Методика выполнения измерений – установленная совокупность операций и правил при измерении, выполнение которых обеспечивает получение необходимых результатов измерений в соответствии с данным методом.

1.2. Система единиц

С 1982 года в нашей стране единственной и обязательной к использованию во всех отраслях производственной и научной деятельности является Международная система единиц СИ (System International - SI). Сокращенное название СИ следует читать как «эс-и». Ее содержание и применение регламентировано ГОСТ 8.417-81 «ГСИ. Единицы физических величин».

Достоинствами СИ являются:

– универсальность – охватывает все отрасли науки и техники;

– унификация единиц в различных отраслях и видах измерений, уменьшение их числа;

– когерентность — во всех уравнениях для образования производных единиц коэффициент пропорциональности равен 1;

– воспроизводимость единиц с высокой точностью;

– доступность изучения и простота использования.

Система единиц состоит из семи основных, двух дополнительных и неограниченного числа производных единиц, образуемых по уравнениям связи из основных и других производных единиц. Основные, дополнительные и 18 производных единиц имеют собственные наименования и краткие обозначения, международные и русские. Наименования, обозначения и определения основных и дополнительных единиц СИ представлены в табл. 1.1.

Таблица 1.1.

Основные и дополнительные единицы СИ

Величина		Единица			
Наименование	Размерность	Наименование	Обозначение		Определение
			Международное	русское	
Основные единицы					
Длина	L	Метр	M	м	Метр – есть длина пути, проходимого светом в вакууме за интервал времени 1/299 792 458 с.
Масса	M	Килограмм	Kg	кг	Килограмм есть единица массы, равная массе международного прототина килограмма.
Время	T	Секунда	S	с	Секунда есть время, равное 9 192 631 770 периодам излучения, соответствующего переходу между двумя сверхтонкими уровнями основного состояния атома цезия-133.
Сила электрического тока	I	Ампер	A	А	Ампер есть сила неизменяющегося тока, который при прохождении по двум параллельным прямолинейным проводникам бесконечной длины и ничтожно малой площади кругового поперечного сечения, расположенным в вакууме на расстоянии 1 м один от другого, вызвал бы на каждом участке проводника длиной 1 м силу взаимодействия, равную $2 \cdot 10^{-7} N$.
Термодинамическая температура	θ	Кельвин	K	К	Кельвин есть единица термодинамической температуры, равная 1/273,16 части термодинамической температуры тройной точки воды.

Величина		Единица			
Наименование	Размерность	Наименование	Обозначение		Определение
			Международное	русское	
Количество вещества	N	Моль	mol	моль	Моль есть количество вещества системы, еодержащей столько же структурных элементов, сколько содержится атомов в углероде-12 массой 0,012 кг. При применении моля структурные элементы должны быть специфицированы, и могут быть атомами, молекулами, ионами, электронами и другими частицами или специфицированными группами частиц.
Сила света	J	Кандела	cd	кд	Кандела есть сила света в заданном направлении источника, испускающего монохроматическое излучение частотой 540 10^{12} Hz, энергетическая сила света которого в этом направлении составляет 1/683 W/sr.
Дополнительные единицы					
Плоский угол		Радиан	rad	рад	Радиан есть угол между двумя радиусами окружности, длина дуги между которыми равна радиусу.
Телесный угол		Стерадиан	sr	ср	Стерадиан есть телесный угол с вершиной в центре сферы, вырезающий из новерхности сферы площадь, равную площади квадрата со етороной, равной радиусу сферы.

Производные единицы СИ образуются из основных, дополнительных и других производных единиц по уравнениям связи.

Например, зависимость между скоростью движения v, расстоянием l и временем t определяется уравнением $v = l/t$. Подставляя вместо l и t единицы длины и времени, получим единицу скорости $v = [l]/[t] = 1$ м/1 с = 1 м/с. Другой пример: давление P, сила F и площадь S, на которую действует сила, связаны уравнением $P = F/S$. Тогда единица давления находится как

$$[P] = [F]/[S] = 1 \text{ Н}/1 \text{ м}^2 = 1 \text{ Па}.$$

В этих примерах коэффициент пропорциональности в уравнениях связи равен 1. Полученные таким образом единицы называются *когерентными.* Систему, состоящую из когерентных единиц, также называют *когерентной.*

Наряду с единицами СИ ГОСТ определяет внесистемные единицы. Различают:

– внесистемные единицы, допускаемые к применению наравне с единицами СИ и в сочетании с ними. Это единицы массы – тонна (обозначение: международное – t, русское – т); времени – минута (min, мин), час (h, ч), сутки (d, сут); плоского угла – градус, минута, секунда (...°,...′,...″); объема – литр (l, л); температуры – градус Цельсия (...° С), площади – гектар (ha, га) и ряд других;

– внесистемные единицы, временно допускаемые к применению, решение о сроках их изъятия должно быть принято международными организациями. Например, это морская миля (n mile, миля), узел (kn, уз), оборот в секунду (r/s, об/с), оборот в минуту (r/min, об/мин), карат (кар), бар (bar, бар), непер (Np, Нп);

– единицы, подлежащие изъятию как недопустимые. Среди них ангстрем ($\mathring{A}$, Å), микрон (μ, мк), ар (a, а) центнер (q, ц), гал (Gal, Гал), дина (dyn, дин), эрг (erg, эрг), все виды калорий (cal, кал), миллиметры ртутного столба ($mm\ Hg$, мм рт. ст.) и ряд других.

ГОСТ 8.417-81 регламентирует также использование десятичных приставок для образования дольных и кратных единиц СИ и части внесистемных единиц. *Дольные* приставки соответствуют множителям при численных значениях величины 10^{-p}, а *кратные* –10^{p}, где p – число из ряда 1, 2, 3, 6, 9, 12, 15, 18.

Наименования и обозначения приставок приведены в табл. 1.2.

Таблица 1.2

Приставки для образования десятичных, дольных и кратных единиц

Множитель	Приставка	Обозначение приставки		Примеры
		международное	Русское	
10^{18}	экса	E	Э	эксабеккерель – ЭБк, Ebq
10^{15}	пета	P	П	петаметр – Пм, Pm
10^{12}	тера	T	Т	тераом – ТОм, T Ω
10^{9}	гига	G	Г	гигаватт – ГВт, GW
10^{6}	мега	M	М	мегаджоуль – МДж, MJ
10^{3}	кило	k	к	килопаскаль – кПа, kPa
10^{2}	гекто	h	г	гектолитр – гл, hl
10^{1}	дека	da	да	декаметр – дам, dam
10^{-1}	деци	d	д	дециметр – дм, dm
10^{-2}	санти	c	с	сантиметр – см, cm
10^{-3}	милли	m	м	милливольт – мВ
10^{-6}	микро	μ	мк	микросекунда – мкс, μ s
10^{-9}	нано	n	н	нанометр – нм, nm
10^{-12}	пико	p	п	пикофарад – пФ, pF
10^{-15}	фемто	f	ф	фемтокулон – фКл, fC
10^{-18}	атто	a	а	аттограмм – аг, ag

ГОСТ устанавливает следующие правила использования и написания наименований и обозначений единиц.

1. Международные обозначения единиц осуществляются буквами латинского и греческого алфавитов, русские – буквами русского алфавита. Наименования и обозначения единиц пишутся строчными буквами, прямым шрифтом. Исключение составляют обозначения единиц, имеющих специальные наименования в честь известных ученых. Эти единицы обозначаются заглавными буквами. Примеры: секунда – с, кандела – кд, но ампер – А, ньютон – Н.

Единицы плоского угла обозначаются специальными знаками поднятыми над строкой (...°, ...′, ...″). Относительные и логарифмические единицы выражаются в процентах (%), промилле (‰), миллионных долях (ppm, млн$^{-1}$), беллах (В, Б), децибеллах (dB, дБ) и др.

2. Международные обозначения обязательны для применения в научно-технической документации на средства измерений и при нанесении на щитках и шкалах приборов.

В печатных изданиях можно применять либо международные, либо русские обозначения. Одновременное использование обоих видов обозначений в одном и том же печатном издании не допускается. Исключение составляют лишь публикации по единицам измерений (например, настоящее учебное пособие). Однако и в этом случае комбинация международных и русских обозначений в одном наименовании является грубой ошибкой.

3. Дольные и кратные приставки пишутся слитно с наименованиями, а их обозначения с обозначениями единиц (см. табл. 1.2).

4. К наименованию единиц можно присоединять только одну приставку. Так, например, нельзя сказать (написать) киломегаватт или мегакиловатт, следует сказать гигаватт (ГВт).

Единица массы килограмм уже обладает приставкой кило, поэтому приставку следует добавлять к единице грамм. Обозначая 10^{-6} кг, нельзя написать микрокилограмм, следует сказать миллиграмм.

5. Если единица представляет собой произведение или отношение единиц, то приставка присоединяется к первой из единиц в числителе. Например, правильно 10 кН·м, а не 10 Н·км.

В порядке исключения разрешается использовать традиционные сочетания, такие как т. км (тонна – километр), Вт/см^2 и др.

6. Приставку следует выбирать таким образом, чтобы численное значение величины заключалось в диапазоне от 1000 до 0,1. Так, диаметр капилляра $1{,}2 \cdot 10^{-4}$ м можно представить как 120 мкм или 0,12 мм, но не следует писать 0, 012 см.

7. В кратных и дольных единицах, образуемых возведением в степень, показатель степени относится ко всей единице, взятой вместе с приставкой. Таким образом, 5 мКл^2 = = 5 (мКл)^2 = 5 (10^{-3} Кл)^2 = $5 \cdot 10^{-6}$ Кл^2.

8. Точка, как знак сокращения, в обозначениях единиц не ставится.

Класс точности устанавливают при разработке (или поверке) средств измерений. Пределы допускаемых погрешностей средств измерений различных физических величин традиционно или в силу необходимости выражаются в формах абсолютных, относительных или приведенных погрешностей. Пределы абсолютных погрешностей задаются формулами (1.3), (1.4). Запишем их здесь в виде:

$$\Delta = \pm a \tag{1.10}$$

или

$$\Delta = \pm(a + bx), \tag{1.11}$$

где a, b – размерные, положительные числа, независящие от x.

Относительная погрешность выражается в процентах

$$\delta = 100\frac{\Delta}{x} = \pm p, \tag{1.12}$$

где x – измеренное значение, а Δ определяется выражением (1.10). При этом число p является не произвольным, а округляется до $p = k \cdot 10^n$, где k выбирается из ряда: 1; 1,5; 2; 2,5; 4; 5; 6, а n – из ряда: +1; 0; -1; -2; -3 ...

Очевидно, что при постоянной δ абсолютная погрешность является мультипликативной. Если Δ остается постоянной или почти постоянной во всем диапазоне измерений, точность средства измерений характеризуют приведенной погрешностью

$$\gamma = 100\frac{\Delta}{x_N}, \tag{1.13}$$

где x_N – нормирующее значение. В качестве нормирующего значения выбирают обычно максимальное (конечное) значение шкалы средства измерений $x_N = x_к$.

Если ноль шкалы находится внутри диапазона измерений, то в качестве нормирующего используют интервал от начального $x_н$ до конечного $x_к$ значения: $x_N = x_к - x_н$. Нормирующие значения указываются в технической документации и отмечаются на шкалах, щитках или корпусах средств измерений.

В случаях, когда абсолютная погрешность выражается формулой (1.11), пределы относительной погрешности средств измерений представляют формулой

$$\delta = \pm\left(c + d\left(\left|\frac{x_N}{x}\right| - 1\right)\right), \tag{1.14}$$

где $c = 100b + d$, $d = 100\frac{a}{|x_N|}$.

Здесь, как и в формулах (1.12,1.13), погрешности выражены в процентах. Значения c и d, также как и γ, выбираются из того же ряда чисел p.

Классы точности средств измерений, которые характеризуются относительной или приведенной погрешностями, в технической документации обозначают числами, равными пределам этих погрешностей в процентах.

В случае погрешности, представляемой формулой (1.14), класс точности обозначается двумя числами c и d, записываемыми в виде дроби с косой чертой c/d. Классы точности средств измерений, характеризуемые абсолютными погрешностями, обозначаются заглавными буквами латинского алфавита или римскими цифрами. При этом, чем выше класс точности, тем ближе к началу алфавита буква или тем меньше цифра. Аналогичным образом обозначаются и классы точности средств измерений, пределы погрешностей которых представлены графиками, таблицами или формулами, отличающимися от (1.11) и (1.14).

Для обозначения классов точности непосредственно на средствах измерений используются специальные знаки – табл. 1.3.

Таблица 1.3

Обозначения классов точности на средствах измерений

Форма и формула погрешности	Обозначения	
	Общее	Пример
Относительные:		
$\delta = \pm 100\frac{a}{x} = \pm p$	(p)	(0,5)
$\delta = \pm\left(c + d\left(\left\|\frac{x_N}{x}\right\| - 1\right)\right)$	c/d	0,02/0,05
Приведенные:		
$\gamma = \pm 100\frac{a}{x_к} = \pm q$	q	0,1
$\gamma = \pm 100\frac{a}{x_к - x_н} = \pm q$	q	1,0
Абсолютные:		
$\Delta = \pm a,$	Буквы латинского алфавита	M
$\Delta = \pm(a + bx)$		D
Относительные		
$\delta = \pm 1g\left(1 + \frac{\Delta}{x}\right)$	Буквы латинского алфавита	F

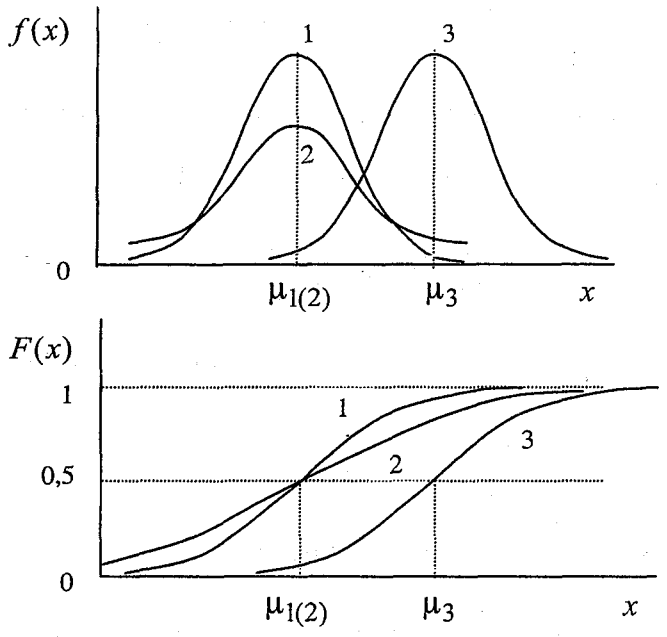


Рис. 2.2. Плотность вероятности и функция нормального распределения при различных сочетаниях параметров.

1. $\mu_1, \sigma_1(x)$, 2. $\mu_2 = \mu_1, \sigma_2(x) > \sigma_1(x)$, 3. $\mu_3 > \mu_1, \sigma_3(x) = \sigma_1(x)$.

Вероятность того, что истинное значение x_0 случайной величины заключено в интервале $[x_1, x_2]$ составляет

$$P\{x_1 \le x_0 \le x_2\} = \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx = F(x_2) - F(x_1). \qquad (2.24)$$

Интеграл (2.23) в квадратурах не имеет решения. Его вычисляют путем численного интегрирования. Чтобы не производить громоздкие вычисления при различных комбинациях $\bar{x}$ и $\sigma(x)$, обычно используют стандартное распределение.

Стандартное нормальное распределение. Введем безразмерную переменную $z = \dfrac{x - \mu_1}{\sigma(x)}$. Тогда $dz = \dfrac{dx}{\sigma(x)}$ и выражение (2.23) приводится к стандартному виду

$$F(z) = \int_{-\infty}^{z} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) dz. \qquad (2.25)$$

Подынтегральная функция представляет собой плотность нормального стандартного распределения

$$\varphi(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right). \qquad (2.26)$$

Перепишем (2.25) в виде суммы двух интегралов

$$F(z)=\int_{-\infty}^{0}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{z^2}{2}\right)dz+\int_{0}^{z}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{z^2}{2}\right)dz. \qquad (2.27)$$

Значение $z=0$ является модой и медианой $\varphi(z)$, поэтому первый интеграл $F(0)=1/2$, второй интеграл называют *функцией Лапласа* ($\Phi(z)$).

$$\Phi(z)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{0}^{z}\exp\left(-\frac{z^2}{2}\right)dz. \qquad (2.28)$$

С [illegible]том функции Лапласа вероятность нахождения x_0 в интервале $[x_1,x_2]$ можно определить

$$P\{x_1\le x_0\le x_2\}=F(x_2)-F(x_1)=F(z_2)-F(z_1)=$$
$$\frac{1}{2}+\Phi(z_2)-(\frac{1}{2}+\Phi(z_1))=\Phi(z_2)-\Phi(z_1). \qquad (2.29)$$

Заметим, что $\Phi(z)$ есть функция нечетная, т.е. $\Phi(-z)=-\Phi(z)$. Результаты численного интегрирования $\Phi(z)$ затабулированы (*Приложение 1*). Поэтому, если $z_2=-z_1$, то $\Phi(z_2)-\Phi(-z_2)=2\Phi(z_2)$.

Приведем несколько значений $\Phi(z)$, которые полезно иметь под рукой или просто запомнить. Их выбор поясняется столбцом значений $2\Phi(z)$, определяющих вероятность попадания случайной величины в интервал $[-z,z]$.

z	$\Phi(z)$	$2\Phi(z)$
0,00	0,0000	0,00
0,68	0,2517	0,50
,00	0,3413	0,68
1	0,3997	0,80
1,64	0,4495	0,90
1,96	0,475	0,95
2,00	0,495	
2,58	0,4951	0,99
3,00		

Дополнения к разд. 2.1

1. Подробные таблицы для [illegible] и в спра[illegible]ной литературе. Они могут быть [illegible] ов (обо[illegible]чения могут быть другими):

1.1. $\Phi(z)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^z \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right)dz,$ $\Phi(z)\in[0;0{,}5]$ (2.30)

1.2. $F(z)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^z \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right)dz=\frac{1}{2}+\Phi(z),$ $F(z)\in[0;1]$ (2.31)

1.3. $P(z)=2\Phi(z)=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_0^z \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right)dz,$ $P(z)\in[0;1]$ (2.32)

1.4. $erf(y)=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^y \exp\left(-y^2\right)dy=2\Phi(y\cdot\sqrt{2}),$ $erf(y)\in[0;1]$ (2.33)

Здесь *erf* – error function – интеграл ошибок, $y=z/\sqrt{2}$.

2. При выполнении расчетов на ПК вместо таблиц удобнее использовать аппроксимирующие формулы.

2.1. Формула для функции стандартного нормального распределения

$$F(z)=1-\varphi(z)(b_1t+b_2t^2+b_3t^3+b_4t^4+b_5t^5), \quad (2.34а)$$

где $\varphi(z)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\cdot\exp\left(-\frac{z^2}{2}\right)$, $t=1/(1+pz)$,

$p=0{,}2316419;$

$b_1=0{,}31938153;$ $b_2=-0{,}356563782;$ $b_3=1{,}781477937;$

$b_4=-1{,}821255978;$ $b_5=1{,}330274429.$

Считается, что значение $F(z)$ рассчитывается по этой формуле с погрешностью менее $7{,}5\cdot10^{-8}$.

2.2. Аналогичный вид имеет аппроксимирующая формула для интеграла ошибок.

$$erf(y)=1-(a_1t+a_2t^2+a_3t^3+a_4t^4+a_5t^5)e^{-y^2}, \quad (2.34б)$$

где $t=1/(1+p'y)$; $p'=0{,}3275911;$ $a_1=0{,}254829592;$ $a_2=-0{,}284496736;$ $a_3=1{,}421413741;$ $a_4=-1{,}453152027;$ $a_5=1{,}061405429.$

Погрешность аппроксимации (2.34б) не выше $1{,}5\cdot10^{-7}$.

2.3. Сравнительно недавно было найдено полуэмпирическое решение для функции Лапласа:

$$\Phi(z)=\frac{1}{2}\left[1-\frac{1}{30}\left(7\cdot\exp\left(-\frac{z^2}{2}\right)+16\cdot\exp\left(-z^2\left(2-\sqrt{2}\right)\right)+\left(7+\frac{\pi}{4}z^2\right)\cdot\exp\left(-z^2\right)\right)\right]^{1/2}. \quad (2.35)$$

Формула (2.35) может быть использована без ограничений в диапазоне от $-\infty$ до $+\infty$.

2.4. Часто на практике возникает обратная задача – нахождение квантильного значения z при заданной вероятности p. С этой целью можно использовать приближенную формулу

$$z_p = \tau - \frac{c_0 + c_1\tau + c_2\tau^2}{1 + d_1\tau + d_2\tau^2 + d_3\tau^3} + \varepsilon(p), \qquad (2.36)$$

$\tau = \sqrt{-2\ln(1-p)}$, $c_0 = 2.515517$, $c_1 = 0.802853$, $c_2 = 0.010328$, $d_1 = 1.432788$, $d_2 = 0.189269$, $d_3 = 0.001308$.

Погрешность аппроксимации не более $4.5 \cdot 10^{-4}$.

Упражнения для самостоятельного выполнения

1. Докажите, что для нормального закона распределения (2.22) $D_2 = \sigma^2(x)$. (Либо, что проще, для $\varphi(z)$ в виде (2.26) $D_2 = \sigma^2(z) = 1$).
2. Используя формулу стандартного распределения (2.26), докажите, что для нормального распределения $A = 0$, $Э = 0$.

2.3. Другие виды распределения погрешностей

Для представления результатов измерений и их погрешностей кроме нормального ГОСТ рекомендует к применению следующие законы распределения.

2.3.1. Равномерное распределение

В общем случае равномерное распределение характеризует случайную величину, появляющуюся с одинаковой вероятностью в интервале значений от a до b – рис. 2.3.

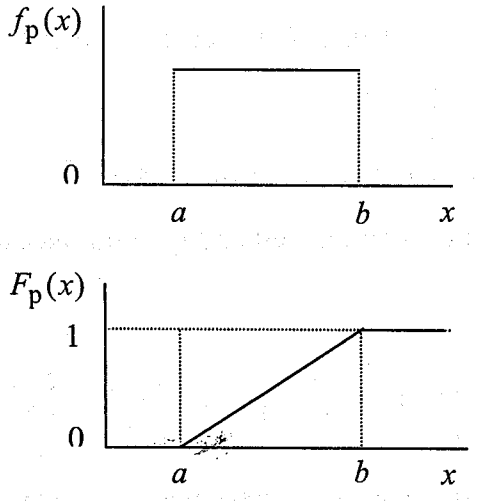


Рис. 2.3. Плотность вероятности и функция равномерного распределения.

Плотность вероятности равномерного распределения

$$f_{\text{р}}(x)=\begin{cases}\dfrac{1}{b-a}, & x\in[a,b],\\ 0, & x\notin[a,b].\end{cases} \tag{2.37}$$

Чтобы получить функцию равномерного распределения следует выполнить интегрирование

$$F_{\text{р}}(x)=\int_a^x\frac{1}{b-a}dx=\frac{x-a}{b-a}. \tag{2.38}$$

Таким образом

$$F_{\text{р}}(x)=\begin{cases}0, & x<a,\\ \dfrac{x-a}{b-a}, & a\le x\le b,\\ 1, & x>b.\end{cases} \tag{2.39}$$

Первый начальный и второй центральный моменты легко находятся:

$$\mu_1=\int_a^b\frac{x}{b-a}dx=\frac{1}{b-a}\cdot\frac{x^2}{2}\Bigg|_a^b=\frac{b+a}{2}, \tag{2.40}$$

$$D_2=\sigma^2(x)=\int_a^b\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2\cdot\frac{1}{b-a}dx=\frac{(b-a)^2}{12}. \tag{2.41}$$

Среднее квадратическое отклонение для равномерного распределения

$$\sigma(x)=\frac{b-a}{\sqrt{12}}=\frac{b-a}{2\sqrt{3}}. \tag{2.42}$$

Равномерное распределение является симметричным относительно среднего значения. Для него, как легко убедиться, коэффициент асимметрии $A_{\text{р}}=0$, коэффициент эксцесса

$$Э_{\text{р}}=\frac{D_4}{\sigma^4(x)}-3=\frac{12^2}{(b-a)^4}\cdot\frac{1}{b-a}\int_a^b\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^4dx-3=-\frac{6}{5}=-1{,}2.$$

Равномерное распределение часто используется для представления погрешностей средств измерения, определяемых классом точности. В таких случаях $-\theta\le x\le\theta$, $\bar{x}=0$, $\sigma(x)=\theta/\sqrt{3}$.

2.3.2. Треугольное распределение

Плотность вероятности суммы двух равномерно распределенных случайных величин имеет *треугольное распределение*. Это название отражает графическое представление плотности вероятности (рис. 2.4).

Треугольное распределение является симметричным относительно среднего значения, поэтому априори можно записать $\mu_1 = \bar{x} = (a+b)/2$. При этом значение производной от плотности вероятности терпит разрыв. Выведем выражение, описывающее $f_т(x)$ в интервале $[a,b]$ (вне этого интервала $f_т(x) = 0$). Рассмотрим сначала интервал $[a;(a+b)/2]$.

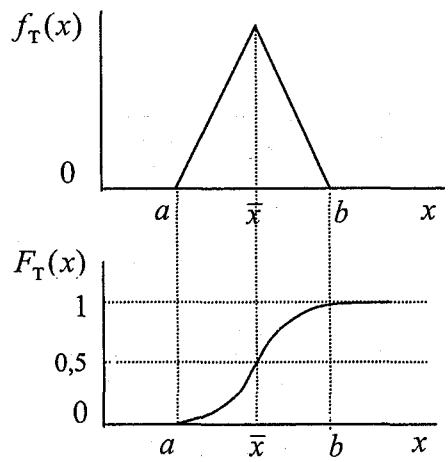


Рис. 2.4. Плотность вероятности $f_т(x)$ и функция $F_т(x)$ треугольного распределения.

Здесь выражение для $f_т(x)$ – уравнение прямой, проходящей через точки a на оси абсцисс и $(a+b)/2$ с неизвестной пока ординатой, так что $f_т(x) = C(x-a)$. Имея в виду, что площадь половины треугольника равна 0,5, запишем для нулевого момента

$$0{,}5 = \int_a^{\frac{a+b}{2}} C(x-a)dx = C \cdot \frac{(b-a)^2}{8},$$

откуда $C = \dfrac{4}{(b-a)^2}$. Естественно, аналогичное выражение получается и для другой половины треугольника. Таким образом

$$f_т(x) = \begin{cases} 0, & x \le a, \\ \dfrac{4(x-a)}{(b-a)^2}, & a < x \le \dfrac{a+b}{2}, \\ \dfrac{4(b-x)}{(b-a)^2}, & \dfrac{a+b}{2} < x \le b, \\ 0, & x > b. \end{cases} \qquad (2.43)$$

Соответственно для каждого из интервалов получим

$$F_{\text{т}}(x)=\begin{cases}0, & x\le a,\\ \dfrac{2(x-a)^2}{(b-a)^2}, & a<x\le\dfrac{a+b}{2},\\ 1-\dfrac{2(b-x)^2}{(b-a)^2}, & \dfrac{a+b}{2}<x\le b,\\ 1, & x>b.\end{cases} \tag{2.44}$$

2.3.3. *Трапециевидное и антимодальные распределения*

Трапециевидное (трапецеидальное) распределение является композицией двух равномерных распределений (рис. 2.5). ГОСТ регламентирует соотношение между компонентами. Весь интервал a,b делится на три части: площади под двумя крайними (треугольными) частями распределения составляют по $1/4$, а площадь центральной (равномерной) части равняется $1/2$.

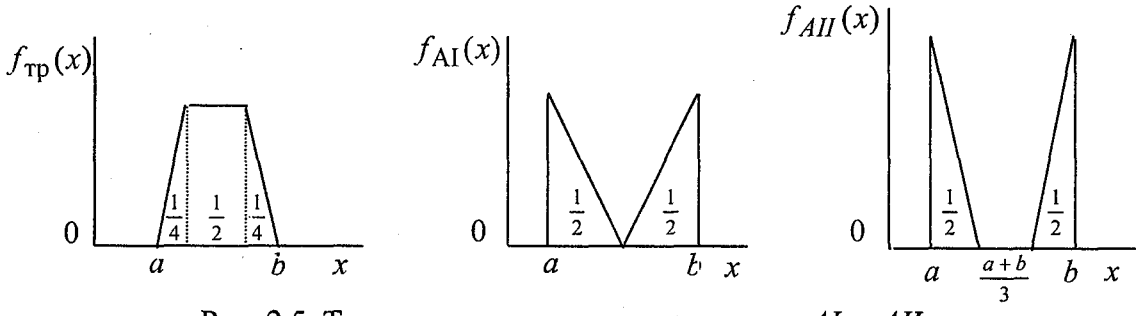


Рис. 2.5. Трапециевидное и антимодальные *AI* и *AII* распределения погрешностей.

Крайними случаями трапециевидного распределения являются равномерное, когда верхнее и нижнее основания трапеций равны между собой, и треугольное, когда верхнее основание равно нулю. Антимодальные распределения являются перевернутыми формами треугольного (*AI*) и трапециевидного (*AII*) распределений.

Упражнение

Выведите выражение для плотности вероятности антимодального – *AI* распределения. Вычислите для этого распределения значения дисперсии $\sigma^2_{AI}(x)$ и коэффициента эксцесса $Э_{AI}$.

2.3.4. *Экспоненциальные распределения*

Все рассмотренные выше в этом разделе распределения, кроме антимодальных, относятся к числу так называемых экспоненциальных распределений. Общая формула плотности вероятности таких распределений имеет вид

$$f(x)=\frac{\chi}{2\lambda\sigma(x)\Gamma(1/\chi)}\exp\left[-\left(\frac{|x-\mu_1|}{\lambda\sigma(x)}\right)^{\chi}\right], \tag{2.45}$$

где $\lambda=\sqrt{\Gamma(1/\chi)/\Gamma(3/\chi)}$, $\Gamma(m)$ – гамма-функция.

$$\Gamma(m)=\int_0^{\infty}u^{m-1}\exp(-u)du. \tag{2.46}$$

При переходе к центрированной и нормированной переменной $z=(x-\mu_1)/\sigma(x)$ выражение (2.45) упрощается

$$f(z)=\frac{\chi}{2\lambda\Gamma(1/\chi)}\exp\left(-\left|\frac{z}{\lambda}\right|^{\chi}\right). \tag{2.47}$$

Параметр χ однозначно определяет вид распределения. При $\chi=1$ получим распределение Лапласа (с ним мы познакомимся позднее – в разделе 3), при $\chi=2$ выражения (2.45) и (2.47), соответственно, превращаются в нормальное и стандартное нормальное распределения. При $\chi>2$ распределение приближается к трапециевидному тем ближе, чем больше χ. Если $\chi\to\infty$, то распределение (2.45) превращается в равномерное. Параметр χ управляет эксцессом

$$\tilde{Э}=\frac{\Gamma(1/\chi)\cdot\Gamma(5/\chi)}{\left(\Gamma(3/\chi)^2\right)}. \tag{2.48}$$

Гамма-функция, определяемая интегралом (2.46), далее будет часто встречаться по тексту. Приведем здесь основные формулы вычисления $\Gamma(m)$, m – произвольное рациональное число ($m\neq 0$).

$\Gamma(m)=(m-1)\Gamma(m-1)$, $m>0$

$\Gamma(m)=(m-1)!$, Если $m-$ целое число, $m>0$

$\Gamma(1/m)=m\Gamma(1+1/m)$, $m>0$

$\Gamma(1)=\Gamma(2)=1$, При $1<m<2$ $\Gamma(m)$ находится по таблицам

$\Gamma(0{,}5)=\sqrt{\pi}$; $\Gamma(1{,}5)=(1/2)\sqrt{\pi}$; $\Gamma(5/2)=(3/4)\sqrt{\pi}$; $\Gamma(3)=2$.

2.3.5. Распределение Вейбулла

В учебниках по математической статистике приводится длинный перечень теоретических распределений случайных величин. С некоторыми из них мы встретимся в других разделах курса. Приведем здесь еще одно распределение, часто используемое для

описания метеорологических величин, которые по своей природе не могут быть отрицательными.

Плотность вероятности $f_{\text{В}}(x)$ и функция $F_{\text{В}}(x)$ распределения Вейбулла описываются сравнительно простыми, но довольно гибкими выражениями

$$f_{\text{В}}(x)=\begin{cases}\dfrac{\beta}{b^{\beta}}x^{\beta-1}\exp\left[-\left(\dfrac{x}{b}\right)^{\beta}\right], & x>0,\\ 0, & x\le 0,\end{cases} \tag{2.49}$$

$$F_{\text{В}}(x)=1-\exp\left[-\left(\frac{x}{b}\right)^{\beta}\right], \tag{2.50}$$

где b,β – параметры распределения; b имеет размерность, одинаковую с размерностью x, β – безразмерный. Первый начальный момент и дисперсия для этого распределения, соответственно, вычисляются по формулам:

$$\mu_1=x_0=b\Gamma\left(\frac{1}{\beta}+1\right), \tag{2.51}$$

$$D_2=\sigma_{\text{В}}^2(x)=b^2\left\{\frac{2}{\beta}\Gamma\left(\frac{2}{\beta}\right)-\frac{1}{\beta^2}\left[\Gamma\left(\frac{1}{\beta}\right)^2\right]\right\}. \tag{2.52}$$

3. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ИЗМЕРЕНИЙ. ОЦЕНИВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ ТЕОРЕТИЧЕСКОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Теоретические выражения плотности вероятности или функции распределения в общем случае определяют только вид распределения случайной величины. Конкретные значения $f(x)$ или $F(x)$ определяются характеристиками распределения, например μ_1 и $\sigma(x)$, для нормального закона или границами распределения (a и b) для равномерного. Такие характеристики называют параметрами распределения. Значения параметров находят на основе экспериментальных данных. Поскольку они всегда ограничены конечным числом измерений n (синонимы: длина ряда, число испытаний, объем выборки), то полученные при этом значения не являются характеристиками генеральной совокупности, но представляют собой только их оценки. Различают два вида оценок: точечные, отражающие численное значение исследуемого параметра, и интервальные, определяющие возможные пределы изменения параметра.

3.1.Точечные оценки

Сформулируем задачу сначала в самом общем виде. Необходимо оценить параметры некоторого теоретического распределения $\theta_j, j=\overline{1,k}$, где k – число определяемых параметров. Исходной информацией служит ряд измерений $x_i, i=\overline{1,n}$. Любая полученная по ограниченной выборке оценка параметра, будучи функцией случайных величин x_i, $\hat{\theta}=\hat{\theta}(x_i,\ i=\overline{1,n})$ в свою очередь является случайной величиной.

К выборочным оценкам предъявляются следующие требования:

1. *Несмещенность*. Математическое ожидание оценки параметра должно быть равно его истинному значению θ при любом объеме выборки $M\{\hat{\theta}\}=\theta$.

2. *Эффективность*. Дисперсия выборочной оценки должна быть минимальной по сравнению с дисперсиями любых других возможных оценок параметра $D_2(\hat{\theta})=\min$.

3. *Состоятельность*. Оценка должна приближаться к истинному значению параметра с вероятностью равной единице (погрешность определения параметра стремится к нулю) при неограниченном увеличении объема выборки: $\lim\limits_{n\to\infty} P\{|\hat{\theta}-\theta|<\varepsilon\}=1$, где ε – сколь угодно малое наперед заданное число.

На практике для нахождения оценок параметров распределения применяют различные методы. В данном пособии мы используем метод *максимального правдоподобия* (ММП).

Найдем такие значения параметров θ_j, при которых вероятность того, что в n испытаниях случайная величина x попадает в малый интервал δx, является максимальной. Если вероятность попадания случайной величины в этот интервал в i-ом испытании равна p_i, то вероятность совместного осуществления n независимых событий

$$P_n = \prod_{i=1}^{n} p_i. \tag{3.1}$$

Принимая

$$p_i = f(x_i) \cdot \delta x, \tag{3.2}$$

перепишем (3.1) в виде

$$P_n = \prod_{i=1}^{n} \left(f(x_i) \cdot \delta x\right) = (\delta x)^n \prod_{i=1}^{n} f(x_i). \tag{3.3}$$

Произведение

$$g = \prod_{i=1}^{n} f(x_i) \tag{3.4}$$

называют *функцией правдоподобия*, а ее логарифм – *логарифмической функцией правдоподобия*

$$L = \ln g = \sum_{i=1}^{n} \ln f(x_i). \tag{3.5}$$

Значения параметров, определяющие максимумы этих функций, находят из условий равенства нулю первых производных от g или L по $\hat{\theta}_j$

$$\frac{\partial g}{\partial \hat{\theta}_j} = 0 \quad \text{или} \quad \frac{\partial L}{\partial \hat{\theta}_j} = 0. \tag{3.6}$$

Здесь и далее для сокращения записи использовано обозначение $\dfrac{\partial}{\partial \hat{\theta}_j} = \dfrac{\partial}{\partial \theta_j}\Big|_{\theta_j = \hat{\theta}_j}$.

Дальнейшее развитие ММП позволяет найти не только оценки $\hat{\theta}_j$, но и дисперсии этих оценок

$$\sigma^2(\hat{\theta}_j) = \left(-M\left\{ \frac{\partial^2 L}{\partial \hat{\theta}_j^2} \right\} \right)^{-1}, \tag{3.7}$$

где M – знак математического ожидания.

Рассмотрим теперь применение ММП для некоторых распределений.

3.1.1. Оценка параметров нормального распределения

В формуле плотности вероятности нормального распределения

$$f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(x)}\exp\left[\frac{-(x-\mu_1)^2}{2\sigma^2(x)}\right] \tag{3.8}$$

содержатся два параметра, подлежащие оцениванию по результатам измерений: $\theta_1=\mu_1$ и $\theta_2=\sigma^2(x)$. Подставляя (3.8) в выражение (3.4), для функции правдоподобия получим

$$g=\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(x)}\right)^n\exp\left[-\sum_{i=1}^{n}\frac{(x_i-\mu_1)^2}{2\sigma^2(x)}\right] \tag{3.9}$$

или, переходя к логарифмической функции правдоподобия,

$$L=-n\ln\sqrt{2\pi}-n\ln\sigma(x)-\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu_1)^2}{2\sigma^2(x)}. \tag{3.10}$$

Найдем $\hat{\mu}_1$ – оценку математического ожидания для распределения (3.8). Продифференцируем (3.10) по $\hat{\mu}_1$:

$$\frac{\partial L}{\partial\hat{\mu}_1}=\frac{1}{\sigma^2(x)}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\hat{\mu}_1). \tag{3.11}$$

Приравняем (3.11), в соответствии с (3.6), нулю, тогда

$$\sum_{i=1}^{n}(x_i-\hat{\mu}_1)=\sum_{i=1}^{n}x_i-n\hat{\mu}_1=0.$$

Отсюда

$$\hat{\mu}_1=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i. \tag{3.12}$$

Как легко видеть, оценка $\hat{\mu}_1$ представляет собой среднее арифметическое $\hat{\mu}_1=\bar{x}$. Это обстоятельство и определяет использование $\bar{x}$ в качестве действительного значения измеряемой величины. Доказывается, что оценка $\hat{\mu}_1=\bar{x}$ является несмещенной и эффективной.

Подставим теперь в (3.10) вместо $\hat{\mu}_1$ параметр $\bar{x}$ и найдем $\hat{\sigma}^2(x)$ – оценку дисперсии генеральной совокупности

$$\frac{\partial L}{\partial \hat{\sigma}(x)} = -\frac{n}{\hat{\sigma}(x)} + \frac{1}{\hat{\sigma}^3(x)} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2 = 0, \tag{3.13}$$

откуда

$$\hat{\sigma}'^2(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2. \tag{3.14}$$

Обозначение $\hat{\sigma}'^2(x)$ отражает здесь то обстоятельство, что эта величина является смещенной относительно действительной оценки $\hat{\sigma}^2(x)$, определяемой как

$$\hat{\sigma}^2(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \mu_1)^2. \tag{3.15}$$

Покажем это, выполнив следующие преобразования формулы (3.15).

$$\begin{aligned} &\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \mu_1)^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x} + \bar{x} - \mu_1)^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2 + \\ &+ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} 2(x_i - \bar{x})(\bar{x} - \mu_1) + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (\bar{x} - \mu_1)^2 \end{aligned} \tag{3.16}$$

В правой части выражения (3.16) первое слагаемое, в соответствии с формулой (3.14), представляет собой $\hat{\sigma}'^2(x)$. Второе слагаемое равно нулю, поскольку $\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x}) = 0$.

Третье слагаемое

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (\bar{x} - \mu_1)^2 = (\bar{x} - \mu_1)^2 = \frac{\hat{\sigma}^2(x)}{n}. \tag{3.17}$$

(Громоздкое доказательство последнего равенства здесь не приводится).

Таким образом,

$$\hat{\sigma}^2(x) = \hat{\sigma}'^2(x) + \frac{\hat{\sigma}^2(x)}{n}, \tag{3.18}$$

отсюда

$$\hat{\sigma}^2(x) = \frac{n}{n-1} \hat{\sigma}'^2(x). \tag{3.19}$$

На практике несмещенную оценку дисперсии генеральной совокупности называют *выборочной несмещенной дисперсией*. Ее традиционно обозначают $S^2(x)$. Смещенную выборочную дисперсию обозначают $S'^2(x)$. Теперь, используя замену $\hat{\sigma}^2(x) = S^2(x)$ и подставляя в (3.19) выражение (3.14), окончательно получим

$$S^2(x) = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2. \tag{3.20}$$

Выборочное среднее квадратическое отклонение $S(x)$ (выборочное СКО) определяют из (3.20).

$$S(x) = \sqrt{\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2} \tag{3.21}$$

Строго говоря, величина $S(x)$, полученная простым извлечением корня из (3.20), является, как показывает более глубокий анализ, заниженной по сравнению с оценкой $\hat{\sigma}(x)$. Поэтому в руководствах по обработке результатов измерений часто вместо (3.21) можно встретить выражение

$$S(x) = \zeta(n)\sqrt{\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}\ . \tag{3.22}$$

Поправочный множитель $\zeta(n)$ обычно задается в виде таблицы. С достаточной для практических целей точностью его можно представить простой формулой $\zeta = 1{,}03 + \frac{0{,}24}{n-1}$.

Другим вариантом коррекции $S(x)$ служит выражение

$$S(x) = \sqrt{\frac{1}{n-1{,}45}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}\ . \tag{3.23}$$

Легко видеть, что различия между (3.21) и (3.22), (3.23) быстро нивелируются с увеличением n. На практике обычно используют формулу (3.21).

Оценим теперь точность, с которой получены оценки $\hat{\mu}_1$ и $\hat{\sigma}(x)$. С этой целью используем условие (3.7). Введем следующие обозначения: $\sigma^2(\hat{\mu}_1) = \sigma^2(\bar{x}) = \sigma^2_{\bar{x}}$ и $\sigma^2(\hat{\sigma}(x)) = \sigma^2_{\sigma}$. Возьмем производную по $\hat{\mu}_1$ от выражения (3.11), заменяя в нем $\sigma^2(x)$ на $\hat{\sigma}^2(x)$.

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 L}{\partial \hat{\mu}_1^2} &= \frac{1}{\hat{\sigma}^2(x)}\frac{\partial}{\partial \hat{\mu}_1}\left(\sum_{i=1}^{n}(x_i - \hat{\mu}_1)\right) = \\ &= \frac{1}{\hat{\sigma}^2(x)}\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial}{\partial \hat{\mu}_1}(x_i - \hat{\mu}_1) = -\frac{n}{\hat{\sigma}^2(x)}.\end{aligned} \tag{3.24}$$

Подставим (3.24) в (3.7) и найдем

$$\sigma^2_{\bar{x}} = \frac{\hat{\sigma}^2(x)}{n}. \tag{3.25}$$

Оценка $\sigma^2_{\bar{x}}$ оказывается несмещенной, поэтому, переходя к выборочной дисперсии, получим

$$S^2_{\bar{x}} = \frac{S^2(x)}{n}. \tag{3.26}$$

Найдем σ^2_{σ}. Продифференцируем (3.13) по $\hat{\sigma}(x)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 L}{\partial \hat{\sigma}^2(x)} &= \frac{n}{\hat{\sigma}^2(x)} - \frac{3}{\hat{\sigma}^4(x)} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2 = \\ &= \frac{n}{\hat{\sigma}^2(x)} - \frac{3n}{\hat{\sigma}^4(x)} \hat{\sigma}^2(x) = -\frac{2n}{\hat{\sigma}^2(x)}. \end{aligned} \tag{3.27}$$

В соответствии с условием (3.7) получим

$$\sigma^2_{\sigma} = \frac{\hat{\sigma}^2(x)}{2n}. \tag{3.28}$$

При ограниченном n значение σ^2_{σ} оказывается снова несколько смещенным. Поэтому, переходя к выборочной дисперсии, имеем

$$S^2_S = \frac{S^2(x)}{2(n-1)}. \tag{3.29}$$

3.1.2. Оценка параметров равномерного распределения

В формуле плотности вероятности равномерного распределения

$$f_{\mathrm{p}}(x) = \frac{1}{b-a}, \quad a \le x \le b \tag{3.30}$$

неизвестными параметрами, подлежащими оценке, являются границы a и b. Непосредственное дифференцирование функции правдоподобия $g = \left(\frac{1}{b-a}\right)^n$, также как ее логарифмической формы $L = -n\ln(b-a)$ не дает возможности определить a и b, отвечающие условиям максимумов g или L. Решим задачу путем простых логических рассуждений.

Построим из результатов измерений x_i вариационный возрастающий ряд $x_1, x_2, \ldots x_n, x_{i+1} \ge x_i$. Предположим, что $a \le x_1$, а $b \ge x_n$, так как x_i не могут выходить за пределы интервала $[a,b]$. Однако любое из отношений

$$\frac{1}{b-(a-\Delta)},\quad \frac{1}{(b+\Delta)-a},\quad \frac{1}{(b+\Delta)-(a-\Delta)},$$

где Δ – малое приращение переменной, $\Delta > 0$, окажется меньше $1/(b-a)$. Следовательно, максимум функции правдоподобия возможен лишь при выполнении условий $\hat{a} = x_1$, а $\hat{b} = x_n$. Соответственно, плотность вероятности равномерного распределения на основании экспериментальных данных определяется как

$$f_{\text{р}}(x) = \frac{1}{x_n - x_1},\quad x_1 \le x \le x_n. \tag{3.31}$$

Тогда выборочные центр распределения $\bar{x}_{\text{р}}$ и СКО $S_{\text{р}}(x)$ выражаются соотношениями

$$\bar{x}_{\text{р}} = \frac{x_1 + x_n}{2}, \tag{3.32}$$

$$S_{\text{р}}(x) = \frac{x_n - x_1}{2\sqrt{3}}. \tag{3.33}$$

Следует обратить внимание на то, что $\bar{x}_{\text{р}}$ не соответствует среднему арифметическому значению, так же как и $S_{\text{р}}(x)$ не соответствует СКО, определяемому по формуле (3.21).

Проиллюстрируем эти различия простым примером. Пусть имеется ряд измерений x: 1, 4, 6, 6, 8. Утверждается, что распределение величины x – равномерное. Тогда $\hat{a} = 1$, а $\hat{b} = 8$ и в соответствии с (3.32), (3.33) $\bar{x}_{\text{р}} = (8+1)/2 = 4{,}5$ и $S_{\text{р}}(x) = (8-1)/2\sqrt{3} = 2{,}0$. Сравним эти значения с $\bar{x} = \frac{1}{5}(1+4+6+6+8) = 5{,}0$ и $S(x) = \sqrt{\frac{1}{4}(16+1+1+1+9)} = 2{,}6$. Различия между $\bar{x}_{\text{р}}$ и $\bar{x}$ и $S_{\text{р}}(x)$ и $S(x)$ оказались весьма существенными.

3.1.3. Оценка параметров распределения Лапласа

Плотность вероятности распределения Лапласа рассчитывается по формуле

$$f_{\text{Л}}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}\sigma_{\text{Л}}(x)} \exp\left(-\frac{\sqrt{2}}{\sigma_{\text{Л}}(x)} \sum_{i=1}^{n} |x_i - \bar{x}| \right). \tag{3.34}$$

Оцениваемыми параметрами являются $\bar{x}$ и $\sigma_{Л}(x)$. Величина $\sigma_{Л}(x)$ представляет собой, как легко убедиться, корень из второго центрального момента распределения (3.34). Однако следует иметь в виду, что оно не соответствует $\sigma(x)$ для нормального закона. Это обстоятельство и отражает индекс «Л».

Функция правдоподобия и ее логарифмическая форма для этого распределения соответственно имеют вид

$$g = \left(\frac{1}{\sqrt{2}\sigma_{Л}(x)} \right)^{n} \cdot \exp\left(-\frac{\sqrt{2}}{\sigma_{Л}(x)} \sum_{i=1}^{n} |x_i - \bar{x}| \right), \tag{3.35}$$

$$L = -n\ln\sqrt{2} - n\ln\sigma_{Л}(x) - \frac{\sqrt{2}}{\sigma_{Л}(x)} \sum_{i=1}^{n} |x_i - \bar{x}|. \tag{3.36}$$

Обратимся к оценкам $\hat{\bar{x}}$ и $\hat{\sigma}_{Л}(x)$. По $\hat{\bar{x}}$ выражения (3.35) и (3.36) не дифференцируются. Однако легко видеть, что максимум функции правдоподобия определяется минимумом величины Y.

$$Y = \sum_{i=1}^{n} |x_i - \hat{\bar{x}}| = \min \tag{3.37}$$

Решение (3.37) осуществляется численно путем подбора такого значения $\hat{\bar{x}}$, при котором Y оказывается минимальным. Оценка параметра $\hat{\sigma}_{Л}(x)$ осуществляется в соответствии с изложенной выше процедурой. Приравняв нулю производную по $\hat{\sigma}_{Л}(x)$ от выражения (3.36), найдем

$$\frac{\partial L}{\partial \hat{\sigma}_{Л}(x)} = -\frac{n}{\hat{\sigma}_{Л}(x)} + \frac{\sqrt{2}}{\hat{\sigma}^{2}_{Л}(x)} \sum_{i=1}^{n} |x_i - \hat{\bar{x}}| = 0,$$

$$\hat{\sigma}_{Л}(x) = \frac{\sqrt{2}}{n} \sum_{i=1}^{n} |x_i - \hat{\bar{x}}|. \tag{3.38}$$

Рассмотрим для примера тот же ряд измерений, что и выше (1, 4, 6, 6, 8), но предположим, что случайная величина распределена по закону Лапласа (3.34). Найдем оценку $\hat{\bar{x}}$, подставляя в условие (3.37) произвольное значение $x^{(\nu)}$, $\nu = 1,2,...$ вместо $\hat{\bar{x}}$. В качестве первого приближения возьмем среднее арифметическое $x^{(1)} = \bar{x} = 5..$ Тогда $Y^{(1)} = 10.$ Зададим $x^{(2)} = 5{,}5$ и найдем $Y^{(2)} = 9{,}5.$ Подставим новое значение $x^{(3)} = 6{,}0$ и рассчитаем $Y^{(3)}$ и т.д. Представим результаты последовательных приближений в виде небольшой таблицы.

v	1	2	3	4	5	6	7
$x^{(v)}$	5	5,5	6,0	6,5	6,25	5,9	6,1
$Y^{(v)}$	10	9,5	9,0	10,5	9,75	9,1	9,4

Таким образом, минимальное значение Y достигается при $x^{(3)} = 6{,}0$. Это значение и является оценкой $\hat{\hat{x}}$.

Вычислим теперь значение $\hat{\sigma}_{Л}(x)$. Подставим в выражение (3.38) $\hat{\hat{x}} = 6{,}0$ и выполним вычисления суммы отклонений. Получим $\hat{\sigma}_{Л}(x) = \frac{\sqrt{2}}{5} \cdot 9 = 2{,}5$. Значения $\hat{\hat{x}}$ и $\hat{\sigma}_{Л}(x)$ снова отличаются от $\bar{x}$ и $S(x)$.

Разумеется, применение изложенного здесь метода оценивания параметров по экспериментальным данным требует априорного знания закона распределения. Проверка соответствия результатов измерений предполагаемому теоретическому распределению будет предметом обсуждения в следующем разделе.

3.2. Доверительные границы погрешности (интервальное оценивание)

3.2.1. Доверительные границы погрешности результатов прямых равноточных измерений

Доверительные границы погрешности результата измерений – верхняя и нижняя границы интервала, накрывающего с заданной вероятностью погрешность измерения.

В соответствии с общим принципом интервального оценивания понятия *доверительный интервал* и *доверительная вероятность* являются неразрывной парой: доверительный интервал, внутри которого находится случайная величина, не имеет смысла без уточнения, с какой доверительной вероятностью можно ожидать случайную величину в этом интервале. И наоборот.

Примечание

Часто в литературе вместо термина доверительная вероятность используются слова надежность, достоверность и другие, которые не отражают истинный вероятностный смысл понятия интервальных оценок. Их применения их следует избегать. Устаревшим, не рекомендованным к использованию, является также термин *толерантные границы*.

В теории измерений вместо словосочетания «доверительный интервал» используют термин *доверительные границы погрешности* (ДГП) в соответствии с приведенным

выше определением. Если распределение погрешностей симметрично относительно среднего значения, то в качестве характеристики можно использовать половину доверительного интервала – доверительную границу погрешности. Обозначим доверительную границу погрешности результата однократного измерения $\varepsilon(x)$, а доверительную границу погрешности результата измерения, то есть среднего значения при многократных измерениях, – $\varepsilon_{\bar{x}}$.

Способы выражения доверительных границ погрешности определяются видом измерительной информации. Рассмотрим различные варианты, переходя от простого к сложному.

1. Однократные измерения.

Предположим, что имеется результат однократного измерения некоторой физической величины x_1. При этом $\sigma(x)$ известно. В каких доверительных границах находится истинное значение x_0? Используем предположение о нормальном распределении случайной величины. Вернемся к обозначениям теории измерений: $x_0 \equiv \mu_1$.

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(x)} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2(x)}\right] \tag{3.39}$$

Центрируем это распределение относительно x_1 (рис. 3.1).

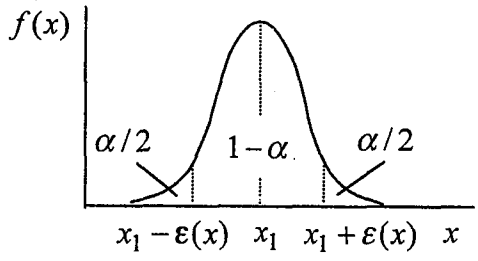


Рис. 3.1. Плотность вероятности нормального распределения $f(x)$, центрированная относительно результата однократного измерения x_1.

Отложим на оси x влево и вправо от x_1 неопределенные пока отрезки $\varepsilon(x)$. Тогда вероятность того, что значение x_0 заключено в интервале $[x_1 - \varepsilon(x), x_1 + \varepsilon(x)]$ можно выразить как

$$P\{x_1 - \varepsilon(x) \le x_0 \le x_1 + \varepsilon(x)\} = \int_{x_1-\varepsilon(x)}^{x_1+\varepsilon(x)} f(x)dx. \tag{3.40}$$

Перейдем к стандартному нормальному распределению, введя переменную

$$z = \frac{x - x_1}{\sigma(x)}. \tag{3.41}$$

В таком случае $\varepsilon(z) = \frac{x_1 + \varepsilon(x) - x_1}{\sigma(x)} = \frac{\varepsilon(x)}{\sigma(x)}$. Аналогично $-\varepsilon(z) = -\frac{\varepsilon(x)}{\sigma(x)}$.

Перепишем условие (3.40):

$$\begin{aligned} &P\{x_1 - \varepsilon(x) \le x_0 \le x_1 + \varepsilon(x)\} = P\{-\varepsilon(z) \le z_0 \le \varepsilon(z)\} = \\ &= \int_{-\varepsilon(z)}^{\varepsilon(z)} \varphi(z)dz = \Phi(\varepsilon(z)) - \Phi(-\varepsilon(z)) = 2\Phi(\varepsilon(z)) = p = 1 - \alpha. \end{aligned} \tag{3.42}$$

Здесь $\varphi(z)$ – плотность стандартного нормального распределения, а $\Phi(z)$ – функция Лапласа (см. раздел 2).

Назовем p доверительной вероятностью, а α – *уровнем значимости*. Уровень значимости – вероятность того, что истинное значение случайной величины не содержится в интервале $[-\varepsilon(z), \varepsilon(z)]$ или $[x_1 - \varepsilon(x), x_1 + \varepsilon(x)]$. Задавая α, обратным преобразованием функции Лапласа найдем $\varepsilon(z)$ по соотношению $\alpha = 1 - 2\Phi(\varepsilon(z))$, где $\varepsilon(z) \equiv z_{1-\alpha/2}$ – квантиль стандартного нормального распределения. Возвращаясь к исходной величине x, по соотношению (3.41) выразим искомые доверительные границы погрешности

$$\varepsilon(x) = z_{1-\alpha/2} \cdot \sigma(x). \tag{3.43}$$

2. Многократные измерения.

Представим себе, что выполнены n измерений той же величины x и получены $x_i, i = \overline{1,n}$. Значение $\sigma(x)$, как СКО генеральной совокупности, по-прежнему известно заранее. Что дает новая информация?

Вычислим среднее значение $\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$. Будем рассматривать теперь распределение $\bar{x}$, которое также является нормальным, но характеризуется СКО

$$\sigma_{\bar{x}} = \frac{\sigma_x}{\sqrt{n}}, \tag{3.44}$$

$$f(\bar{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{\bar{x}}} \cdot \exp\left[-\frac{(\bar{x} - x_0)^2}{2\sigma_{\bar{x}}^2} \right]. \tag{3.45}$$

Плотности вероятности распределения случайной величины x и ее среднего значения $\bar{x}$ представлены на рис. 3.2.

Легко увидеть, что переход от x_1 к $\bar{x}$ приводит к уменьшению рассеяния, то есть к сужению интервала, внутри которого с заданной вероятностью $p = 1 - \alpha$ находится истинное значение случайной величины.

$$\varepsilon_{\bar{x}} = z_{1-\alpha/2} \cdot \sigma_{\bar{x}} = z_{1-\alpha/2} \cdot \frac{\sigma(x)}{\sqrt{n}} \tag{3.46}$$

Соответственно

$$P\{\bar{x} - \varepsilon_{\bar{x}} \le x_0 \le \bar{x} + \varepsilon_{\bar{x}}\} = 1 - \alpha. \tag{3.47}$$

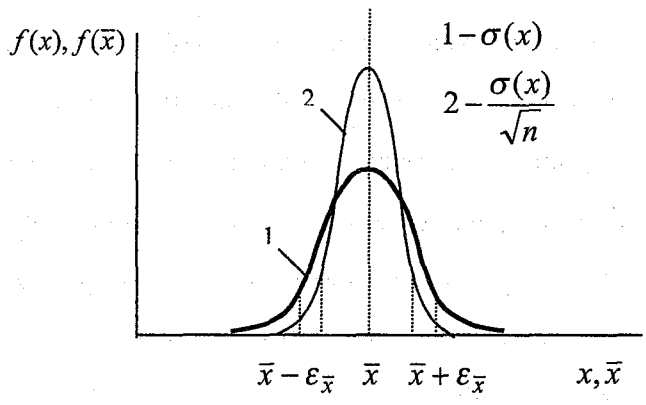


Рис. 3.2. Плотность вероятности нормального распределения $f(x)$ и $f(\bar{x})$.

3. Многократные измерения при неизвестном $\sigma(x)$.

Если значение СКО заранее неизвестно, то по результату однократного измерения нельзя оценить доверительный интервал для x_0. При проведении многократных измерений, как показано выше, оценкой истинного значения $\hat{x}_0$ является $\bar{x}$, а оценкой дисперсии $\hat{\sigma}^2(x)$ выборочная дисперсия $S^2(x)$.

$$S^2(x) = \frac{1}{n-l} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2 \tag{3.48}$$

Выражение (3.48) записано в форме, которая обычно применяется в теории измерений. Здесь в отличие от (3.21) вводится понятие числа связей l, налагаемых на выборку при вычислении статистической характеристики. Разность $f = n - l$ называют числом степеней свободы вычисляемого параметра. Например для вычисления дисперсии требу-

ется сначала найти по той же выборке среднее значение. Следовательно число степеней свободы для дисперсии составит $f = n-1$. В дальнейшем мы будем часто использовать этот подход.

Полученное по ограниченной выборке $S(x)$ не равно $\sigma(x)$, так как является случайной величиной. Имеет место асимптотическое выражение

$$\lim_{n\to\infty} S(x) = \sigma(x). \tag{3.49}$$

Выборочное СКО $S(x)$ может быть и больше, и меньше $\sigma(x)$. Подчеркнем это обстоятельство особо, поскольку в технической литературе часто встречается ошибочное представление, что для малых выборок $S(x) < \sigma(x)$. Далее из этой неверной посылки делается заключение о том, что подстановка $S(x)$ вместо $\sigma(x)$ в выражение (3.46) приводит к сужению доверительного интервала для x_0 и следовательно к завышению качества измерений. Действительно, такая замена является некорректной, но суть дела заключается в другом. Выражение (3.46) получено для нормального распределения с известным $\sigma(x)$. Именно при этих условиях задаются квантильные значения $z_{1-\alpha}$. Замена $\sigma(x)$ на $S(x)$ требует переоценки квантильных значений функции распределения. При этом последняя становится не нормальной. Задача решается путем перехода к другому теоретическому распределению – распределению Стьюдента (или t-распределению).

Безразмерная случайная величина

$$t = \frac{\bar{x} - x_0}{S_{\bar{x}}} = \frac{\bar{x} - x_0}{S(x)} \cdot \sqrt{n} \tag{3.50}$$

имеет плотность вероятности

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi(n-1)}} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)} \cdot \left(1 + \frac{t^2}{n-1}\right)^{\frac{n}{2}}, \quad -\infty < t < \infty. \tag{3.51}$$

Плотность вероятности t-распределения зависит не только от t, но и от объема выборки. При $n \to \infty$ $f(t)$ стремится к стандартному нормальному распределению.

$$\lim_{n\to\infty} f(t) = \varphi(z) \tag{3.52}$$

В выражении (3.51) $\Gamma(n/2)$ и $\Gamma((n-1)/2)$ – гамма-функции (см. раздел 2).

Рассчитанная при различных n зависимость $f(t)$ представлена на рис. 3.3.

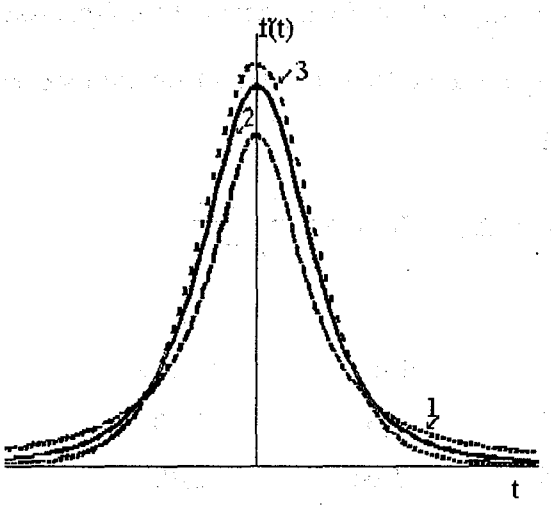


Рис. 3.3. Плотность вероятности t-распределения (распределения Стьюдента) при различных значениях n. $n_1 < n_2 < n_3$.

Легко увидеть, что t-распределение при малых значениях n характеризуется более пологим спадом кривой $f(t)$. Число степеней свободы для t определяется числом степеней свободы $S(x)$, входящим в t, т.е. $f = n-1$. Тогда квантильное значение $t_{p,f}$ находится из соотношения

$$P\{t < t_{p,f}\} = F(t_{p,f}) = \int_{-\infty}^{t_{p,f}} f(t)dt = p = 1-\alpha. \tag{3.53}$$

Имея в виду, что $f(t)$ симметрична относительно нуля ($t_0 = 0$),

$$-t_{\alpha/2,f} = t_{1-\alpha/2,f}. \tag{3.54}$$

Таким образом

$$P\{t_{\alpha/2,f} \le t \le t_{1-\alpha/2,f}\} = \int_{t_{\alpha/2,f}}^{t_{1-\alpha/2,f}} f(t)dt = \int_{-t_{1-\alpha/2,f}}^{t_{1-\alpha/2,f}} f(t)dt. \tag{3.55}$$

Теперь, возвращаясь к (3.50), доверительные границы погрешности результата измерений $\bar{x}$ можно определить как

$$\varepsilon_{\bar{x}} = t_{1-\alpha/2,f} \cdot S_{\bar{x}} = t_{1-\alpha/2,f} \cdot \frac{S(x)}{\sqrt{n}}. \tag{3.56}$$

Значение $t_{1-\alpha/2,f}$ (или $t_{1-\alpha,f}$) затабулированы (см. *Приложение II*). Для наиболее часто используемых значений ($\alpha = 0{,}10$ и $\alpha = 0{,}05$) табличные данные можно аппроксимировать простой формулой

$$t_{1-\alpha/2,f} = z_{1-\alpha/2} + \frac{b_{1-\alpha/2}}{f-1}. \tag{3.57}$$

α	$z_{1-\alpha/2}$	$b_{1-\alpha/2}$
0,10	1,64	1,30
0,05	1,96	2,40

4. Представление результатов.

Если рассчитываются доверительные границы погрешности (ДГП) результатов отдельного измерения $\varepsilon(x)$ или доверительные границы погрешности результата измерения (ДГПРИ) $\varepsilon_{\bar{x}}$, то результаты представляются либо полными выражениями

$$\begin{aligned} &P\{x_1 - \varepsilon(x) \le x_0 \le x_1 + \varepsilon(x)\} = 1-\alpha, \\ &P\{\bar{x} - \varepsilon_{\bar{x}} \le x_0 \le \bar{x} + \varepsilon_{\bar{x}}\} = 1-\alpha, n = \ldots \end{aligned} \tag{3.58}$$

либо сокращенно

$$\begin{aligned} &x = x_1 \pm \varepsilon(x), \quad p = 1-\alpha, \\ &x = \bar{x} \pm \varepsilon_{\bar{x}}, \quad p = 1-\alpha, \quad n = \ldots \end{aligned} \tag{3.59}$$

Указание вероятности является обязательным, поскольку используемые для вычисления $\varepsilon(x)$ и $\varepsilon_{\bar{x}}$ значения $z_{1-\alpha/2}$ и $t_{1-\alpha/2,f}$ зависят от выбранной доверительной вероятности.

Примеры

1. На лабораторных весах выполняются измерения массы некоторого образца. Точность взвешивания известна, она характеризуется значением $\sigma(m) = 0{,}04$ г. Выполнено одно измерение $m = 2{,}24$ г.

Каковы доверительные границы погрешности при $\alpha = 0{,}05$?

Ответ: $\varepsilon(m) = z_{1-\alpha/2} \cdot \sigma(m) = 1{,}96 \cdot 0{,}04 \approx 0{,}08$;

$P\{2{,}16 < m_0 < 2{,}32\} = 0{,}95$ или $m = (2{,}24 \pm 0{,}08)$ г, $p = 0{,}95$.

2. Выполнены четырехкратные измерения массы:

$n = 4$, $\bar{m} = 2{,}24$ г. Как и раньше $\sigma(m) = 0{,}04$ г, $p = 0{,}95$. Каковы ДГПРИ?

Ответ: $\varepsilon_{\overline{m}} = \dfrac{1{,}96 \cdot 0{,}04}{\sqrt{4}} \approx 0{,}04;$

$P\{2{,}20 < m_0 < 2{,}28\} = 0{,}95$ или $m = (2{,}24 \pm 0{,}04)$ г, $p = 0{,}95$, $n = 4$.

3. После проведения серии измерений, описанных в примере 2, оказалось, что весы были подвергнуты профилактическому осмотру и небольшому ремонту. Таким образом, значение СКО $\sigma(m)$ стало неопределенным, Найденное по результатам измерений значение $S(m) = 0{,}04$ г. Найти ДГПРИ при $\alpha = 0{,}05$.

Ответ: $\varepsilon_{\overline{m}} = t_{1-\alpha/2,f} \cdot \dfrac{S(m)}{\sqrt{n}}$; $f = 4 - 1 = 3$; $t_{1-0{,}05/2,3} = 3{,}18$; $\varepsilon_{\overline{m}} = 3{,}18 \cdot \dfrac{0{,}04}{\sqrt{4}} = 3{,}18 \cdot 0{,}02 \approx 0{,}06;$

$P\{2{,}18 \le m_0 \le 2{,}30\} = 0{,}95$; $m = (2{,}24 \pm 0{,}06)$ г, $p = 0{,}95$, $n = 4$.

5. Планирование числа измерений.

Как следует из выражений (3.46), (3.56) при заданной доверительной вероятности ДГПРИ могут быть уменьшены путем увеличения числа измерений n. Эти соотношения в свою очередь можно использовать для планирования числа измерений, если допустимые границы погрешности задаются заранее. Тогда, при известном СКО, минимальное число измерений определяется решением (3.46) относительно n.

$$n = \left(\frac{z_{1-\alpha/2} \cdot \sigma(x)}{\varepsilon_{\overline{x}}} \right)^2 \qquad (3.60)$$

Из выражения (3.56), задавая $\varepsilon_{\overline{x}}$ в долях от $S(x)$, получим

$$n = \left(\frac{t_{1-\alpha/2,f} \cdot S(x)}{\varepsilon_{\overline{x}}} \right)^2 . \qquad (3.61)$$

При этом следует иметь в виду, что $t_{1-\alpha/2,f}$ также является функцией n. Задача может быть решена либо путем подбора n с использованием *Приложения II*, либо подстановкой выражения (3.57) в формулу (3.61).

Задачи

1. Погрешность измерения величины A характеризуется СКО $\sigma(A) = 0{,}2$. Какое минимальное число измерений A следует выполнить, чтобы ДГПРИ удовлетворяли условию $\varepsilon_{\overline{A}} \le 0{,}1$ при $\alpha = 0{,}05$?
2. Какое минимальное число измерений случайной величины B следует задать в плане эксперимента, чтобы ДГПРИ при доверительной вероятности 90 % удовлетворяли условию $\varepsilon_{\overline{B}} \le 0{,}75S(B)$?

   Другой вариант: $\varepsilon_{\overline{B}} \le S(B)$ при $\alpha = 0{,}01$.

3.2.2. Доверительные границы погрешности среднего квадратического отклонения

Выборочное среднее квадратическое отклонение $S(x)$, как и всякая оценка, полученная по ограниченной выборке, является случайной величиной. Если выполнено несколько серий измерений одной и той же физической величины, то отличающимися друг от друга будут не только средние значения, но и СКО. Ранее, в этом разделе были получены дисперсии точечных оценок дисперсий как генеральной совокупности σ_σ^2, так и выборочной S_S^2 (формулы (3.28) и (3.29)). Переходя к соответствующим СКО, получим

$$\sigma_\sigma = \frac{\sigma(x)}{\sqrt{2n}}, \tag{3.62}$$

$$S_S = \frac{S(x)}{\sqrt{2f}},\ f = n-1. \tag{3.63}$$

Чтобы оценить интервал, в котором с заданной вероятностью находится истинное значение $\sigma(x)$, необходимо знать распределение $S(x)$ относительно $\sigma(x)$. Для оценивания доверительных границ погрешности СКО воспользуемся хорошо изученным в математической статистике χ^2-распределением. Показано, что величина

$$\chi^2 = \frac{f \cdot S^2(x)}{\sigma^2(x)} \tag{3.64}$$

имеет распределение $f(\chi^2)$. Плотность χ^2 - распределения

$$f\left(\chi^2\right) = \begin{cases} \dfrac{1}{2^{n/2}\Gamma\left(\dfrac{n}{2}\right)} \cdot \left(\chi^2\right)^{\frac{n-2}{2}} \cdot \exp\left(-\dfrac{\chi^2}{2}\right), & \chi^2 > 0, \\ 0, & \chi^2 \le 0. \end{cases} \tag{3.65}$$

Плотность вероятности χ^2, как легко видеть, изменяется с изменением объема выборки. При этом доказывается, что при $n \to \infty$ χ^2-распределение превращается в нормальное. Характер изменения $f(\chi^2)$ с увеличением n иллюстрирует рис. 3.4.

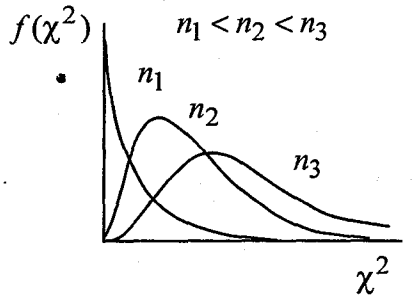


Рис. 3.4. Плотность вероятности χ^2-распределения при различных значениях n.

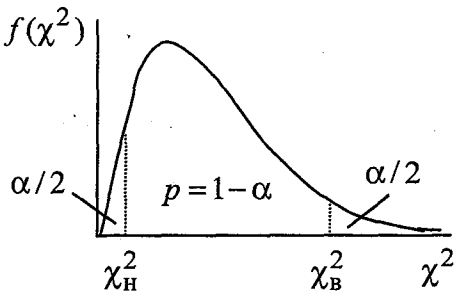


Рис. 3.5. Доверительная область нахождения случайной величины χ^2 с вероятностью $1-\alpha$.

На рис 3.5 показаны доверительная область и доверительные границы для χ^2 при некотором значении n. Значения $\chi^2_н$ (н – нижняя граница) и $\chi^2_в$ (в – верхняя граница) можно трактовать как квантили распределения χ^2 при заданных вероятностях $\chi^2_н = \chi^2_{\alpha/2;f}$ и $\chi^2_в = \chi^2_{1-\alpha/2;f}$.

Запишем как обычно вероятность того, что χ^2 заключена в интервале $\left[\chi^2_н, \chi^2_в\right]$:

$$P\{\chi^2_н \le \chi^2 \le \chi^2_в\} = 1-\alpha. \tag{3.66}$$

Подставим выражение (3.64) в условие (3.66).

$$P\left\{\chi^2_н \le \frac{f \cdot S^2(x)}{\sigma^2(x)} \le \chi^2_в\right\} = 1-\alpha \tag{3.67}$$

Выполним преобразования двойного неравенства в фигурных скобках, не изменяющие однако его вероятностного содержания: извлечем корень из всех трех членов неравенства и перевернем дроби (поменяем местами числители и знаменатели), соответственно изменив на противоположные знаки неравенств.

$$P\left\{\frac{1}{\sqrt{\chi^2_н}} \ge \frac{\sigma(x)}{S(x)\sqrt{f}} \ge \frac{1}{\sqrt{\chi^2_в}}\right\} = 1-\alpha \tag{3.68}$$

Умножим теперь все члены неравенств на $S(x)\sqrt{f}$ и переставим крайние члены неравенств.

$$P\left\{S(x)\sqrt{\frac{f}{\chi^2_{\text{в}}}} \le \sigma(x) \le S(x)\sqrt{\frac{f}{\chi^2_{\text{н}}}}\right\} = 1-\alpha \qquad (3.69)$$

Выражение в фигурных скобках представляет собой доверительные границы для истинного значения $\sigma(x)$, определенные через его выборочную оценку $S(x)$. Значения параметра $\chi^2_{p,f}$ затабулированы (см. *Приложение III*). При числе степеней свободы $f > 30$ рекомендуются аппроксимирующие формулы

$$\chi^2_{\text{н}} \equiv \chi_{\alpha/2,f} = \frac{1}{2}\left(\sqrt{2f-1} - z_{1-\alpha/2}\right)^2, \qquad (3.70\text{а})$$

$$\chi^2_{\text{в}} \equiv \chi_{1-\alpha/2,f} = \frac{1}{2}\left(\sqrt{2f-1} + z_{1-\alpha/2}\right)^2. \qquad (3.70\text{б})$$

где $z_{1-\alpha/2}$ – квантиль стандартного нормального распределения.

Поскольку χ^2 зависит от f, в выражении (3.69) удобно перейти к величине $\gamma_{p,f} = \sqrt{\frac{f}{\chi^2_{p,f}}}$. Тогда доверительные границы для $\sigma(x)$ можно записать в виде

$$P\{\gamma_{\alpha/2;f} S(x) \le \sigma(x) \le \gamma_{1-\alpha/2;f} S(x)\} = 1-\alpha. \qquad (3.71)$$

Значения $\gamma_{p,f}$ затабулированы. Таблицы γ можно найти в справочной литературе. Приведем здесь только небольшой фрагмент таблицы параметра $\gamma_{p,f}$ для $\alpha = 0{,}10$.

f	$\gamma_{0{,}10/2;f}$	$\gamma_{1-0{,}10/2;f}$
1	0,51	16
2	0,58	4,4
3	0,62	2,9
4	0,64	2,4
5	0,67	2,1
8	0,72	1,7
10	0,74	1,6
12	0,76	1,5
15	0,77	1,4
20	0,80	1,4
25	0,81	1,3
30	0,83	1,3

Если подставить выражения (3.70) в (3.71), то с небольшими упрощениями можно получить выражения для $\gamma_{p,f}$.

$$\gamma_{\alpha/2,f} = \frac{1}{1+\frac{z_{1-\alpha/2}}{\sqrt{2f}}}, \tag{3.72а}$$

$$\gamma_{1-\alpha/2,f} = \frac{1}{1-\frac{z_{1-\alpha/2}}{\sqrt{2f}}}. \tag{3.72б}$$

Или еще проще

$$\gamma_{\alpha/2,f} = 1-\frac{z_{1-\alpha/2}}{\sqrt{2f}}, \tag{3.73а}$$

$$\gamma_{1-\alpha/2,f} = 1+\frac{z_{1-\alpha/2}}{\sqrt{2f}}. \tag{3.73б}$$

Теперь произведения $\gamma_{\alpha/2,f} \cdot S(x)$ или $\gamma_{1-\alpha/2,f} \cdot S(x)$ можно представить в виде

$$\gamma_{\alpha/2;f} \cdot S(x) = S(x) - z_{1-\alpha/2} \cdot \frac{S(x)}{\sqrt{2f}} = S(x) - z_{1-\alpha/2} \cdot S_S, \tag{3.74а}$$

$$\gamma_{1-\alpha/2;f} \cdot S(x) = S(x) + z_{1-\alpha/2} \cdot \frac{S(x)}{\sqrt{2f}} = S(x) + z_{1-\alpha/2} \cdot S_S. \tag{3.74б}$$

При этом $S_S = \frac{S(x)}{\sqrt{2f}}$, что в точности совпадает с (3.63).

Пример

Обратимся снова к рассмотренному ранее в разделе 3.2.1 примеру со взвешиванием образца (п.3): $n = 4$, $\overline{m} = 2{,}24$ г, $S(m) = 0{,}042$ г. Оценим сначала доверительные границы $\sigma(m)$. Пусть $\alpha = 0{,}10$, так что $P\{\gamma_{0,10/2;3} \cdot S(m) \le \sigma(m) \le \gamma_{1-0,10/2;3} \cdot S(m)\} = 0{,}90$. Из таблицы $\gamma_{0,10/2;3} = 0{,}62$, $\gamma_{1-0,10/2;3} = 2{,}9$. Таким образом $P\{0{,}02604 \le \sigma(m) \le 0{,}12118\} = 0{,}90$. Сравнивая доверительные границы $\sigma(m)$ со значением $S(m) = 0{,}042$, легко убедиться, что даже первая значащая цифра является недостоверной: значения $\sigma(m)$ заключены в интервале от ≈ 0,03 до ≈0,12, то есть оценка $\sigma(m)$ является очень грубой. В связи с этим представление ответа, выраженного числом с четырьмя значащими цифрами, создает иллюзию точности.

Следовательно, эти ответы требуют округления: $P\{0{,}03 \le \sigma(m) \le 0{,}12\} = 0{,}90$. Доверительные границы результата измерения $\varepsilon_{\overline{m}} = 3{,}18\frac{0{,}042}{\sqrt{4}} = 0{,}0668$ следует округлить до той же значащей цифры, что и характеристику погрешности, то есть $\varepsilon_{\overline{m}} = 0{,}07$.

Окончательный *ответ*: $P\{2{,}17 \le m_0 \le 2{,}31\} = 0{,}95$ или $\overline{m} = (2{,}24 \pm 0{,}07)$ г, $p = 0{,}95$.

Правила округления

1. Результат измерения округляется до десятичного знака, которым оканчивается округленное значение его абсолютной погрешности.
2. Когда в полученной оценке погрешности недостоверна даже первая значащая цифра, ответ округляется до двух значащих цифр, если первая из них 1 или 2, и до одной, если первая цифра 3 и более.
3. Округление производится лишь в окончательном ответе, все предварительные расчеты выполняются по крайней мере с одним лишним десятичным разрядом.

Задачи

1. Выполнено 400 измерений некоторой величины B. В результате обработки на ПК получено: $B = 23{,}472986$, $S(B) = 0{,}3685271$. Выразите доверительные границы погрешности результата измерений и среднего квадратического отклонения в соответствии с правилами округления ($\alpha = 0{,}05$).

2. Плотность вероятности показательного распределения описывается выражением $f_{\text{п}}(x) = A\exp(-\lambda x)$, $x \geq 0$. Выразите коэффициент A через параметр распределения λ и получите оценку этого параметра.

ОБРАБОТКА РЕЗУЛЬТАТОВ ИЗМЕРЕНИЙ. ПРОВЕРКА ГИПОТЕЗЫ СООТВЕТСТВИЯ ЭМПИРИЧЕСКОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПОГРЕШНОСТЕЙ ТЕОРЕТИЧЕСКОМУ

4.1. Общие принципы проверки статистических гипотез

Методы и модели математической статистики находят широкое применение при анализе экспериментальных данных в различных областях научных исследований. Однако следует подчеркнуть, что математическая статистика не дает исследователю ни способов, ни алгоритмов открытия новых физических законов или обнаружения неизвестных ранее зависимостей. Методы математической статистики могут служить только средством проверки предположений и догадок, которые выдвигаются исследователем при анализе результатов эксперимента. Сделанные при этом выводы и заключения носят не императивный "или – или", а вероятностный характер. Математическая статистика предоставляет возможность оценить или задать заранее вероятности, с которыми предположения могут быть приняты или отвергнуты.

Разнообразие исследовательских задач формализуется в разделе математической статистики, называемом *теорией проверки статистических гипотез*. В кратком изложении этот подход сводится к следующему.

Предположим, что исследуется некоторое свойство C случайной величины (вид распределения, параметр распределения, зависимость от внешних факторов и др.).

Вычисляемое по экспериментальным данным свойство C также является случайной величиной. Его значения изменяются от выборки к выборке, но они могут изменяться и потому, что изучаемое свойство изменяется под действием каких-либо управляемых или неуправляемых факторов. Как отличить случайные изменения свойства C от детерминированных? Ответ прост: следует сравнить выборочное значение C с известной (или предполагаемой) оценкой истинного значения C_0 (либо с другими выборочными значениями $C_2, C_3, \ldots$). Остановимся на первом варианте.

Выдвинем две гипотезы: нулевую и альтернативную. Нулевая H_0 утверждает, что различия между C_0 и C_1 незначимы, они определяются только случайностью отбора данных. Альтернативная (конкурирующая) H_1 утверждает, что различия между C_0 и C_1 неслучайны и значимы. Гипотезы записываются следующим образом:

$$H_0 : C_0 = C_1 \text{ и } H_1 : C_0 \neq C_1 . \qquad (4.1)$$

Альтернативная гипотеза может быть сформулирована и по-другому. Если, например, целью исследования является не только установление факта $C_0 \neq C_1$, но и определение знака неравенства, то H_1 можно выразить как $H_1 : C_0 < C_1$ или $H_1 : C_0 > C_1$.

Далее задача заключается в том, чтобы выбрать одну из гипотез: H_0 или H_1. Прежде всего надо определить диапазон возможных значений свойства C, не противоречащих нулевой гипотезе (область допустимых значений для H_0), и критическую область (области), при попадании в которую (которые) свойства C следует принять альтернативную гипотезу – рис. 4.1.

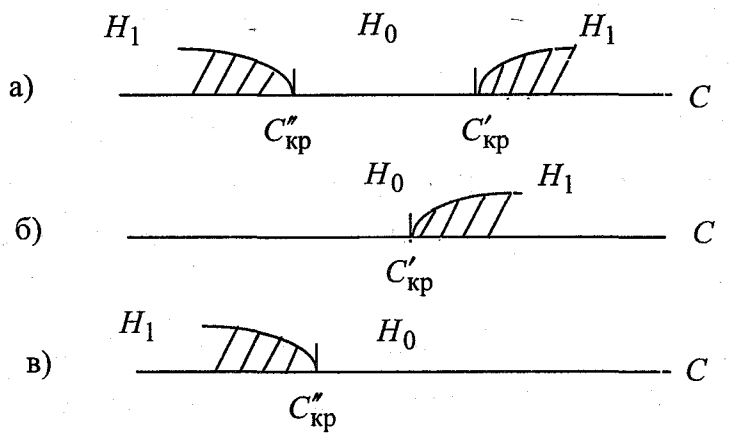


Рис. 4.1. Схематическое изображение области значений свойства C, соответствующей нулевой гипотезе H_0, и критических областей (заштрихованы), являющихся условием принятия альтернативной гипотезы H_1 :

а) $C_0 \neq C_1$ (двухсторонняя критическая область), б) $C_0 < C_1$ и в) $C_0 > C_1$ (односторонние критические области).

Критические значения $C''_{кр}$ и $C'_{кр}$ являются границами перехода из области выполнения H_0 в область принятия H_1 – двухстороннюю (рис.4.1а) или односторонние (рис.4.1б и 4.1в). При оговоренной заранее вероятности p попадания свойства C в область выполнения H_0 критические значения $C_{кр}$ представляют собой соответственно квантили распределения $C'_{кр} = C_{p'}$ и $C''_{кр} = C_{p''}$, $p = p' - p''$. Решающее правило принятия одной из гипотез строится на сравнении полученных по экспериментальным данным значений свойства C с критическими.

Одним из практических приложений теории является задача проверки гипотезы соответствия эмпирического распределения результатов измерений нормальному закону. Важность этой задачи столь велика, что ее называют основной гипотезой. Ниже рассматриваются методы проверки гипотезы о нормальности эмпирического распределения случайной величины (случайной погрешности), хотя в принципе большинство из них можно распространить и на другие виды распределений.

4.2. Графические методы

Статистические методы являются в известной мере формальными. При использовании пакетов прикладных программ можно обойтись без предварительного графического анализа. Однако такой анализ нам кажется чрезвычайно полезным. Зрительное представление результатов измерений позволяет выявить особенности или закономерности, которые порой не отражает формальный анализ.

4.2.1. Гистограмма и эмпирическое распределение

Простым и наглядным способом графического представления результатов эксперимента является гистограмма. Если весь диапазон полученных значений x от $x_{\text{мин}}$ до $x_{\text{макс}}$ разбить на k интервалов (градаций) шириной h со средними значениями каждого из интервалов $\bar{x}_j$, $j=\overline{1,k}$, $h=\bar{x}_{j+1}-\bar{x}_j$, то

$$k \approx (x_{\text{макс}} - x_{\text{мин}})/h. \qquad (4.2)$$

Знак примерного равенства в (4.2) отражает то обстоятельство, что ширина интервала h выбирается из соображений удобства, а значение k округляется, естественно, до целого. Гистограмма строится по числу результатов измерений n_j, попадающих в соответствующий интервал, либо по значениям частоты, вычисленной как n_j/n. Искусство построения гистограммы заключается в правильном выборе числа интервалов k в зависимости от объема выборки n.. На рис. 4.2 показано, как при одном и том же объеме выборки может изменяться вид гистограммы, если менять число интервалов. При малом k распределение представляется монотонно убывающим с увеличением x, а при большом – многомодальным. Практикой выработаны различные рекомендации выбора k.

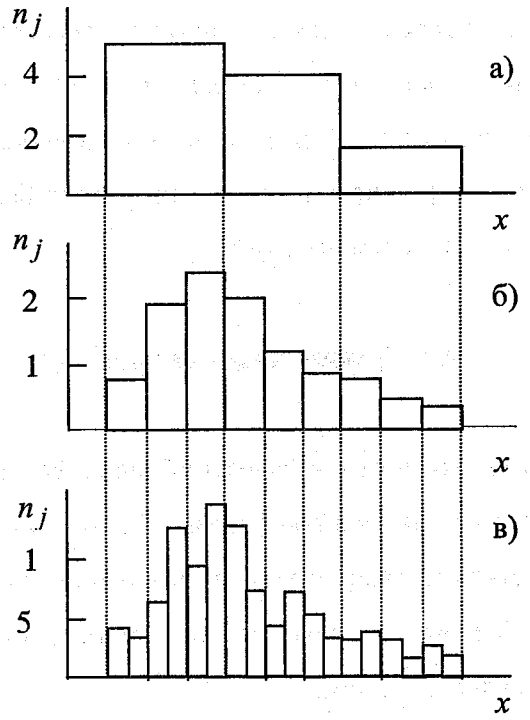


Рис. 4.2. Изменение формы гистограммы, построенной по одной и той же выборке объема $n = 100$, при различном числе интервалов.

а) $k = 3$, б), $k = 9$, в) $k = 18$.

Приведем здесь несколько формул

$$k = 1 + 3{,}2 \cdot \lg n, \tag{4.3}$$

$$k = 5 \cdot \lg n, \tag{4.3б}$$

$$0{,}55n^{0{,}4} < k < 1{,}25n^{0{,}4}. \tag{4.3в}$$

ГОСТ рекомендует следующие значения k при различных n:

n	40-100	100-500	500-1000	1000-10000
k	7-9	8-12	10-16	12-22

Легко убедиться, что формулы 4.3 и рекомендации ГОСТа дают близкие значения k в широком диапазоне n. В соответствии с этими рекомендациями для анализируемой выборки оптимальным является вариант, приведенный на рис. 4.2б (k=9).

Уже качественный анализ гистограммы позволяет выявить основные черты эмпирического распределения – симметричность, одно- или многомодальность и др. Обнаружение явной бимодальности может служить основанием для предположения о неоднородности ряда измерений.

Эмпирическая функция распределения (эмпирическое распределение, выборочное распределение) является другой формой графического представления результатов измере-

ний. Ее определяют как $F_j = \sum_{j=1}^{j} \frac{n_j}{n}$, то есть как дискретную функцию распределения для ограниченной выборки. Естественно, $0 \le F_j \le 1$.

В качестве примера на рис. 4.3 и 4.4 показаны соответственно гистограмма и эмпирическая функция распределения. Исходная информация и результаты вычислений, необходимые для этого, содержатся в табл. 4.1. Там же приведены и другие характеристики эмпирического распределения, которые будут рассмотрены ниже.

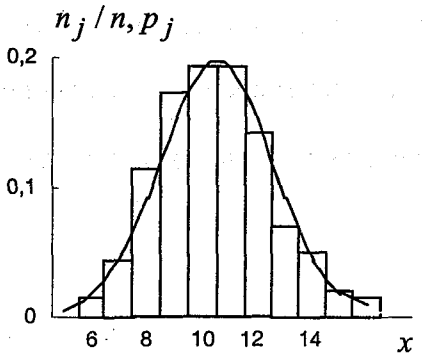


Рис. 4.3. Совмещение гистограммы Эмпирического распределения с кривой p_j для нормального распределения.

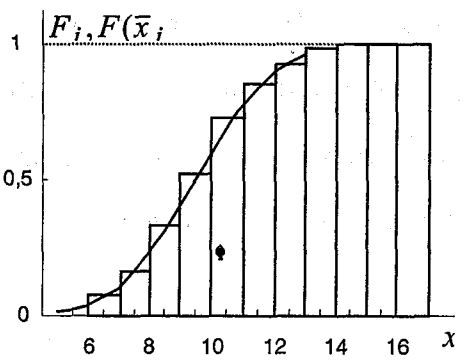


Рис. 4.4. Совмещение эмпирической функции распределения F_j с теоретической $F(x)$.

$\bar{x} = 10{,}0;\ \sigma(x) = 2{,}0;\ \text{А} = 0{,}29;\ \text{Э} = -0{,}25;\ \sigma(\text{А}) = 0{,}24,\ \sigma(\text{Э}) = 0{,}45.$

Внешний вид гистограммы служит основанием для предположения о нормальности распределения результатов измерений (точнее говоря, о нормальности распределения той генеральной совокупности, из которой извлечена выборка). Следующим шагом графического анализа является сопоставление эмпирического и теоретического распределений.

Таблица 4.1

Результаты обработки сгруппированного ряда измерений

j	$x_{j,\text{мин}}$ $x_{j,\text{макс}}$	$\bar{x}_j$	n_j	$\sum_{j=1}^{j} n_j$	F_j	$\bar{z}_j$	p_j	$F(\bar{x}_j)$	F'_j	$z_{F'_j}$
1	5...6	5,5	1	1	0,01	-2,25	0,017	0,012	0,010	-2,33
2	6...7	6,5	4	5	0,05	-1,75	0,044	0,040	0,049	-1,65
3	7...8	7,5	11	16	0,16	-1,25	0,092	0,106	0,158	-1,00
4	8...9	8,5	17	33	0,33	-0,75	0,150	0,227	0,327	-0,45
5	9...10	9,5	19	52	0,52	-0,25	0,192	0,401	0,515	0,04
6	10...11	10,5	19	71	0,71	0,25	0,192	0,599	0,703	0,53
7	11...12	11,5	14	85	0,85	0,75	0,150	0,773	0,842	1,00
8	12...13	12,5	7	92	0,92	1,25	0,092	0,894	0,911	1,35
9	13...14	13,5	5	97	0,97	1,75	0,044	0,960	0,960	1,75
10	14...15	14,5	2	99	0,99	2,25	0,017	0,988	0,980	2,05
11	15...16	15,5	1	100	1,00	2,75	0,005	0,997	0,990	2,33

Чтобы рассчитать плотность нормального распределения

$$f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(x)}\exp\left[-\frac{(x-\bar{x})^2}{2\sigma^2(x)}\right] \tag{4.4}$$

и теоретическую функцию распределения

$$F(x)=\int_{-\infty}^{x} f(x)dx, \tag{4.5}$$

сначала по выборочным данным следует найти $\bar{x}$ и $\sigma(x)$. При объеме выборки $n=100$ практически $S(x)=\sigma(x)$. Благодаря этому для расчетов можно использовать формулы (4.4) и (4.5). Если отношение n_j/n отражает долю результатов измерений, попадающих в j-ый интервал, то для сравнения следует рассчитать аналогичную долю, определяемую теоретическим распределением (4.4).

$$p_j=\int_{\bar{x}_j-\frac{h}{2}}^{\bar{x}_j+\frac{h}{2}} f(x)dx. \tag{4.6}$$

Перейдем к стандартному нормальному распределению: $\bar{z}_j=\frac{\bar{x}_j-\bar{x}}{\sigma(x)}$, $h_z=\frac{h}{\sigma(x)}$.

Теперь перепишем (4.6) в виде

$$p_j=\int_{\bar{z}_j-\frac{h_z}{2}}^{\bar{z}_j+\frac{h_z}{2}}\varphi(z)dz=\Phi(\bar{z}_j+\frac{h_z}{2})-\Phi(\bar{z}_j-\frac{h_z}{2}), \tag{4.7}$$

где $\Phi(z)$ – функция Лапласа. При большом k (и большом n) можно воспользоваться приближенным соотношением

$$p_j\approx f(\bar{x}_j)\cdot h=\varphi(\bar{z}_j)\cdot h_z. \tag{4.8}$$

Теоретическую функцию распределения $F(\bar{x}_j)$ найдем как

$$F(\bar{x}_j)=F(\bar{z}_j)=\frac{1}{2}+\Phi(\bar{z}_j) \tag{4.9}$$

либо как

$$F(\bar{x}_j)=F(\bar{z}_j)=\sum_{j=1}^{j} p_j. \tag{4.10}$$

Для анализируемой выборки в табл. 4.1 приведены результаты расчетов p_j и $F(\bar{x}_j)$. Эти значения нанесены, соответственно, на рис. 4.3 и 4.4. Пример демонстрирует

на первый взгляд очень хорошее соответствие эмпирического и теоретического распределений. Выполним, однако, количественную оценку такого соответствия. С этой целью рассчитаем коэффициенты асимметрии А и эксцесса Э. Коэффициенты асимметрии и эксцесса для сгруппированных данных рассчитываются по формулам

$$A = \frac{\frac{1}{n-1}\sum_{j=1}^{k} n_j(\bar{x}_j - \bar{x})^3}{\sigma^3(x)}, \tag{4.11}$$

$$Э = \frac{\frac{1}{n-1}\sum_{j=1}^{k} n_j(\bar{x}_j - \bar{x})^4}{\sigma^4(x)} - 3. \tag{4.12}$$

Полученные по анализируемой выборке значения составили А = 0,29 и Э = −0,25. Существенны ли эти отклонения от нуля? Может быть, они являются просто следствием случайности отбора? Или это результат действия каких-либо факторов? Теперь мы имеем дело с типичной задачей проверки статистических гипотез. Сформулируем их

$$H_0 : A_1 = A_0,\ Э_1 = Э_0, \text{ либо } A_1 = 0,\ Э_1 = 0,$$

$$H_1 : A_1 \neq A_0,\ Э_1 \neq Э_0, \text{ либо } A_1 \neq 0,\ Э_1 \neq 0,$$

(поскольку для нормального закона $A_0 = Э_0 = 0$).

Проверка гипотез (в первом грубом приближении) может быть выполнена, если сравнить коэффициенты А и Э с возможными погрешностями их определения. СКО А и Э вычисляют по формулам

$$\sigma(A) = \sqrt{\frac{6(n-1)}{(n+1)(n+3)}}, \tag{4.13}$$

$$\sigma(Э) = \sqrt{\frac{24n(n-2)(n-3)}{(n+1)^2(n+3)(n+5)}}. \tag{4.14}$$

Примечание

Часто в литературе для $\sigma(A)$ и $\sigma(Э)$ рекомендуются формулы

$$\sigma(A) = \sqrt{\frac{6}{n}}, \tag{4.13а}$$

$$\sigma(Э) = \sqrt{\frac{24}{n}}, \tag{4.14а}$$

которые представляют собой предельные формы (4.13) и (4.14) при больших n. Однако при ограниченных n замена (4.13), (4.14) на (4.13а), (4.14а) может привести к значительным погрешностям.

Решающее правило проверки гипотез:

$$|\text{А}| \le 3\sigma(\text{А}) \Rightarrow H_0, \qquad |\text{А}| > 3\sigma(\text{А}) \Rightarrow H_1,$$
$$|\text{Э}| \le 4{,}5\sigma(\text{Э}) \Rightarrow H_0, \qquad |\text{Э}| > 4{,}5\sigma(\text{Э}) \Rightarrow H_1. \qquad (4.15)$$

Распределение считается нормальным, если и А, и Э удовлетворяют нулевой гипотезе. Если А, либо Э, либо и А, и Э не удовлетворяют H_0, распределение не является нормальным.

Значения коэффициентов 3 и 4,5 соответствуют уровню значимости $\alpha = 0{,}05$. Обоснование их будет дано позднее (см. раздел 4.5).

Для анализируемого ряда $\sigma(\text{А}) = 0{,}24$ и $\sigma(\text{Э}) = 0{,}45$. Таким образом, модули обоих коэффициентов находятся в области допустимых значений для нулевой гипотезы – эмпирическое распределение можно рассматривать как нормальное.

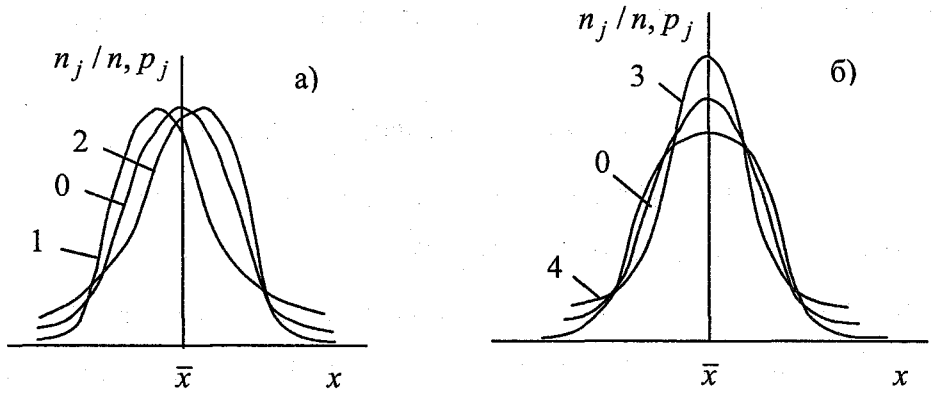


Рис. 4.5. Сопоставление сглаженных эмпирических гистограмм с нормальным законом:
а) отличия по асимметрии; б) отличия по эксцессу.

На рис. 4.5 приведены примеры эмпирических распределений, определенно отличающихся от теоретического нормального распределения (кривая 0). Чтобы не загромождать рисунок, эмпирические распределения представлены здесь не гистограммами, а сглаженными кривыми, огибающими гистограммы (кривые 1 ... 4). Рис. 4.5а демонстрирует положительную (1) и отрицательную (2) асимметрии при нечетко выраженном эксцессе. На рис. 4.5б приведены симметричные распределения с положительным (3) и отрицательным (4) эксцессами.

По условию нормировки площади под всеми кривыми на рисунке должны быть равны единице. Отметим, что большие расхождения между кривыми в сравнительно узком интервале вблизи $\bar{x}$ компенсируются малыми разностями «размазанными» по «крыльям распределений».

Примечание

При сравнительном анализе теоретического и эмпирического распределений можно воспользоваться следующим правилом. Если на сглаженную гистограмму наложить кривую $p_j(x)$ нормального распределения, то минимальное число точек пересечения этих кривых не может быть меньше трех для распределений, отличающихся от нормального по асимметрии, и четырех для отличающихся по эксцессу (то есть, не меньше порядкового номера соответствующего центрального момента). Число точек пересечения кривых эмпирической F_j и теоретической $F(x)$ функций распределения на единицу меньше.

4.2.2. Использование вероятностных сеток

Небольшие различия эмпирических и теоретической кривых на «крыльях» распределений обычно трудно различимы на глаз. Чтобы наглядно отразить эти различия, эмпирическую функцию распределения строят на вероятностной сетке.

Вероятностной сеткой называют такое нелинейное преобразование масштаба по оси ординат, при котором теоретическая функция распределения на графике представляется прямой линией.

Принцип построения вероятностной сетки для нормального распределения показан на рис. 4.6.

Построим сначала обычный график функции нормального распределения $F(x)$, $0 \le F(x) \le 1$. Ниже (или выше) этого графика параллельно ему проведем те же координатные оси $F(x)$ и x. Ось абсцисс (x) разметим также как и на исходном графике. Через точку $\bar{x}$ (или любую другую) на нижнем графике под некоторым углом к оси абсцисс проведем прямую линию aa'. Выберем на оси ординат произвольное значение функции, например, 0,75. Проведем через эту ординату прямую, параллельную оси абсцисс до пересечения с кривой $F(x)$. От точки пересечения опустимся параллельно оси ординат до пересечения с прямой aa', отсюда снова параллельно оси абсцисс переместимся до оси ординат нижнего графика. Поставим здесь на оси ординат выбранное значение (0,75). Аналогичным образом перенесем с верхнего графика на нижний значения функции распределения $F(x)$. Теперь шкала на нижнем графике получилась нелинейной, особенно в области малых и больших значений $F(x)$. Более того, значения $F(-\infty) = 0$ и $F(\infty) = 1$ оказываются соответственно на $-\infty$ и $+\infty$ по оси ординат. Прямая линия aa' в сущности представляет собой функцию распределения в этом нелинейном масштабе. Таким образом, если эмпирическая функция распределения F_j является нормальной, то отражающие ее

точки в этих координатах должны ложиться на прямую линию. Отклонения от нормального распределения на крыльях на вероятностной сетке проявляются особенно наглядно.

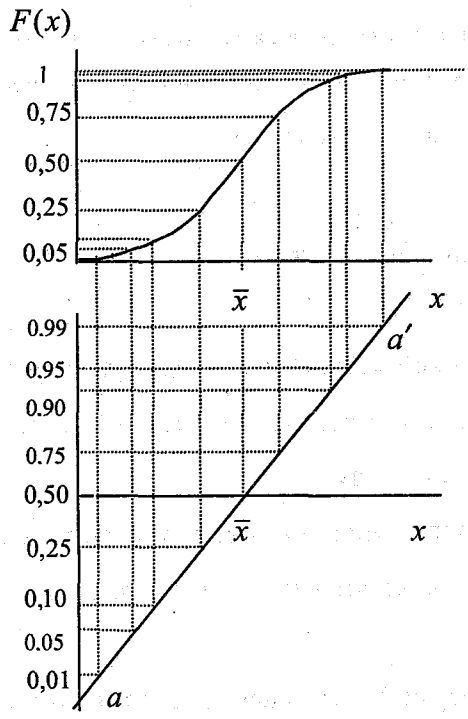


Рис. 4.6. Принцип построения вероятностной сетки для нормального распределения.

Таблица 4.2

Значение $F(z)$ для построения вероятностной сетки нормального распределения

z	$F(z)=\frac{1}{2}\pm\Phi(z)$	
	$z<0$	$z>0$
0	0,500	0,500
0,25	0,401	0,599
0,50	0,309	0,691
0,75	0,227	0,773
1,00	0,159	0,841
1,25	0,106	0,894
1,50	0,067	0,933
1,75	0,040	0,960
2,00	0,023	0,977
2,25	0,012	0,988
2,50	0,006	0,994
2,75	0,003	0,997
3,00	0,001	0,999

Описанный здесь способ призван продемонстрировать идею построения вероятностной сетки. Практически поступают проще. Отложим на оси ординат в линейном масштабе значения аргумента z стандартного нормального распределения. Затем, для каждого z рассчитаем или найдем по таблице значение функции распределения $F(z)$ и выпишем их рядом с z на оси ординат. Нелинейная шкала $F(z)$ представляет собой ту же вероятностную сетку, что и на рис. 4.6. Необходимые для построения сетки значения $F(z)$ с шагом $\Delta z = 0{,}25$ приведены в табл. 4.2.

При графическом анализе значения F_j наносят на вероятностную сетку. Однако, как уже отмечалось, значения $F_j = 0$ и $F_j = 1$ не могут быть отражены на графике. Чтобы избежать скачкообразного изменения эмпирической функции распределения на краях графика, последнюю корректируют, используя формулы

$$F'_j = \frac{\sum_{j=1}^{j} n_j}{n+1} \qquad (4.16а)$$

или
$$F_j'' = \frac{\sum_{j=1}^{j} n_j - 0{,}25}{n + 0{,}5}. \qquad (4.16б)$$

Для иллюстрации метода воспользуемся снова данными, приведенными в табл. 4.1. В последних столбцах этой таблицы содержатся значения F_j' и $z_{F_j'}$. F_j' рассчитаны по формуле (4.16а), $z_{F_j'}$ – квантили стандартного нормального распределения, соответствующие F_j'.

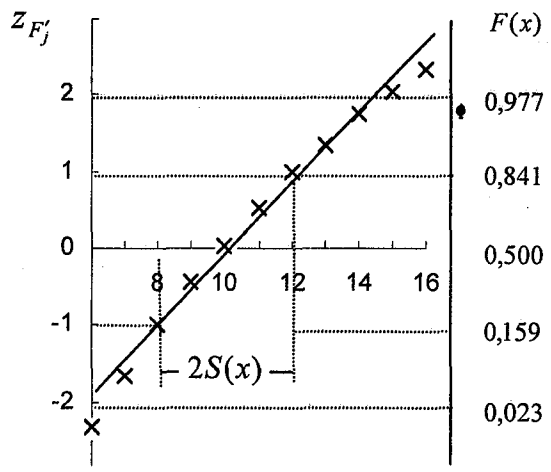


Рис. 4.7. Пример построения эмпирической функции распределения на вероятностной сетке (по исходным данным, представленным в табл.4.1).

Для построения графика достаточно одного из этих столбцов (любого). Проще конечно наносить $z_{F_j'}$, при этом ошибки интерполяции в линейной шкале меньше, чем в нелинейной шкале F. На рис. 4.7 нанесены обе шкалы, хотя, повторимся, на практике достаточно одной из них. Большая часть точек на графике хорошо ложится на прямую линию (за исключением самых крайних, отражающих единичные измерения). Это обстоятельство является основанием считать, что эмпирическое распределение соответствует нормальному.

Предостережение

Вопреки частым рекомендациям в литературе по метрологии, значения F_j' (или $z_{F_j'}$) следует относить не к середине j-го интервала, а к его правому краю $\bar{x}_j + h/2$, поскольку при расчетах F_j' используются все значения x_i, попадающие в j-ый интервал: $\bar{x}_j - h/2 \le x_i \le \bar{x}_j + h/2$, $i = \overline{1, n_j}$.

Ранее для этой выборки уже были вычислены значения $\bar{x}$ и $S(x)$. Однако при использовании вероятностных сеток эти значения можно снять непосредственно с графика: $\bar{x}$ соответствует точке пересечения прямой с ординатой $F(x)=0{,}5$ или $z=0$ ($\bar{x}\approx 10{,}0$). Чтобы найти $S(x)$, найдем точки пересечения ординат $z=-1$ и $z=1$ (или $F(x)=0{,}159$ и $F(x)=0{,}841$) с прямой, аппроксимирующей эмпирическое распределение. Между проекциями этих точек на ось x лежит отрезок, равный $2S(x)$. На рисунке $2S(x)=4{,}0$ или $S(x)=2{,}0$.

Здесь мы ограничились рассмотрением вероятностной сетки для нормального распределения. Аналогичным образом могут быть построены вероятностные сетки для любых теоретических распределений. Бланки вероятностных сеток для некоторых часто применяемых распределений изготавливаются типографским способом.

Упражнение

Изобразите графически, как будут выглядеть эмпирические распределения F_j для выборок, представленных на рис. 4.5 кривыми 1 ... 4, по сравнению с теоретическим распределением $F(x)$ в обычных (линейных) координатах и на вероятностной сетке.

4.3. Аналитические методы

Проверим нулевую гипотезу, состоящую в том, что эмпирическое распределение соответствует предполагаемому теоретическому, против альтернативной, что такого соответствия нет $H_0: F_j = F(x)$, $H_1: F_j \neq F(x)$.

Математическая статистика предлагает ряд критериев для проверки этих гипотез.

4.3.1. Критерий Колмогорова

Исходный ряд измерений x_i, $i=\overline{1,n}$, так же как при построении эмпирической функции распределения, разбивают на k интервалов и находят $F_j = \sum_{j=1}^{j} n_j / n$, $j=\overline{1,k}$. Значения F_j относят к середине интервалов $\bar{x}_j$. Рассчитывают выборочные параметры распределения и для $\bar{x}_j$ вычисляют $F(\bar{x}_j)$ – значения теоретической функции распределения (см. формулы 4.9 и 4.10). Далее вычисляют разности

$$D_j = \left| F_j - F(\bar{x}_j) \right| \qquad (4.17)$$

и определяют максимальное значение $D_{\text{макс}}$

$$D_{\text{макс}} = \max\left\{D_j, j = \overline{1,k}\right\} \tag{4.18}$$

В качестве характеристики различия между эмпирическим и теоретическим распределениями используется величина

$$\lambda = D_{\text{макс}} \cdot \sqrt{n} \tag{4.19}$$

Распределение λ как случайной величины исследовано. Приведем здесь только квантильные критические значения $\lambda_{1-\alpha}$ при различных α.

$$\lambda \le \lambda_{1-\alpha} \Rightarrow H_0, \ \lambda > \lambda_{1-\alpha} \Rightarrow H_1 \tag{4.20}$$

Критерий λ не получил широкого распространения в практике анализа результатов измерений в связи с некоторой неопределенностью в выборе уровня значимости. Недостатком критерия λ является и то обстоятельство, что он чувствителен к различиям F_j и $F(\bar{x}_j)$ в средней части распределений, например связанным с заметной асимметрией, но мало чувствителен к отличиям на крыльях распределений, определяемым эксцессом.

4.3.2. Методы, рекомендуемые ГОСТ

ГОСТ устанавливает критерии проверки гипотезы о соответствии эмпирического распределения нормальному. Применение критериев обуславливается объемом выборки. Для малых выборок $n < 12...15$ проверка соответствия эмпирического распределения нормальному не проводится.

При $15 < n < 50$ используется составной критерий ГОСТа «$I + II$». Если $n > 50$ рекомендуется осуществлять проверку гипотезы с помощью критериев согласия ω^2 (критерий Мизеса-Смирнова) и χ^2 (критерий Пирсона).

1. Составной критерий «$I + II$»

В соответствии с названием критерий состоит из двух частей I и II.

Критерий I

В качестве меры различия между эмпирическим и теоретическим распределениями служит величина $\tilde{d} = \dfrac{\overline{|\Delta x|}}{S'(x)}$ – отношение среднего арифметического абсолютного откло-

нения $\overline{|\Delta x|}$ к смещенному выборочному СКО $S'(x) = S(x)\sqrt{\frac{n-1}{n}}$. Для случайной величины, имеющей нормальное распределение, как легко можно убедиться, $\lim\limits_{n\to\infty} \widetilde{d} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} = 0{,}7979 \cong 0{,}8$.

Для ограниченной выборки значения $\widetilde{d}$, вычисленные любым из следующих способов

$$\widetilde{d} = \frac{\frac{1}{n}\sum\limits_{i=1}^{n}|x_i - \bar{x}|}{\sqrt{\frac{1}{n}\sum\limits_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}} = \frac{\sum\limits_{i=1}^{n}|x_i - \bar{x}|}{\sqrt{n\sum\limits_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}} = \frac{\sum\limits_{i=1}^{n}|x_i - \bar{x}|}{\sqrt{n\sum\limits_{i=1}^{n}x_i^2 - (n\bar{x})^2}}, \qquad (4.21)$$

сравнивают с квантильными значениями $d_{p,n}$, определяемыми в свою очередь доверительной вероятностью и объемом выборки.

Задавая $p'' = \alpha_I / 2$ и $p' = 1 - \alpha_I / 2$, область допустимых значений для нулевой гипотезы H_0 определим как $d_{\alpha_I/2;n} \le \widetilde{d} \le d_{1-\alpha_I/2;n}$. Квантильные значения $d_{\alpha_I/2;n}$ и $d_{1-\alpha_I/2;n}$ приведены в табл. 4.3.

С достаточной для практических целей точностью значения $d_{\alpha_{I/2,n}}$ и $d_{1-\alpha_I/2,n}$, представленные в табл. 4.3, можно аппроксимировать простой формулой

$$\begin{matrix} d_{\alpha_I/2,n} \\ 1-\alpha_I/2,n \end{matrix} = 0{,}8\left(1 \mp \frac{1}{b_{\alpha_I}\sqrt{n}}\right), \qquad (4.22)$$

Коэффициент b_{α_I} подставляется в (4.22) в зависимости от α_I :

α_I	0,20	0,10	0,02
b_{α_I}	3,0	2,4	1,2

Таблица 4.3

Критические значения $d_{\alpha_{I/2,n}}$ и $d_{1-\alpha_I/2,n}$ при различных n и α.

$\alpha_I/2$, $1-\alpha_I/2$	n									
	11	16	21	26	31	36	41	46	51	61
0,01	0,67	0,68	0,69	0,70	0,71	0,72	0,72	0,72	0,73	0,73
0,05	0,72	0,72	0,73	0,74	0,74	0,74	0,75	0,75	0,75	0,76
0,95	0,91	0,89	0,88	0,87	0,86	0,86	0,85	0,85	0,85	0,84
0,99	0,94	0,91	0,90	0,89	0,88	0,88	0,88	0,87	0,86	0,86

Решающее правило для проверки гипотез по критерию I

$$d_{\alpha_I/2;n} \le \tilde{d} \le d_{1-\alpha_I/2;n} \Rightarrow H_0,\ \tilde{d} < d_{\alpha_I/2;n} \text{ или } \tilde{d} > d_{\alpha_I/2;n} \Rightarrow H_1. \qquad (4.23)$$

Критерий II

Другой характеристикой отличия эмпирического распределения от нормального является $\tilde{m}$ – число больших (по абсолютному значению) отклонений $|x_i - \bar{x}|$, $i = \overline{1,n}$, превышающих произведение $z_{(1+p)/2} \cdot S(x)$. При работе с ПК процедуру подсчета $\tilde{m}$ можно формализовать, используя функцию Хэвисайда $\theta\{y\} = \begin{cases} 1, y > 0, \\ 0, y < 0. \end{cases}$ Тогда

$$\tilde{m} = \sum_{i=1}^{n} \theta\left\{|x_i - \bar{x}| - z_{(1+p)/2} \cdot S(x)\right\} \qquad (4.24)$$

Управляющим параметром в (4.24), служит $z_{(1+P)/2}$ – квантиль стандартного нормального распределения, зависящий от P. Вероятность P находится как корень трансцендентного уравнения

$$\sum_{\nu=0}^{m} C_n^{\nu} (1-P)^{\nu} \cdot P^{n-\nu} = 1 - \alpha_{II}, \qquad (4.25)$$

где C_n^{ν} – число сочетаний из n по ν: $C_n^{\nu} = \dfrac{n!}{(n-\nu)!\nu!}$. Уравнение (4.25) содержит неизвестные P и m. Задавая характерные числа m в зависимости от n, подбирают значение P, удовлетворяющее этому уравнению. Результаты решения при $m = 1$, если $n \le 20$, и $m = 2$, если $n > 20$, приведены в табл. 4.4.

Для удобства практического использования табл. 4.4 приведем здесь переход от P к $z_{(1+P)/2}$

P	0,96	0,97	0,98	0,99
$z_{(1+P)/2}$	2,06	2,17	2,33	2,58

Процедура проверки гипотез сводится к сравнению $\tilde{m}$ и m.

Таблица 4.4

Критические значения m и вероятность P при различных объемах выборки n и уровнях значимости α_{II}

$\alpha_{II}/2$	n								
	10	11-14	15-20	21-22	23	24-27	28-32	33-35	36-49
	$m_{\alpha_{II};n}$								
	1	1	1	2	2	2	2	2	2
0,01	0,98	0,99	0,99	0,98	0,98	0,98	0,99	0,99	0,99
0,02	0,98	0,98	0,99	0,97	0,98	0,98	0,98	0,98	0,99
0,05	0,96	0,97	0,98	0,96	0,97	0,97	0,97	0,98	0,98

Решающее правило для критерия II

$$\tilde{m} \le m_{\alpha_{II};n} \Rightarrow H_0,\ \tilde{m} > m_{\alpha_{II};n} \Rightarrow H_1. \qquad (4.26)$$

Эмпирическое распределение соответствует нормальному, если оба критерия дают H_0. Если хотя бы один из них указывает на H_1, распределение не может считаться нормальным. Общий уровень значимости при принятии H_0 $\alpha \le \alpha_{I/2} + \alpha_{II/2}$.

2. Критерии согласия χ^2 *и* ω^2

Оба критерия могут быть использованы для проверки соответствия эмпирического распределения не только нормальному, но и любому другому теоретическому.

Критерий χ^2

На начальном этапе повторяются операции, описанные в разделе «Графические методы». Вся выборка $x_i, i = \overline{1,n}$ разбивается на k интервалов. Подсчитывается число n_j значений измеряемой величины, попадающих в j-ый интервал, $j = \overline{1,k}$. Вычисляются параметры теоретического распределения. Теперь можно рассчитать число результатов измерений, которое должно было бы попасть в j-ый интервал, если теоретическое распределение строго выполняется ($n_j^T = n \cdot p_j$, где p_j – вероятность попадания в j-ый интервал). Разности ($n_j - np_j$) отражают различие между эмпирическим и теоретическим распределениями. В качестве обобщающей характеристики различия рассматривают сумму

$$\sum_{j=1}^{k}\frac{(n_j - np_j)^2}{np_j} = \chi^2, \tag{4.27}$$

которая имеет χ^2 -распределение. Мы уже рассматривали это распределение ранее (раздел 3). Повторим здесь только выражение для плотности вероятности χ^2 -распределения.

$$f(\chi^2) = \begin{cases} \dfrac{1}{2^{n/2}\Gamma(n/2)} \cdot \left(\chi^2\right)^{\frac{n-2}{2}} \cdot \exp\left(-\dfrac{\chi^2}{2}\right), & \chi^2 > 0 \\ 0, \quad \chi^2 \le 0 \end{cases} \tag{4.28}$$

Квантильные значения χ^2 приведены в *Приложении 3*. Выпишем здесь для примера лишь несколько значений $\chi^2_{1-\alpha,f}$ для $\alpha = 0{,}10$.

f	1	2	3	4	5	6	7	8	10	12
$\chi^2_{1-0{,}10};f$	2,7	4,6	6,3	7,8	9,8	10,6	12,0	13,4	16,0	18,5

Число степеней свободы для χ^2 в этом случае $f = k - 3$ (на выборку исходных данных налагаются три связи: $\bar{x}, S(x)$ и n_j). На крыльях распределения, в силу дискретности n_j и малости np_j, отношение $(n_j - np_j)^2 / np_j$ случайным образом может принимать большие значения. Во избежание этого рекомендуется объединять градации таким образом, чтобы выполнялось условие $n_j \ge 5$. Соответственно следует рассчитывать и p_j как суммарные вероятности для объединенных градаций, разумеется, уменьшая и число степеней свободы.

Решающее правило:

$$\chi^2 \le \chi^2_{1-\alpha,f} \Rightarrow H_0, \quad \chi^2 > \chi^2_{1-\alpha,f} \Rightarrow H_1. \tag{4.29}$$

Предостережение

В нормативной литературе по метрологии часто приводится ошибочная рекомендация задавать двухстороннюю критическую область для нулевой гипотезы $\chi^2_{\alpha/2,f} \le \chi^2 \le \chi^2_{1-\alpha/2,f}$ (по аналогии с заданием критической области для $\sigma(x)$). Порочность этой рекомендации становится очевидной в том крайнем случае, когда отмечается идеальное совпадение n_j и np_j. Тогда $\chi^2 = 0$, но при использовании двухстороннего критерия следует принимать альтернативную гипотезу.

Критерий ω^2

ГОСТ отдает предпочтение критерию ω^2 перед критерием χ^2, поскольку в последнем случае часть информации теряется при группировке исходных данных. В критерии ω^2 каждый результат измерений $x_i, i=\overline{1,n}$ анализируется непосредственно.

Построим вариационный возрастающий ряд $x_k, k=\overline{1,n}$, в который формально добавим два значения $x_0=-\infty$ и $x_{n+1}=\infty$

$$-\infty, x_1, x_2, x_3, \ldots, -x_{n-1}, x_n, \infty, \quad x_{k+1} \geq x_k.$$

Мерой соответствия эмпирического распределения теоретическому служит величина ω^2, определяемая формулой

$$\omega^2 = \int_{-\infty}^{\infty} [F_к - F(x)]^2 \, dF(x), \tag{4.30}$$

где $F_к$ – эмпирическая функция распределения.

В интервале $[-\infty, x_1]$ $F_0=0$, в интервале $[x_n, \infty]$ $F_n=1$, в интервале $[x_k, x_{k+1}]$ $F_k=\frac{k}{n}$.

Представим ω^2 как сумму слагаемых

$$\omega^2 = A_1 + A_2 + A_3,$$

где

$$A_1 = \int_{-\infty}^{x_1} [0 - F(x)]^2 dF(x) = \frac{F^3(x_1)}{3},$$

$$A_2 = \sum_{k=1}^{n-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} \left[\frac{k}{n} - F(x)\right]^2 dF(x) = \sum_{k=1}^{n-1} \left. \frac{\left(F(x) - \frac{k}{n}\right)^3}{3} \right|_{x_k}^{x_{k+1}} =$$

$$= \sum_{k=1}^{n-1} \frac{\left(F(x_{k+1}) - \frac{k}{n}\right)^3}{3} - \sum_{k=1}^{n-1} \frac{\left(F(x_k) - \frac{k}{n}\right)^3}{3},$$

$$A_3 = \int_{x_n}^{\infty} [1 - F(x)]^2 dF(x) = \frac{(1 - F(x_n))^3}{3}.$$

Опуская достаточно громоздкие алгебраические преобразования, выпишем сразу ответ

$$\omega^2 = \frac{1}{12n^2} + \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\left(F(x_k) - \frac{2k-1}{2n}\right)^2. \qquad (4.31)$$

Умножим обе части этого выражения на n. Тогда, учитывая, что для больших n $(n > 50)$ слагаемое $\frac{1}{12n}$ становится пренебрежимо малым, в качестве характеристики различия между $F_к$ и $F(x_к)$ можно использовать произведение $\omega^2 n$:

$$\omega^2 n = \sum_{k=1}^{n}\left(F(x_k) - \frac{2k-1}{2n}\right)^2. \qquad (4.32)$$

По распределению критерия $\omega^2 n$ рассчитаны его квантильные значения. Приведем их для нескольких уровней значимости.

α	0,10	0,05	0,01
$(\omega^2 n)_{1-\alpha}$	0,3473	0,4614	0,7435

Решающее правило:

$$\omega^2 n \le (\omega^2 n)_{1-\alpha} \Rightarrow H_0, \quad \omega^2 n > (\omega^2 n)_{1-\alpha} \Rightarrow H_1. \qquad (4.33)$$

4.4. Преобразование распределений

Если принимается альтернативная гипотеза, то есть эмпирическое распределение не согласуется с предполагаемым теоретическим, то использование последнего для дальнейшей обработки, например, для вычисления доверительных границ погрешности, может привести не только к ошибочным, но и к противоречащим физическому смыслу результатам. В самом деле, если постулируется нормальное распределение, то предполагается, что $-\infty < x < \infty$. Однако, часто физические величины ограничены со стороны малых значений (размер капель и их концентрация, масса навески, скорость потока и др. не могут быть отрицательными) или с обеих сторон (влажность воздуха изменяется от 0 до100 %, балльность облаков от 0 до 10 и т.д.). Если $\varepsilon_{\bar{x}} << \bar{x}$, то такие ограничения не имеют принципиального значения. Хуже обстоит дело, когда $\varepsilon_{\bar{x}} > \bar{x}$. В этом случае представление результатов в виде $x = \bar{x} \pm \varepsilon_{\bar{x}}$, $p = 1 - \alpha$ дает в качестве нижней границы доверительного интервала $x = (\bar{x} - \varepsilon_{\bar{x}}) < 0$, что противоречит здравому смыслу.

Таким образом, если принимается H_1, то перед исследователем открываются два пути: или подобрать для сравнения другое теоретическое распределение, или преобразовать эмпирическое распределение к известному, например, нормальному теоретическому распределению.

Рассмотрим второй путь сначала на примере преобразования одного теоретического распределения в другие. Пусть имеется распределение случайной величины x с плотностью вероятности $f(x)$. По определению нормировки $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx = 1$.

Введем новую переменную $u = u(x)$. Неизвестная пока $f(u)$ также должна удовлетворять условию нормировки $\int_{-\infty}^{\infty} f(u)du = 1$. Отсюда следует, что $f(x)dx = f(u)du$ или

$$f(u) = f(x)\frac{dx}{du}. \tag{4.34}$$

Суть дальнейших преобразований поясним на конкретном примере. Обратимся к определенно несимметричной, уже упоминавшейся ранее показательной функции

$$f_{\text{п}}(x) = \begin{cases} \lambda \exp(-\lambda x), & x \geq 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases} \tag{4.35}$$

Для такой функции $\bar{x} = \lambda$ и $\sigma(x) = \lambda$. Примем здесь для упрощения $\lambda = 1$. Тогда

$$f_{\text{п}}(x) = \exp(-x). \tag{4.36}$$

Распределение (4.36) представлено на рис. 4.8а.

Конечно, оно совершенно непохоже на нормальное. Попробуем его преобразовать. Перейдем от переменной x к u. Используем сначала простое соотношение $x = u^2$. В этом случае в соответствии с (4.34) получим

$$f(u) = 2u\exp(-u^2). \tag{4.37}$$

Плотность вероятности $f(u)$ показана на рис. 4.8б. Вместо монотонного уменьшения $f(x)$ теперь имеем функцию с экстремумом. Правда, распределение $f(u)$ все еще характеризуется асимметрией. Для следующей итерации, то есть для следующей попытки приблизить преобразованное распределение к нормальному, воспользуемся заменой $x = \vartheta^3$. Теперь плотность вероятности

$$f(\vartheta) = 3\vartheta^2 \exp(-\vartheta^3). \tag{4.38}$$

Кривая $f(\vartheta)$ (рис. 4.8в) является практически симметричной, распределение, по крайней мере внешне, приближается к нормальному.

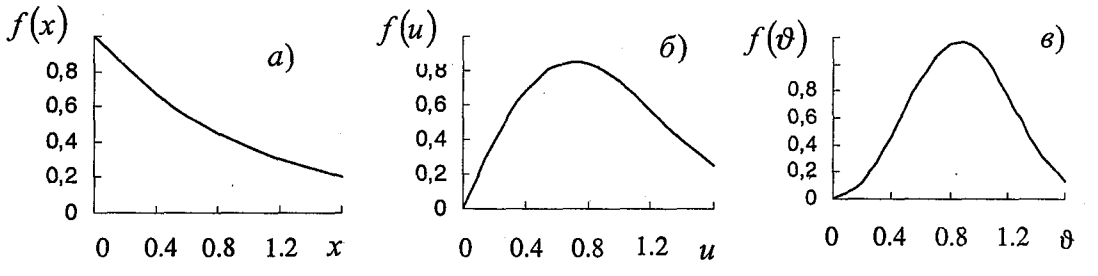


Рис. 4.8. Трансформация распределения случайной величины при преобразовании аргумента: а) x, б) $x = u^2$, в) $x = \vartheta^3$. Плотности вероятности построены соответственно по уравнениям (4.36), (4.37), (4.38).

Логарифмически-нормальное распределение

Одним из наиболее распространенных преобразований случайной величины является переход к логарифмически-нормальному (лог.-нормальному) распределению. Если имеется ряд измерений x_i, $i = \overline{1,n}$ при этом $0 < x < \infty$ и распределение характеризуется очевидной положительной асимметрией, то удобно перейти к новой переменной $u_i = \ln x_i$. В таком случае, как легко видеть, случайная величина u будет меняться в пределах $-\infty < u < \infty$. Для нее можно найти среднее значение $\bar{u}$ и СКО (при больших $n \to \sigma(u)$):

$$\bar{u} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} u_i = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \ln x_i = \overline{\ln x}, \tag{4.39}$$

$$\sigma(u) = \sqrt{\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(u_i - \bar{u})^2}\,. \tag{4.40}$$

Плотность вероятности логарифмически-нормального закона задается формулой

$$f_{\ln}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(u)x}\exp\left[\frac{(u-\bar{u})^2}{2\sigma^2(u)}\right]. \qquad (4.41)$$

При переходе к $F_{\ln}(x)$ с учетом того, что $\frac{dx}{x} = d(\ln x)$, получим привычную форму записи нормального распределения

$$F_{\ln}(x) = F(u) = \int_{-\infty}^{u} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(u)} \cdot \exp\left[\frac{(u-\bar{u})^2}{2\sigma^2(u)}\right] du. \qquad (4.42)$$

Далее можно, как обычно, перейти к стандартному нормальному распределению путем подстановки $z = \frac{u-\bar{u}}{\sigma(u)}$

$$F(u) = \frac{1}{2} + \Phi(z).$$

Доверительные границы погрешности для $\bar{u}$

$$\varepsilon_{\bar{u}} = z_{1-\alpha/2} \cdot \frac{\sigma(u)}{\sqrt{n}} = z_{1-\alpha/2} \cdot \sigma_{\bar{u}}. \qquad (4.43)$$

Если число измерений ограничено, то находят $S(u)$ и, соответственно,

$$\varepsilon_{\bar{u}} = t_{1-\alpha/2;f} \cdot S_{\bar{u}}. \qquad (4.44)$$

Стандартная форма представления результатов

$$P\{\bar{u} - \varepsilon_{\bar{u}} \le u_0 \le \bar{u} + \varepsilon_{\bar{u}}\} = 1-\alpha \qquad (4.45)$$

для практического использования оказывается неудобной, поскольку условие (4.45) отражает доверительный интервал не для физической величины, а для ее логарифма. Осуществим обратный переход:

$$x_0 = \exp(u_0),\ \exp(\bar{u}) = \exp\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\ln x_i\right) = \sqrt[n]{\exp\left(\sum_{i=1}^{n}\ln x_i\right)} = \sqrt[n]{x_1 x_2 \ldots x_n} = \sqrt[n]{\prod_{i=1}^{n} x_i} = \bar{x}_\Gamma, \qquad (4.46)$$

где $\bar{x}_\Gamma$ – среднее геометрическое случайной величины x. С учетом (4.46) результат (4.45) можно переписать в виде

$$P\left\{\bar{x}_\Gamma \cdot e^{-\varepsilon_{\bar{u}}} \le x_0 \le \bar{x}_\Gamma \cdot e^{\varepsilon_{\bar{u}}}\right\} = 1-\alpha. \qquad (4.47)$$

Выражение (4.47) исключает получение абсурдных с физической точки зрения доверительных границ.

4.5. Доверительные границы погрешности результата измерения при неизвестном законе распределения

Если эмпирическое распределение случайной величины не согласуется с предлагаемым теоретическим (чаще всего нормальным), и если его не удается преобразовать к последнему, то для нахождения ДГПРИ можно воспользоваться неравенством Чебышева. Доказано, что при известной дисперсии $\sigma^2(x)$ для результата отдельного измерения x справедливо утверждение

$$P\{|x - x_0| > \varepsilon\} < \frac{\sigma^2(x)}{\varepsilon^2}. \tag{4.48}$$

Здесь ε – любое изначально заданное положительное отклонение $(x - \bar{x})$. Выразим ε через $\sigma(x)$ соотношением $\varepsilon = k\sigma(x)$. Перепишем (4.48) для событий, несовместных с теми, которые отражены в фигурных скобках:

$$P\{|x - x_0| \le k\sigma\} \ge 1 - \frac{1}{k^2}. \tag{4.49}$$

Приведем (4.49) к виду, обычно используемому при определении доверительных интервалов для истинного значения x_0

$$P\{x - k\sigma(x) \le x_0 \le x + k\sigma(x)\} = 1 - \frac{1}{k^2}. \tag{4.50}$$

Поскольку правая часть в (4.50) не может быть отрицательной, поставим условие $k > 1$. Обозначим $\frac{1}{k^2} = \alpha$. Тогда окончательно

$$P\left\{x - \frac{\sigma(x)}{\sqrt{\alpha}} \le x_0 \le x + \frac{\sigma(x)}{\sqrt{\alpha}}\right\} = 1 - \alpha. \tag{4.51}$$

Выражение (4.51) позволяет оценить доверительный интервал для x_0 по результату одного отдельного измерения. Доверительные границы погрешности результата отдельного измерения

$$\varepsilon_1(x) = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}\sigma(x). \tag{4.52}$$

Сравнивая (4.52) с полученным ранее выражением для ДГП отдельного измерения нормально распределенной случайной величины $\varepsilon(x) = z_{1-\alpha/2}\sigma(x)$, легко убедиться, что при одинаковых уровнях значимости $\varepsilon_1(x)$ существенно больше $\varepsilon(x)$. Например, при $\alpha = 0{,}05$ множитель $1/\sqrt{\alpha} \approx 4{,}5$, в то время как $z_{1-0{,}05/2} = 1{,}96 \approx 2$. Более чем двукратное увеличение ДГП является платой за незнание закона распределения измеряемой величины.

Впрочем, ДГП могут быть уменьшены, если эмпирическое распределение симметрично и одномодально. В этом случае справедливо усиленное неравенство Чебышева. Приведенное к форме (4.50), оно имеет вид

$$P\{|x - x_0| \le k\sigma(x)\} = 1 - \left(\frac{2}{3k}\right)^2. \tag{4.53}$$

При подстановке $\left(\frac{2}{3k}\right)^2 = \alpha$ получим

$$P\left\{x - \frac{2}{3}\frac{\sigma(x)}{\sqrt{\alpha}} \le x_0 \le x + \frac{2}{3}\frac{\sigma(x)}{\sqrt{\alpha}}\right\} = 1 - \alpha. \tag{4.54}$$

Значение $\varepsilon_2 = \frac{2}{3}\frac{\sigma(x)}{\sqrt{\alpha}}$ существенно меньше $\varepsilon_1(x)$, но по-прежнему больше $\varepsilon(x)$. Для $\alpha = 0{,}05$ множитель $\frac{2}{3\sqrt{\alpha}} \cong 3$.

Подставив в выражение (4.51) вместо x коэффициент эксцесса Э, а в (4.54) вместо x коэффициент асимметрии А, для $\alpha = 0{,}05$ получим использованные в разделе 2 критические значения 3σ(А) и $4{,}5\sigma$(Э). Вычисленные при этом по выборке А и Э рассматриваются как единичные значения, извлеченные из генеральной совокупности бесконечно большого числа коэффициентов асимметрии и эксцесса.

Вернемся опять к выборке значений измеряемой величины x. Если выполнено n измерений и вычислено $\bar{x}$, то доверительный интервал для x_0 сужается, поскольку соотношение $\sigma_{\bar{x}} = \sigma(x)/\sqrt{n}$ остается в силе независимо от вида распределения. Следовательно, вместо (4.51) и (4.54) получим

$$P\left\{\bar{x} - \frac{\sigma(x)}{\sqrt{\alpha n}} \le x_0 \le \bar{x} + \frac{\sigma(x)}{\sqrt{\alpha n}}\right\} = 1 - \alpha, \tag{4.55}$$

$$P\left\{\bar{x} - \frac{2}{3}\frac{\sigma(x)}{\sqrt{\alpha n}} \le x_0 \le \bar{x} + \frac{2}{3}\frac{\sigma(x)}{\sqrt{\alpha n}}\right\} = 1 - \alpha. \tag{4.56}$$

Разумеется, доверительные границы погрешности $\varepsilon_{\bar{x},1} = \sigma(x)/\sqrt{\alpha n}$ и $\varepsilon_{\bar{x},2} = (2/3)\cdot\sigma(x)/\sqrt{\alpha n}$ остаются больше, чем $\varepsilon_{\bar{x}}$.

Уже отмечалось, что применение неравенств Чебышева требует априорного знания $\sigma(x)$. Для нормального распределения случайной величины замена $\sigma(x)$ на $S(x)$ практически допустима уже при объеме выборки $n > 25...30$. Надежные рекомендации относительно других распределений в этом смысле отсутствуют. Можно только быть уверенным, что для подобной замены объем выборки должен быть по крайней мере не меньше.

5. ИСКЛЮЧЕНИЕ ГРУБЫХ ПОГРЕШНОСТЕЙ

Грубая погрешность, грубый промах, промах — случайная погрешность результата отдельного измерения, резко отличающаяся от остальных результатов этого ряда измерений.

Если случайная величина имеет нормальное распределение, то значения ее, также как и отклонения их от среднего, теоретически могут изменяться от $-\infty$ до $+\infty$. Большие по абсолютным значениям отклонения неизбежно должны появляться в ряду измерений в силу случайности. В то же время такие отклонения могут быть связаны с кратковременным (однократным) действием того или иного внешнего фактора, то есть проявляться как промахи, грубые погрешности. Дилемма заключается в том, что большие случайные отклонения следует оставить в ряду измерений. Их исключение приведет к искажению среднего и дисперсии. Грубые промахи по тем же мотивам необходимо исключить.

Чтобы решить к какой категории отнести резко отличающийся от других результат измерения, надо оценить вероятность отклонений. Это нетрудно сделать, если известна функция распределения. Логично считать, что отклонение, вероятность которого меньше уровня значимости, практически невозможно. Если однако такое отклонение появляется в ряду измерений, то его нельзя объяснить случайностью, следовательно это промах.

Пусть в ряду измерений x_i, $i=\overline{1,n}$ имеется подозреваемое на промах значение, назовем его проверяемым и обозначим $x_{\text{пр}}$. Нулевая гипотеза состоит в том, что $x_{\text{пр}}$ принадлежит генеральной совокупности случайной величины X, альтернативная – проверяемое значение не принадлежит X, оно является промахом.

$$H_0 : x_{\text{пр}} \in X \,,\; H_1 : x_{\text{пр}} \notin X \,. \tag{5.1}$$

5.1. Исключение промахов при известном $\sigma(x)$

Рассмотрим сначала простую задачу.

Изучается случайная величина, имеющая нормальное распределение. По результатам выполненных ранее многократных измерений вычислены СКО $\sigma(x)$ и истинное, точнее действительное, значение $\bar{x}$. Проведено еще одно измерение. Полученное значение x_1 сильно отличается от $\bar{x}$. Является ли оно промахом? Конечно если это случайное отклонение, то при известных $\bar{x}$ и $\sigma(x)$ единичный результат никакого значения не имеет. Но, если это промах, то можно сделать предположение об изменении условий измерения или даже о том, что истинное значение случайной величины изменилось (измерена другая величина). Чтобы выбрать одну из гипотез, необходимо определить критическое значение

$x_{кр}$, отделяющее область допустимых значений для H_0 от критической области (области принятия H_1). Зная реальное значение $x_1 = x_{пр}$, мы можем определенно выбирать либо правостороннюю критическую область (критическое значение $x'_{кр}$), если $x_{пр} > \bar{x}$, либо левостороннюю $x''_{кр}$ при $x_{пр} < \bar{x}$. Рассмотрим процедуру в общем случае – при неизвестном заранее знаке разности $(x_{пр} - \bar{x})$. Выберем уровень значимости α как вероятность того, что случайное отклонение будет принято за промах.

По определению функции распределения для левостороннего и правостороннего критических значений можно соответственно записать

$$P\{x > x''_{кр}\} = 1 - F(x''_{кр}) = 1 - \int_{-\infty}^{x''_{кр}} f(x)dx = 1 - \alpha, \tag{5.2}$$

$$P\{x < x'_{кр}\} = F(x'_{кр}) = \int_{-\infty}^{x'_{кр}} f(x)dx = 1 - \alpha. \tag{5.3}$$

Перейдем к стандартному нормальному распределению, используя преобразование $z = (x - \bar{x})/\sigma(x)$. Тогда $z''_{кр} = (x''_{кр} - \bar{x})/\sigma(x)$ и $z'_{кр} = (x'_{кр} - \bar{x})/\sigma(x)$.

В силу симметрии стандартного распределения $-z''_{кр} = z'_{кр}$. Это обстоятельство позволит далее использовать одно из критических значений, например, $z'_{кр}$. Теперь вместо условий (5.2), (5.3) получим

$$F(z'_{кр}) = 1 - \alpha \tag{5.4}$$

или, переходя к функции Лапласа $F(z) = 1/2 + \Phi(z)$

$$\Phi(z'_{кр}) = 1/2 - \alpha. \tag{5.5}$$

Критическое значение $z'_{кр}$ представляет собой квантиль стандартного нормального распределения $z'_{кр} \equiv z_{1-\alpha}$, соответствующий вероятности $p = 1 - \alpha$.

Таким образом, представляя проверяемое значение $x_{пр}$ в безразмерном виде $z_{пр} = (x_{пр} - \bar{x})/\sigma(x)$, решающее правило проверки гипотез сформулируем в виде

$$|z_{пр}| \le z_{1-\alpha} \Rightarrow H_0; \; |z_{пр}| > z_{1-\alpha} \Rightarrow H_1. \tag{5.6}$$

Усложним ситуацию. Пусть СКО $\sigma(x)$ по-прежнему известно. Но для нахождения $\bar{x}$ выполняется ряд измерений x_i, $i = \overline{1,n}$. Очевидно, что в ряду из n измерений вероятность случайного большого отклонения увеличивается. Выберем для проверки на промах самое большое (или самое маленькое) из значений x_i. Обозначим его снова $x_{пр}$. Определим $x'_{кр}$ и $x''_{кр}$. Вероятность того, что все значения x_i окажутся больше $x''_{кр}$ (или меньше $x'_{кр}$) равны произведению вероятностей для единичных результатов измерений

$$P_n\{x > x''_{\text{кр}}\} = (1 - F(x''_{\text{кр}}))^n = 1 - \alpha, \tag{5.7}$$

$$P_n\{x < x'_{\text{кр}}\} = (F(x'_{\text{кр}}))^n = 1 - \alpha. \tag{5.8}$$

Снова перейдем к стандартному нормальному распределению и в силу симметрии ограничимся только правосторонним критерием.

$$(F(z'_{\text{кр}}))^n = 1 - \alpha \tag{5.9}$$

Перейдем в (5.9) к функции Лапласа и решим его относительно $\Phi(z'_{\text{кр}})$.

$$\Phi(z'_{\text{кр}}) = \sqrt[n]{1-\alpha} - 1/2 \tag{5.10}$$

Вычислив $\Phi(z'_{\text{кр}})$, по таблицам функции Лапласа можно найти $z'_{\text{кр}}$. Преобразуем $x_{\text{пр}}$ в $z_{\text{пр}} = |(x_{\text{пр}} - \bar{x})/\sigma(x)|$ и используем для выбора гипотезы решающее правило

$$z_{\text{пр}} \le z'_{\text{кр}} \Rightarrow H_0, . z_{\text{пр}} > z'_{\text{кр}} \Rightarrow H_1. \tag{5.11}$$

Если принимается альтернативная гипотеза, то значение $x_{\text{пр}}$ исключается из выборки. Затем рассчитывается новое среднее и проверяется на промах следующее, максимальное по абсолютному значению, отклонение. В выражении (5.10) следует уменьшить n на единицу. Операция повторяется до тех пор, пока для очередного проверяемого значения не будет принята H_0.

5.2. Исключение промахов при неизвестном $\sigma(x)$

На практике чаще встречается ситуация, когда $\sigma(x)$ заранее неизвестно. Значения $\bar{x}$ и $S(x)$ определяются по выборке. В этом случае можно использовать распределение безразмерной случайной величины

$$\nu = \frac{x - \bar{x}}{S(x)} \tag{5.12}$$

с числом степеней свободы $f = n - 2$.

Плотность вероятности $f(\nu)$ выражается формулой

$$f(\nu)=\begin{cases}\dfrac{1}{\sqrt{\pi(n-1)}}\cdot\dfrac{\Gamma\left(\dfrac{n-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\dfrac{n-2}{2}\right)}\cdot\left(1-\dfrac{\nu^2}{n-1}\right)^{\frac{n}{2}-2}, & |\nu|<\sqrt{n-1},\\ 0, & |\nu|\geq\sqrt{n-1}.\end{cases} \tag{5.13}$$

Кривые плотности вероятности ν-распределения для разных объемов выборки представлены на рис. 5.1. Как можно видеть, с увеличением объема выборки изменяется не только рассеяние по аргументу, но и вид ν-распределения от антимодального ($n=3$) к равномерному ($n=4$) и далее, к колоколообразному. В отличие от нормального, это распределение ограничивается конечным интервалом изменения ν от $-\sqrt{n-1}$ до $\sqrt{n-1}$. При этом, так же как и нормальное, ν-распределение является симметричным относительно центра распределения ($\nu=0$). Это обстоятельство, как и в предыдущем параграфе, позволяет определить одностороннюю критическую область, например правостороннюю. Обозначим критическое значение для нее $\nu'_{кр}$. Преобразуем весь ряд измерений x_i по формуле (5.12) к безразмерному виду ν_i. По аналогии с (5.8) запишем условие того, что любое значение ν при объеме выборки n и уровне значимости α окажется меньше $\nu'_{кр}$.

$$P_n\{\nu<\nu'_{кр}\}=(F(\nu'_{кр}))^n=1-\alpha. \tag{5.14}$$

Здесь $F(\nu)$ – функция распределения ν.

$$F(\nu'_{кр})=\int_{-\sqrt{n-1}}^{\nu'_{кр}}f(\nu)d\nu=\frac{1}{2}+\int_{0}^{\nu'_{кр}}f(\nu)d\nu). \tag{5.15}$$

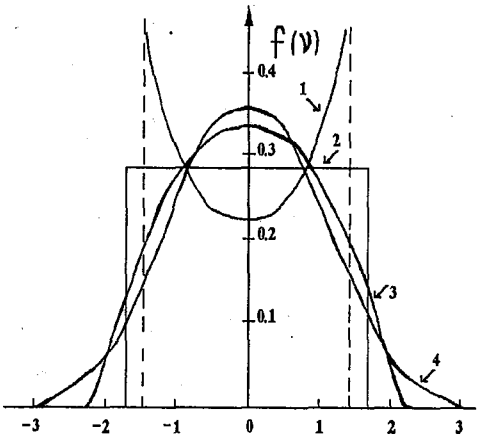


Рис. 5.1. Плотность вероятности распределения ν.

1 – $n=3$; 2 – $n=4$; 3 – $n=7$; 4 – $n=10$.

Значение $\nu'_{кр}$ найдем как корень уравнения

$$\int_0^{\nu'_{кр}} f(\nu)d\nu = \sqrt[n]{1-\alpha} - 1/2\,. \qquad (5.16)$$

Уравнение (5.16) решается численно. Для результатов численного интегрирования используем обозначение $\nu'_{кр} \equiv \nu_{1-\alpha,n}$, отражающее зависимость критического значения от уровня значимости α и объема выборки n.

Критические значения $\nu_{1-\alpha,n}$ представлены в *Приложении V*. Приведем здесь только небольшой фрагмент этой таблицы.

α	n								
	3	4	5	7	10	20	50	100	200
0,10	1,41	1,64	1,78	1,97	2,14	2,43	2,79	3,03	3,25
0,05	1,41	1,69	1,87	2,09	2,29	2,62	2,99	3,23	3,46

Выделим проверяемое на промах значение $\nu_{пр}$

$$\nu_{пр} = |(x_{пр} - \bar{x})/S(x)|\,. \qquad (5.17)$$

Сформулируем решающее правило. Оно аналогично (5.11).

$$\nu_{пр} \le \nu_{1-\alpha,n} \Rightarrow H_0\,,\ \nu_{пр} > \nu_{1-\alpha,n} \Rightarrow H_1 \qquad (5.18)$$

Подчеркнем еще раз, что в решающих правилах (5.11), (5.18) применяются односторонние критические области, несмотря на постулируемую симметрию распределений. Резонность такого подхода определяется тем, что проверке на промах подвергаются последовательно отдельные результаты измерений; при этом промахами могут оказаться отклонения одного знака.

Процедура проверки ряда измерений на наличие в нем грубых промахов сводится к следующему:

1. Проверяется гипотеза нормальности распределения ряда измерений;

2. Вычисляются $\bar{x}$ и $S(x)$ по всему ряду измерений, включая подозреваемые на промах;

3. Выбирается $x_{\text{пр}}$ – проверяемое на промах значение x_i, как удовлетворяющее условию $\Delta x = |x_{\text{пр}} - \bar{x}| = \max\{|x_i - \bar{x}|,\ i = \overline{1,n}\}$;

4. Вычисляется $\nu_{\text{пр}} = \Delta x / S(x)$ и его значение сравнивается с $\nu_{1-\alpha,n}$, взятым из таблицы;

5. Используя решающее правило (5.18), принимают H_0 или H_1;

6. Если принимается гипотеза H_1, то проверяемое значение исключается из ряда, вычисляются новые $\bar{x}$ и $S(x)$;

7. Выбирается следующее максимальное по абсолютному значению отклонение и операции 3...6 повторяются.

5.3. Исключение промахов при произвольных законах распределения погрешностей

Рассмотренные в разделах 5.1 и 5.2 критерии проверки результатов измерений на наличие грубых погрешностей применимы только для нормального распределения. Распространение z- и ν-критериев на другие распределения приводит к значительным искажениям статистических характеристик. Однако принцип, использованный при определении z- и ν-критериев, может быть применен и для других распределений. Единственное, что для этого требуется – знание конкретного закона распределения и его параметров. Задачи такого рода, разумеется, решались и опубликованы в метрологической литературе. Приведем здесь без выводов один из критериев выделения промахов.

Вариационный критерий Диксона

Представим результаты измерений в виде возрастающего вариационного ряда $x_1, x_2, ..., x_i, ..., x_{n-1}, x_n$, где $x_{i+1} \geq x_i$.

Очевидно, что подозреваемыми на промах являются значения x_i, находящиеся либо на левом $(x_{\text{пр}} = x_1)$, либо на правом $(x_{\text{пр}} = x_n)$ краях вариационного ряда.

Исследуется безразмерная величина K

$$K = (x_n - x_{n-1})/(x_n - x_1), \qquad (5.19а)$$

либо ее зеркальное отражение

$$K = (x_2 - x_1)/(x_n - x_1) \qquad (5.19б)$$

– отношение разности между двумя крайними членами ряда ко всему диапазону изменений x_i.

Получена функция распределения величины K и рассчитаны ее квантильные значения $K_{1-\alpha,n}$ при различных уровнях значимости α и объемах выборки n (Табл. 5.1).

Процедура проверки крайних членов ряда на промах заключается в следующем. Для проверяемого $x_{\text{пр}} = x_n$ или $x_{\text{пр}} = x_1$ (в зависимости от того, для какого из них больше разность $|x_{\text{пр}} - \bar{x}|$), рассчитывается $K_{\text{пр}}$ по формуле (5.19). Значение $x_{\text{пр}}$ сравнивается с $K_{1-\alpha,n}$ в соответствии с очевидным решающим правилом.

$$K_{\text{пр}} \le K_{1-\alpha,n} \Rightarrow H_0 \text{ и } K_{\text{пр}} > K_{1-\alpha,n} \Rightarrow H_1. \tag{5.20}$$

Если принимается H_1, проверяемая $x_{\text{пр}}$ исключается из ряда измерений, вычисляется новое значение $\bar{x}$ и в качестве следующего проверяемого выбирается значение с максимальным отклонением от среднего. Операция повторяется до тех пор, пока не будет принята H_0.

Таблица 5.1

Квантильные значения критерия Диксона

n	α			
	0,10	0,05	0,02	0,01
4	0,68	0,76	0,85	0,89
6	0,48	0,56	0,64	0,70
8	0,40	0,47	0,54	0,59
10	0,35	0,41	0,48	0,53
14	0,29	0,35	0,41	0,45
16	0,28	0,33	0,39	0,43
18	0,26	0,31	0,37	0,41
20	0,26	0,30	0,36	0,39
30	0,22	0,26	0,31	0,34

Критерий Диксона прост и удобен в использовании. Утверждается, что он является достаточно мощным критерием (с малой вероятностью пропустить, не исключить x_i, когда оно является промахом).

Критерии ν и K на практике используются не только для цензурирования результатов измерений (исключение промахов) – они находят более широкое применение при проверке гипотез о неслучайном (значимом) влиянии различных факторов на исследуемую величину. Приведем пример.

Пример

Получен следующий ряд значений температуры:

i	1	2	3	4	5	6	7
$t\,°C$	28,5	25,8	26,6	26,1	26,7	27,0	26,8

8	9	10	11	12	13	14	15
26,0	25,3	36,0	26,3	26,6	25,9	26,3	26,9

Вычислите доверительные границы погрешности результата измерений, исключая грубые промахи, при $\alpha = 0{,}05$.

Решите эту задачу с применением ν - и K -критериев.

1. Использование ν -критерия.

Даже беглый анализ показывает, что в ряду измерений содержатся значения, резко отличающиеся от остальных. Что касается значения $t_{10} = 36{,}0\ °C$, то, скорее всего, первая цифра – это опечатка, описка оператора. Если бы эта описка была замечена вовремя, ее легко можно было бы исправить, заменив цифру 3 на 2, и результат не вызывал бы сомнения. Однако такое исправление не было сделано. Получив последовательность для анализа, исследователь не имеет права вносить в нее исправления. Можно только проверить подозреваемое значение на промах.

Начнем с проверки выборочного распределения на нормальность. Длина ряда $n = 15$ находится на нижнем пределе применимости составного критерия $I + II$. Однако, воспользуемся им. Рассчитаем значения $\tilde{d}$ и $\tilde{m}$ по всей выборке. Результаты расчета, критические значения и принимаемые гипотезы приведены в табл. 5.2:

В первой же строке таблицы мы обнаруживаем неприятный сюрприз – по критерию $\tilde{d}$ распределение не соответствует нормальному, хотя по критерию $\tilde{m}$ нулевая гипотеза принимается. Формально, на этом анализ на нормальность и на наличие грубых промахов следует закончить. Поскольку значение $\sigma(t)$ априори неизвестно, то найти доверительные границы погрешности не представляется возможным. Роль одного большого отклонения при малом объеме выборки оказалась слишком сильной. Исключим t_{10} и проверим на нормальность оставшуюся выборку – вторая строка в табл. 5.2. Теперь обе части составного критерия удовлетворяют нулевой гипотезе – распределение соответствует нормальному. Это обстоятельство позволяет использовать ν-критерий для проверки больших отклонений на промах. Результаты проверки снова объединены (табл. 5.3).

Таблица 5.2

Проверка гипотезы о нормальности распределения
по критерию $I + II$

I				II		
n	$\tilde{d}$	$d_{0,05;n}$	$H_0 \vee H_1$	$\tilde{m}$	m	$H_0 \vee H_1$
15	0,55	0,72	H_1	1	1	H_0
14	0,75	0,72	H_0	0	1	H_0

Значение t_{10} является безусловным промахом. Что касается следующего большого отклонения $(t_1 - \bar{t})$, то ν_1 лишь незначительно превышает $\nu_{1-\alpha;n}$. Формально его можно исключить. Зато для следующего большого отклонения $(t_9 - \bar{t})$ значение ν_9 оказывается определенно меньше критического.

Обратите внимание на то, как сильно изменяются среднее значение и СКО при исключении промахов.

Таблица 5.3

Выделение грубых промахов

n	$\bar{t}$	$S(t)$	Проверяемое Значение	$\nu_{пр}$	$\nu_{1-\alpha;n}$	$H_0 \vee H_1$
15	27,1	2,6	36,0(10)	3,42	2,49	H_1
14	26,5	0,8	28,5(1)	2,5	2,46	H_1
13	26,3	0,5	25,3(9)	2,0	2,42	H_0

Найдем доверительные границы для истинного значения температуры. Параметр Стьюдента для $n = 13$ $(f = 12)$ $t_{1-0,05/2;12} = 2,18$, следовательно $\varepsilon_{\bar{t}} = 2,18 \cdot \dfrac{0,5}{\sqrt{13}} = 0,3$.

Окончательный *ответ*: $t = (26,3 \pm 0,3)\ ^\circ C$, $p = 0,95$.

2. Решение с использованием K-критерия

Вместо полного вариационного ряда выпишем только по три значения на левом и правом краях 25,3; 25,8; 25,9; …, 27,0; 28,5; 36,0. Найдем $K_{пр}^{(1)}$ для $t_{пр}^{(1)} = 36,0\ ^\circ C$.

$K_{пр}^{(1)} = (36,0 - 28,5)/(36,0 - 25,3) = 0,73$.

По таблице $K_{1-0,05;15} = 0,34$. $K_{\text{пр}}^{(1)} > K_{1-0,05;15}$, следовательно, результат $t = 36,0\ ^\circ C$ – промах. Исключим его из ряда.

Следующее проверяемое значение $t_{\text{пр}}^{(2)} = 28,5\ ^\circ C$.

Найдем $K_{\text{пр}}^{(2)} = (28,5 - 27,0)/(28,5 - 25,3) = 0,44$. $K_{1-0,05;14} = 0,35$. Значит, $t_{\text{пр}}^{(2)}$ – промах.

Теперь самое большое отклонение от $\bar{x}$ дает $t_{\text{пр}}^{(3)} = 25,3$.

Найдем $K_{\text{пр}}^{(3)} = (25,8 - 25,3)/(27,0 - 25,3) = 0,29$, $K_{1-0,05;13} = 0,36$. $K_{\text{пр}}^{(3)} < K_{1-0,05;13}$.

Значение $t = 25,3$ исключению из ряда не подлежит. Проверка по обоим критериям дает одинаковые результаты.

Задачи (Решите их, используя ν - и K -критерии).

1. С опытного поля сняли урожай пшеницы разных сортов.

Номер сорта	1	2	3	4	5	6
Урожайность, т/га	4,5	5,2	5,6	3,8	7,4	4,3

Является ли значимым (то есть неслучайным) отличие по урожайности сорта 5 от остальных? Уровень значимости $\alpha = 0,10$.

2. (шутка) «Экзамены – лотерея» – часто говорят студенты, подчеркивая этим случайный характер оценки. Во время экзаменационной сессии студент получил следующие оценки: 5, 5, 5, 5, 3. Проверьте на уровне значимости 0,05, не является ли последний результат грубым промахом экзаменатора?

6. СУММИРОВАНИЕ ПОГРЕШНОСТЕЙ

Действительная погрешность измерения является результатом действия всех ее составляющих, различных по происхождению и формам приведения. Каждая их этих составляющих, как случайная величина, может быть определена функцией распределения. Результирующая погрешность при строгом подходе должна быть охарактеризована многомерной функцией распределения. В такой постановке задача суммирования погрешностей оказывается чрезвычайно сложной, практически нереализуемой. На практике для суммы случайных составляющих погрешности постулируется нормальное распределение, для систематических (или неисключенных остатков систематических) – равномерное, а для результирующей – их композиция. Начнем с суммирования случайных погрешностей.

6.1. Погрешности косвенных измерений

Косвенными называют измерения, при которых значение физической величины y определяют на основании результатов прямых измерений физических величин x_j, функционально связанных с искомой величиной.

Пусть y является функцией случайных величин (факторов) x_j, $y = y(x_j, j = \overline{1,k})$. Точность измерения x_j характеризуется значениями СКО $\sigma(x_j)$ или, при ограниченных рядах измерений, их оценками $S(x_j)$. Задача заключается в том, чтобы по результатам измерений x_j выразить $\bar{y}$, $\sigma(y)$ или $S(y)$ и при заданной доверительной вероятности $p = 1 - \alpha$ определить доверительный интервал для y_0. Что касается $\bar{y}$, то его принято вычислять как

$$\bar{y} = y(\bar{x}_j, j = \overline{1,k}), \tag{6.1}$$

где $\bar{x}_j$ – средние значения j-ых аргументов, найденных по выборке $x_{ji}, i = \overline{1,n_j}$, n_j – объем выборки j-ого фактора.

$$\bar{x}_j = \frac{1}{n_j} \sum_{i=1}^{n_j} x_{ji} \tag{6.2}$$

Дисперсия генеральной совокупности случайной величины $\sigma^2(y)$ по определению представляет собой математическое ожидание квадрата отклонения $(y - y_0)^2 \approx (y - \bar{y})^2$:

$$\sigma^2(y) = M\left\{(y - \bar{y})^2\right\}. \tag{6.3}$$

Существуют различные методы нахождения $\sigma^2(y)$ или ее оценки. Рассмотрим здесь два из них: *линеаризации* (метод классической теории ошибок) *и приведения.*

6.1.1. Метод линеаризации

Как правило, доверительные границы погрешности измерения случайной величины оказываются существенно меньше диапазона изменения этой величины под действием управляющих факторов.

В узком интервале любая сложная функция может быть представлена ее линейным приближением. Разложим $y(x_j)$ в ряд Тейлора

$$y = \bar{y} + \frac{1}{1!}\sum_{j=1}^{k}\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_j}(x_j - \bar{x}_j) + \frac{1}{2!}\sum_{j=1}^{k}\sum_{u=1}^{k}\frac{\partial^2 y}{\partial \bar{x}_j \partial \bar{x}_u}(x_j - \bar{x}_j)(x_u - \bar{x}_u) + \\ + \frac{1}{3!}\sum_{j=1}^{k}\sum_{u=1}^{k}\sum_{v=1}^{k}\frac{\partial^3 y}{\partial \bar{x}_j \partial \bar{x}_u \partial \bar{x}_v}(x_j - \bar{x}_j)(x_u - \bar{x}_u)(x_v - \bar{x}_v) + \ldots \quad , \tag{6.4}$$

Здесь, как и ранее, использовано обозначение $\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_j} = \left.\frac{\partial y}{\partial x_j}\right|_{x_j = \bar{x}_j}$. Принцип линеаризации заключается в том, что бесконечный ряд (6.4) сокращается до линейного упрощения

$$y = \bar{y} + \sum_{j=1}^{k}\left(\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_j}\right)(x_j - \bar{x}_j) + (R), \tag{6.5}$$

где R – остаточный член, которым обычно пренебрегают.

Получим выражения для $\sigma(y)$ при различном числе k.

1. Обратимся сначала к простому случаю, когда исследуемая величина зависит только от одного фактора (аргумента) $y = y(x)$. В этом случае выражение (6.5) при $R = 0$ принимает вид

$$y = \bar{y} + \frac{\partial y}{\partial \bar{x}}(x - \bar{x}). \tag{6.6}$$

Подставим его в условие (6.3)

$$\sigma^2(y) = M\left\{\left[\bar{y} + \frac{\partial y}{\partial \bar{x}}(x - \bar{x}) - \bar{y}\right]^2\right\}. \tag{6.7}$$

Имея в виду, что постоянный множитель $\left(\frac{\partial y}{\partial \bar{x}}\right)^2$ можно вынести из-под знака математического ожидания и что $M\left\{(x - \bar{x})^2\right\} = \sigma^2(x)$, легко найдем

$$\sigma^2(y) = \left(\frac{\partial y}{\partial \bar{x}}\right)^2 M\left\{(x-\bar{x})^2\right\} = \left(\frac{\partial y}{\partial \bar{x}}\right)^2 \sigma^2(x). \qquad (6.8)$$

Отсюда среднее квадратическое отклонение (СКО)

$$\sigma(y) = \sigma(x)\sqrt{\left(\frac{\partial y}{\partial \bar{x}}\right)^2}. \qquad (6.9)$$

Для СКО результата косвенного измерения $\sigma_{\bar{y}}$ справедливо

$$\sigma_{\bar{y}} = \frac{\sigma(x)}{\sqrt{n}}\sqrt{\left(\frac{\partial y}{\partial \bar{x}}\right)^2} = \sigma_{\bar{x}}\sqrt{\left(\frac{\partial y}{\partial \bar{x}}\right)^2}, \qquad (6.10)$$

где n – длина ряда измерения.

Рассматривая $\sigma_{\bar{y}}$ как параметр генеральной совокупности, доверительные границы погрешности $\varepsilon_{\bar{y}}$ представим формулой (см. раздел 3.2)

$$\varepsilon_{\bar{y}} = z_{1-\alpha/2}\sigma_{\bar{y}}, \qquad (6.11)$$

где $z_{1-\alpha/2}$ – квантиль стандартного нормального распределения. Если значение $\sigma(x)$ априори неизвестно, то при ограниченной длине ряда n следует перейти к $S(x)$ и $S(y)$

$$S(y) = S(x)\sqrt{\left(\frac{\partial y}{\partial \bar{x}}\right)^2} \qquad (6.12)$$

и соответственно

$$\varepsilon_{\bar{y}} = t_{1-\alpha/2,f}\frac{S(x)}{\sqrt{n}} = t_{1-\alpha/2;f}\cdot S_{\bar{y}}, \qquad (6.13)$$

где $t_{1-\alpha/2,f}$ – коэффициент Стьюдента (квантиль t-распределения).

Число степеней свободы для коэффициента Стьюдента $f = n-1$.

Пример

Для определения глубины колодца измеряется время свободного падения камня до поверхности воды. По результатам шести измерений получено среднее время $\bar{t} = 2{,}0$ с и $S(t) = 0{,}15$ с. В каком доверительном интервале находится истинное значение глубины колодца при уровне значимости $\alpha = 0{,}05$?

Решение: $\bar{h} = \frac{g\bar{t}^2}{2}$, $\bar{h} = \frac{9{,}8(2{,}0)^2}{2} = 19{,}6$ м, $f = n-1 = 6-1 = 5$,

$S(h) = \left(\frac{\partial h}{\partial t}\right)S(t) = gt\cdot S(t) = 9{,}8\cdot 2{,}0\cdot 0{,}15 = 2{,}94$ м, $f = n-1 = 6-1 = 5$,

табличное значение коэффициента Стьюдента $t_{1-0,05/2;5} = 2,57$,

$\varepsilon_{\bar{h}} = 2,57 \cdot \frac{2,94}{\sqrt{6}} = 3,05 \approx 3$ м. *Ответ*: $h = (20 \pm 3)$ м, $p = 0,95$.

2. Обратимся к более сложной ситуации. Пусть $k = 2$, то есть

$$y = y(x_1, x_2). \tag{6.14}$$

Линеаризованное разложение (6.14) в ряд Тейлора имеет вид

$$y = \bar{y} + \sum_{j=1}^{2} \frac{\partial y}{\partial \bar{x}_j}(x_j - \bar{x}_j). \tag{6.15}$$

Подставим (6.15) в (6.3) и выполним несложные преобразования

$$\sigma^2(y) = M\left\{\left[\sum_{j=1}^{2} \frac{\partial y}{\partial \bar{x}_j}(x_j - \bar{x}_j)\right]^2\right\} = M\left\{\left(\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_1}\right)^2 (x_1 - \bar{x}_1)^2 + \right.$$

$$\left. + 2\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_1}\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_2}(x_1 - \bar{x}_1)(x_2 - \bar{x}_2) + \left(\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_2}\right)^2 (x_2 - \bar{x}_2)^2\right\} = \tag{6.16}$$

$$= \left(\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_1}\right)^2 \sigma^2(x_1) + 2\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_1}\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_2} M\{(x_1 - \bar{x}_1)(x_2 - \bar{x}_2)\} + \left(\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_2}\right)^2 \sigma^2(x_2).$$

Множитель $M\{(x_1 - \bar{x}_1)(x_2 - \bar{x}_2)\}$ представляет собой корреляционный момент двух случайных величин x_1 и x_2. Умножим и разделим его на произведение $\sigma(x_1)\sigma(x_2)$. Выделим отношение

$$\rho_{x_1 x_2} = \frac{M\{(x_1 - \bar{x}_1)(x_2 - \bar{x}_2)\}}{\sigma(x_1)\sigma(x_2)}. \tag{6.17}$$

Величину $\rho_{x_1 x_2}$ называют *коэффициентом корреляции.*

С учетом (6.17) выражение для $\sigma(y)$ можно представить в виде

$$\sigma(y) = \sqrt{\left(\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_1}\right)^2 \sigma^2(x_1) + 2\rho_{x_1 x_2}\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_1}\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_2}\sigma(x_1)\sigma(x_2) + \left(\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_2}\right)^2 \sigma^2(x_2)}. \tag{6.18}$$

Множители $\left(\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_{1,(2)}}\right)^2$ и $\rho_{x_1x_2}\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_1}\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_2}$ называют коэффициентами влияния. Если $\sigma(x_1)$ и $\sigma(x_2)$ известны, а число измерений x_1 и x_2 одинаково: $n_1 = n_2 = n$, то

$$\sigma_{\bar{y}} = \frac{\sigma(y)}{\sqrt{n}}, \tag{6.19}$$

а доверительные границы погрешности вычисляются снова по формуле (6.11).

Если $\sigma(x_j)$ неизвестны, а число n ограничено, то следует перейти к выборочным коэффициенту корреляции $r_{x_1x_2}$ и СКО $S(y)$.

$$r_{x_1x_2} = \frac{\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_{1i}-\bar{x}_1)(x_{2i}-\bar{x}_2)}{S(x_1)S(x_2)}, \tag{6.20}$$

$$S(y) = \sqrt{\left(\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_1}\right)^2 S^2(x_1) + 2r_{x_1x_2}\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_1}\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_2}S(x_1)S(x_2) + \left(\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_2}\right)^2 S^2(x_2)} \tag{6.21}$$

Выборочный коэффициент корреляции изменяется в пределах $-1 \le r_{x_1x_2} \le +1$. При этом в реальных ситуациях для случайно распределенных x_1 и x_2 практически всегда $|r_{x_1x_2}| < 1$. В литературе встречаются различные рекомендации относительно учета коэффициента корреляции в выражении (6.20). Часто предлагают исключить второе слагаемое в формуле (6.20), если $|r_{x_1x_2}| < 0{,}3...0{,}5$ и даже если $|r_{x_1x_2}| < 0{,}7$.

Нам представляется, что здесь необходимо следовать только одному правилу: коэффициент корреляции должен быть значимым при заданном уровне α. Выборочный коэффициент корреляции, как и всякая случайная величина, определяется с погрешностью, его значение в общем случае не равно значению для генеральной совокупности: $r_{x_1x_2} \neq \rho_{x_1x_2}$.

Значимость или незначимость выборочного коэффициента корреляции устанавливается проверкой нулевой гипотезы $H_0 : \rho_{x_1x_2} = 0$ против альтернативной $H_1 : \rho_{x_1x_2} \neq 0$. Проверка заключается в сравнении выборочного коэффициента корреляции с критическим значением $r_{1-\alpha/2,f}$ (см. табл. 6.1). Подробно эта задача рассматривается далее в разделе 11. Здесь приведем только решающее правило:

$$|r_{x_1x_2}| \le r_{1-\alpha/2,f} \Rightarrow H_0, \quad |r_{x_1x_2}| > r_{1-\alpha/2,f} \Rightarrow H_1. \tag{6.22}$$

Если принимается нулевая гипотеза, то, каким бы ни было значение $r_{x_1x_2}$, при вычислениях задается $r_{x_1x_2}=0$. В случае принятия альтернативной гипотезы при вычислениях используется значение выборочного коэффициента корреляции $r_{x_1x_2}$.

Если объемы выборок $n_1=n_2=n$, то осложнений при реализации (6.20), (6.21) не возникает.

Доверительные границы $\varepsilon_{\bar{y}}$ вычисляются по общей формуле (6.13). Число степеней свободы для коэффициента $t_{1-\alpha/2,f}$, как и ранее, $f=n-1$.

Таблица 6.1

Критические значения $r_{x_1x_2,f}$ при различных значениях числа степеней свободы $f=n-2$ и $\alpha=0{,}05$

$f=n-2$	1	2	3	4	5	8	10
$r_{1-\alpha/2,f}$	0,997	0,950	0,878	0,811	0,754	0,632	0,576

$f=n-2$	15	20	30	40	50	70	100
$r_{1-\alpha/2,f}$	0,482	0,423	0,349	0,304	0,273	0,232	0,195

Примеры и упражнения

Рассмотрим несколько случаев нахождения $S(y)$:

1) $y=x_1+x_2$, тогда

$\frac{\partial y}{\partial x_1}=\frac{\partial y}{\partial x_2}=1$, по формуле (6.21) $S(y)=\sqrt{S^2(x_1)+2r_{x_1x_2}S(x_1)S(x_2)+S^2(x_2)}$.

Если, например, $r_{x_1x_2}=1$, то $S(y)=S(x_1)+S(x_2)$. Это означает, что для функционально связанных между собой x_1 и x_2 суммарное СКО равняется алгебраической сумме СКО составляющих.

При $r_{x_1x_2}=0$ получим. $S(y)=\sqrt{S^2(x_1)+S^2(x_2)}$.

Это геометрическая сумма СКО:

2) $y=x_1-x_2$, $S(y)=\sqrt{S^2(x_1)-2r_{x_1x_2}S(x_1)S(x_2)+S^2(x_2)}$.

Если $r_{x_1x_2}=1$, то $S(y)=S(x_1)-S(x_2)$.

Если $r_{x_1x_2}=0$, то $S(y)=\sqrt{S^2(x_1)+S^2(x_2)}$.

Обратите внимание на то, что при отсутствии корреляции между x_1 и x_2 суммарные СКО оказались одинаковыми в обоих примерах.

В качестве упражнения докажите, что для двух следующих выражений справедливы соотношения

3) $y = x_1 x_2$, $S(y) = x_1 x_2 \sqrt{\dfrac{S^2(x_1)}{x_1^2} + 2r_{x_1 x_2} \dfrac{S(x_1)}{x_1} \cdot \dfrac{S(x_2)}{x_2} + \dfrac{S^2(x_2)}{x_2^2}}$.

4) $y = \dfrac{x_1}{x_2}$, $S(y) = \dfrac{x_1}{x_2} \sqrt{\dfrac{S^2(x_1)}{x_1^2} - 2r_{x_1 x_2} \dfrac{S(x_1)}{x_1} \cdot \dfrac{S(x_2)}{x_2} + \dfrac{S^2(x_2)}{x_2^2}}$.

Задача

Относительная влажность воздуха, измеряемая методом точки росы, вычисляется как $U = (E_\tau / E_t) \cdot 100$, где E_τ и E_t, соответственно давление насыщенного водяного пара при температуре точки росы τ и температуре воздуха t, U (в процентах). По результатам четырехкратных измерений получено: $\bar{t} = 11{,}0\ ^\circ C$, $S(t) = 0{,}1\ ^\circ C$, $\bar{\tau} = 1{,}0\ ^\circ C$, $S(\tau) = 0{,}2\ ^\circ C$. Найдите среднее значение и доверительные границы погрешности измерения относительной влажности. Задайте $\alpha = 0{,}05$.

Для справки: $\dfrac{dE}{dT} = LE/(R_\text{п} T^2)$, $L \approx 2{,}5 \cdot 10^6$ Дж/кг,

$R_\text{п.} = 461$ Дж/(кг К), $E_{1,0} = 6{,}56$ гПа, $E_{11,0} = 13{,}12$ гПа, $t_{1-0,05/2;3} = 3{,}18$.

3. Обобщим метод линеаризации на случай произвольного числа факторов ($k > 2$). Подставим (6.5) (снова полагая $R = 0$) в выражение (6.3).

$$\sigma^2(y) = M\left\{\left(\sum_{j=1}^{k} \frac{\partial y}{\partial \bar{x}_j}(x_j - \bar{x}_j)\right)^2\right\} \tag{6.23}$$

Возьмем многочлен в квадрат и перейдем, как и ранее, от корреляционного момента к коэффициентам корреляции.

$$\sigma^2(y) = \sum_{j=1}^{k} \sum_{u=1}^{k} \rho_{x_j x_u} \cdot \frac{\partial y}{\partial \bar{x}_j} \cdot \frac{\partial y}{\partial \bar{x}_u} \cdot \sigma(x_j)\sigma(x_u) \tag{6.24}$$

Поскольку при $j = u$ коэффициенты корреляции $\rho_{x_j x_u} = \rho_{x_j x_j} = 1$, удобно разделить весь многочлен (6.24) на две группы сумм – не содержащие и содержащие коэффициенты корреляции.

$$\sigma^2(y) = \sum_{j=1}^{k} \left(\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_j}\right)^2 \sigma^2(x_j) + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 0}}^{k} \sum_{u=1}^{k} \rho_{x_j x_u} \frac{\partial y}{\partial \bar{x}_j} \cdot \frac{\partial y}{\partial \bar{x}_u} \sigma(x_j)\sigma(x_u) \tag{6.25}$$

Имея в виду, что $\rho_{x_j x_u} = \rho_{x_u x_j}$, выражение (6.25) можно переписать в виде

$$\sigma^2(y) = \sum_{j=1}^{k} \left(\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_j}\right)^2 \sigma^2(x_j) + 2 \sum_{j=1}^{k} \sum_{u=j \neq 1}^{k} \rho_{x_j x_u} \frac{\partial y}{\partial \bar{x}_j} \cdot \frac{\partial y}{\partial \bar{x}_u} \sigma(x_j)\sigma(x_u). \tag{6.26}$$

Доверительные границы погрешности при одинаковых объемах выборки $n_j = const = n$ при известных и неизвестных $\sigma(x_j)$ вычисляются, соответственно, по формулам (6.11) и (6.13). При переходе в (6.25), (6.26) к выборочным характеристикам все парные коэффициенты корреляции следует проверить на значимость, используя решающее правило (6.22). Слагаемые с незначимыми коэффициентами корреляции исключаются из формул.

4. Обратимся теперь к ситуации чаще встречающейся на практике. Пусть длины рядов измерений неодинаковы: $n_j \neq n_u$, $j,u = \overline{1,k}$. Непосредственное вычисление СКО результата измерений как $\sigma_{\bar{y}} = \sigma(y)/\sqrt{n}$ или $S_{\bar{y}} = S(y)/\sqrt{n}$ в этих случаях не представляется возможным, так как значение n не определено. При известных $\sigma(x_j)$ и $\rho_{x_j x_u}$ убедительной и логичной является рекомендация суммировать дисперсии $\sigma^2_{\bar{x}_j}$ с учетом коэффициентов влияния. В сокращенной форме (6.24) выражение для суммарной дисперсии имеет вид

$$\sigma^2_{\bar{y}_j} = \sum_{j=1}^{k}\sum_{u=1}^{k} \rho_{x_j x_u} \frac{\partial y}{\partial \bar{x}_j}\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_u}\sigma_{\bar{x}_j}\sigma_{\bar{x}_u}. \qquad (6.27)$$

Доверительные границы погрешности вычисляются по формуле (6.11).

Рассмотрим снова простейшую функцию $y = x_1 + x_2$ при длинах рядов n_1 и n_2. Из (6.27) получим

$$\sigma_{\bar{y}} = \sqrt{\frac{\sigma^2(x_1)}{n_1} + 2\rho_{x_1x_2}\frac{\sigma(x_1)}{\sqrt{n_1}}\frac{\sigma(x_2)}{\sqrt{n_2}} + \frac{\sigma^2(x_2)}{n_2}}. \qquad (6.28)$$

При $\sigma(x_1) = \sigma(x_2) = \sigma(x)$ и $\rho_{x_1x_2} = 0$ получим часто используемую при суммировании погрешностей формулу

$$\sigma_{\bar{y}} = \sigma(x)\sqrt{\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}}. \qquad (6.29)$$

Положение становится менее определенным, если $\sigma(x_j)$ и $\rho_{x_j x_u}$ неизвестны. При переходе к $S(x_j)$ и $r_{x_j x_u}$ часто используют формулу, аналогичную (6.27),

$$S^2_{\bar{y}} = \sum_{j=1}^{k}\sum_{u=1}^{k} r_{x_j x_u}\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_j}\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_u}\frac{S(x_j)}{n_j}\frac{S(x_u)}{n_u}. \qquad (6.30)$$

Формула (6.30) не выводится строго из определения (6.3). Скорее это компромиссное предложение, которое в частном случае при больших n_j приближается к (6.27). При

малых, но неодинаковых n_j погрешности в оценках $S(x_j)$ и $r_{x_j x_u}$ оказываются существенно различными. Возникающую при этом неопределенность стараются скомпенсировать выбором эффективного числа степеней свободы для коэффициента Стьюдента в формуле ДГП.

$$\varepsilon_{\bar{y}} = t_{1-\alpha/2, f^*} \cdot S_{\bar{y}} \tag{6.31}$$

В литературе приводятся различные рекомендации нахождения f^*. Например, для упоминавшейся выше связи $y = x_1 + x_2$ предлагается формула

$$f^* = n_1 + n_2 - 2. \tag{6.32}$$

На первый взгляд, для суммы двух величин формула (6.32) кажется вполне логичной. Однако когда эту же формулу предлагают использовать для разности $y = x_1 - x_2$, такая рекомендация вызывает сомнение: число степеней свободы разности не может быть больше числа степеней свободы составляющих.

Предлагают более сложные формулы для f^* или n^* – эффективной длины ряда. Вот одна из них:

$$\ln n^* = \frac{\sum_{j=1}^{k} \left(\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_j} \right)^2 S_{\bar{x}_j}^2 \ln n_j}{\sum_{j=1}^{k} \left(\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_j} \right)^2 S_{\bar{x}_j}^2}. \tag{6.33}$$

Популярной в литературе последних лет является формула

$$f^* = \frac{\left[\sum_{j=1}^{k} \left(\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_j} \right)^2 \frac{S^2(x_j)}{n_j} \right]^2}{\sum_{j=1}^{k} \left(\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_j} \right)^4 \frac{S^4(x_j)}{n^2} \cdot \frac{1}{n_j + 1}} - 2. \tag{6.34}$$

Внешне она выглядит вполне убедительной. Однако детальный анализ показывает, что она, также как и предыдущая, во многих случаях дает завышенные значения f^*.. В частности легко убедиться, что для суммы $y = x_1 + x_2$ и разности $y = x_1 - x_2$ формула (6.34) практически сводится к (6.31). Кроме того, в выражениях (6.33) и (6.34) не учитывается корреляция между факторами.

5. Представляется, что неопределенностей, связанных с вычислением $S_{\bar{y}}$ и f^* можно избежать, если вычислять непосредственно $\tilde{\varepsilon}_{\bar{y}}$, как сумму произведений доверительных границ $\varepsilon_{\bar{x}_j}$ и коэффициентов влияния. В общем случае это можно выразить формулой

$$\tilde{\varepsilon}_{\bar{y}} = \left(\sum_{j=1}^{k} \sum_{u=1}^{k} r_{x_j x_u} \frac{\partial y}{\partial \bar{x}_j} \frac{\partial y}{\partial \bar{x}_u} \varepsilon_{\bar{x}_j} \varepsilon_{\bar{x}_u} \right)^{1/2}. \qquad (6.35)$$

Этот подход не используется в теории измерений, поскольку считается, что полученные таким образом значения $\tilde{\varepsilon}_{\bar{y}}$ оказываются завышенными по сравнению с $\varepsilon_{\bar{y}}$ (6.31). Однако по нашему мнению это превышение, если оно проявляется, связано не с дефектами выражения (6.35), а с завышенными значениями f^*. Правомерность выражения (6.35) подтверждается например тем, что в частном случае $n_j = n_u$ мы получим в точности те же формулы (6.30), (6.13).

Если для дальнейшего анализа требуется знать f^*, то эту величину можно определить из обратного соотношения

$$t_{1-\alpha/2, f^*} = \tilde{\varepsilon}_{\bar{y}} / S_{\bar{y}}. \qquad (6.36)$$

Определив $t_{1-\alpha/2, f^*}$, далее по таблицам t-распределения (или по формуле (3.58)) следует найти f^*.

6. В заключение этого параграфа рассмотрим границы применимости линейной аппроксимации функции $y = y(x_j, j = \overline{1,k})$.. Считается, что линеаризация является допустимой, если выполняется условие

$$S_{\bar{y}} \geq \zeta \cdot R, \qquad (6.37)$$

где $R-$ остаточный член разложения в ряд Тейлора, параметр $\zeta > 1$; рекомендованное значение $\zeta = 1{,}25$. В качестве R достаточно рассмотреть сумму со вторыми производными.

$$R = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{k} \sum_{u=1}^{k} \frac{\partial^2 y}{\partial \bar{x}_j \partial \bar{x}_u} \Delta x_j \Delta x_u \qquad (6.38)$$

Вместо Δx_j обычно рекомендуют подставлять максимальные по абсолютным значениям отклонения в рядах измерений каждого из факторов. Однако такой выбор не застрахован от случайностей. Более логичным кажется переход к $\Delta x_j = \varepsilon(x_j) = t_{1-\alpha/2;f_j} \cdot S(x_j)$, где $f_j = n_j - 1$.

Таким образом, условием применимости линеаризации является соотношение

$$S_{\bar{y}} \geq \frac{\zeta}{2} \sum_{j=1}^{k} \sum_{u=1}^{k} \frac{\partial^2 y}{\partial \bar{x}_j \partial \bar{x}_u} \cdot t_{1-\alpha/2;f_j} \cdot S(x_j) \cdot t_{1-\alpha/2;f_u} \cdot S(x_u). \qquad (6.38)$$

В частном случае (при $k = 1$)

$$S_{\bar{y}} \geq \frac{\zeta}{2} \left(\frac{\partial y}{\partial \bar{x}} \right)^2 t^2_{1-\alpha/2;f} \cdot S^2(x). \qquad (6.40)$$

Если условия (6.39), (6.40) не выполняются, то метод линеаризации оказывается слишком грубым.

Пример

Оценим применимость метода линеаризации для существенно нелинейной зависимости y от x.

Объем тонкостенной сферы V находится как результат косвенного измерения. Измеряемым параметром является периметр максимального (по площади) сечения сферы l. Результаты четырехкратных измерений: $\bar{l} = 1{,}11$ м, $S(l) = 0{,}01$ м, $n = 4$.

Формулы: $V = \frac{l^3}{6\pi^2}$, $S(V) = \frac{\partial V}{\partial \bar{l}} \cdot S(l) = \frac{\bar{l}^2}{2\pi^2} \cdot S(l)$, $S_{\bar{V}} = \frac{S(V)}{\sqrt{n}}$,

$\frac{\partial^2 V}{\partial \bar{l}^2} = \frac{\bar{l}}{\pi^2}$, $\varepsilon_{\bar{V}} = t_{1-\alpha/2;f} \cdot S_{\bar{V}}$, $R = \frac{\bar{l}}{2\pi^2} (t_{1-\alpha/2;f} \cdot S(l))^2$.

Результаты вычислений: $\bar{V} = 23{,}1 \cdot 10^{-3}$ м^3, $S(V) = 0{,}6 \cdot 10^{-3}$ м^3, $S_{\bar{V}} = 0{,}3 \cdot 10^{-3}$ м^3, $t_{1-0{,}05/2;3} = 3{,}18$, $\varepsilon_{\bar{V}} = 1{,}0 \cdot 10^{-3}$ м^3, $R = 0{,}2 \cdot 10^{-3}$ м^3. $S_{\bar{V}} > 1{,}25R$ – линеаризация допустима.

Ответ: $V = (23{,}1 \pm 1{,}0) \cdot 10^{-3}$ м^3, $p = 0{,}95$.

6.1.2. Метод приведения

Если явный вид функции $y = y(x_j, j = \overline{1,k})$ оказывается достаточно сложным, а число исследуемых факторов и объемы выборок по каждому из факторов велики, то классический метод позволяет резко сократить объем вычислений. Платой за такое сокращение является линеаризация, упрощающая используемую математическую модель.

Широкое распространение быстродействующей вычислительной техники не только решает проблему громоздких расчетов, но и уменьшает число вычислительных ошибок, искажающих окончательный результат. В связи с этим появилась реальная возмож-

ность применения так называемого *метода приведения*. Суть его заключается в следующем. Если $y = y(x_{ji}),\quad j = \overline{1,k},\quad i = \overline{1,n_j}$ и если x_{ji} представляет собой результаты совместных измерений, при этом все n_j одинаковы, $n_j = const = n$, то для каждого сочетания x_{ji} можно рассчитать y_i. Последовательный ряд значений y_i будем теперь рассматривать как выборку случайной величины y объема n.. Эту выборку обрабатывают обычным образом, находя

$$\bar{y}^* = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i\,, \tag{6.41}$$

$$S^*(y) = \sqrt{\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y}^*)^2}\,, \tag{6.42}$$

$$S^*_{\bar{y}} = \frac{S^*(y)}{\sqrt{n}}, \tag{6.43}$$

$$\varepsilon^*_{\bar{y}} = t_{1-\alpha/2;f^*} \cdot S^*_{\bar{y}}. \tag{6.44}$$

Значок $[*]$ отражает здесь отличие рассчитанных статистических характеристик от аналогичных, найденных ранее методом линеаризации. Легко показать, что при линейных зависимостях y от x_j статистические характеристики, полученные обоими методами, в точности равны друг другу. В качестве упражнения рекомендуется доказать например, что при $y = x_1 + x_2$

$$S^*(y) = S(y) \text{ или}$$

$$\sqrt{\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y}^*)^2} = \sqrt{S^2(x_1) + 2r_{x_1x_2}S(x_1)S(x_2) + S^2(x_2)}\,.$$

Для $S^{*2}(y)$ число степеней свободы $f^* = n - 1$. Таким образом, равенство $S^*(y) = S(y)$ лишний раз доказывает ошибочность рекомендации определения числа степеней свободы для $S(y)$ как $f = n_1 + n_2 - 2$.

Для нелинейных связей между y и x_j значения статистических характеристик, полученных классическим методом и методом приведения, окажутся различными. Представляется однако, что оценки методом приведения являются более строгими.

Недостатком метода является то обстоятельство, что ряды измерений всех факторов должны быть совместимыми, то есть синхронизированными во времени или согласо-

ванными по условиям измерения. Кроме того, при различных n_j длина ряда y_i определяется длиной самого короткого из рядов. Остальная информация будет потеряна.

6.2. Суммирование систематических и случайных погрешностей

6.2.1. Суммирование систематических погрешностей

Различают два вида систематических погрешностей: ϑ-погрешности, происхождение которых известно, а численные значения с той или иной точностью могут быть найдены, и θ-погрешности, значения которых заданы в определенных пределах. К первому виду относят обычно методические погрешности. Например, погрешности измерения давления ртутным барометром, связанные с зависимостью плотности ртути от ее температуры. Погрешности второго вида определяются классом точности средств измерений (подробнее об этом см. в разделе 1).

1. Введение поправок

Погрешности первого вида устраняют введением поправок. При обнаружении q погрешностей вида ϑ_ν, $\nu = \overline{1,q}$ для каждой из них следует вычислить поправки $C_\nu = -\vartheta_\nu$. Поправки C_ν могут быть представлены числом (если погрешность аддитивна), формулой (если погрешность мультипликативна), таблицей, графиком. Поправки следует вводить в результат каждого отдельного измерения x_i', либо к среднему значению (результату измерения) $\bar{x}'$, когда поправки постоянны или линейно связаны со значениями x_i'.

Пусть $\bar{x}'$ – неисправленный результат измерения случайной величины, тогда ее исправленное после введения ν-ой поправки значение

$$\bar{x}_\nu = \bar{x}' + \sum_{\nu=1}^{\nu} C_\nu . \tag{6.45}$$

При этом каждая поправка в свою очередь рассчитывается, а стало быть и вводится с некоторой погрешностью, увеличивающей диапазон неопределенности (доверительный интервал) для истинного значения измеряемой величины. Эти погрешности называют неисключенными остатками систематических погрешностей. Характеризуя рассеяние поправки ее дисперсией $\sigma^2(C_\nu)$ и используя общий принцип суммирования дисперсий, получим

$$\sigma^2\left(\sum_{\nu=1}^{\nu} C_\nu\right) = \sum_{\nu=1}^{\nu} \sigma^2(C_\nu). \tag{6.46}$$

2. *Композиция систематических погрешностей*

Обратимся к погрешностям второго вида, которые не устраняются введением поправок. Задача заключается в том, чтобы найти их сумму. Строгое решение этой задачи требует знания законов распределения составляющих. Обычно предполагается, что погрешности средств измерений, задаваемые классом точности, имеют равномерное распределение. Тогда композицию θ_μ, $\mu = \overline{1,m}$, m – число суммируемых погрешностей, находят по формуле

$$\theta = k_{\alpha,m}\sqrt{\sum_{\mu=1}^{m}\theta_\mu^2}\,, \tag{6.47}$$

где $k_{\alpha,m}$ – коэффициент, определяемый уровнем значимости α и числом m.

Пренебрегая зависимостью от m, чаще вместо $k_{\alpha,m}$ используют $\bar{k}_\alpha$. Рекомендуются следующие значения $\bar{k}_\alpha$ при разных α

α	0,10	0,05	0,01
$\bar{k}_\alpha$	0,95	1,1	1,4

В предположении равномерного распределения 0

$$\sigma(\theta) = \sqrt{\frac{\theta^2}{3}} = \sqrt{\frac{1}{3}\cdot\sum_{\mu=1}^{m}\theta_\mu^2}\,. \tag{6.48}$$

6.2.2. Суммирование случайных и систематических погрешностей

1. *Прямые измерения.* Для нахождения доверительных границ погрешности результата измерения, определяемых как вкладом не исключенных систематических, так и случайных погрешностей, ГОСТ рекомендует обобщающую формулу

$$\Delta_\alpha = K_\alpha \cdot S_\Sigma\,, \tag{6.49}$$

где S_Σ – суммарное СКО, которое находится как

$$S_\Sigma = \sqrt{\sigma^2(\theta) + S_{\bar{x}}^2}\,. \tag{6.50}$$

Коэффициент K_α по структуре формулы (6.49) является аналогом параметров $z_{1-\alpha/2}$ или $t_{1-\alpha/2;f}$, использованных ранее в формулах (6.11), (6.13). Для нахождения K_α предлагается выражение

$$K_\alpha = \frac{t_{1-\alpha/2;f} \cdot S_{\bar{x}} + \bar{k}_\alpha \sqrt{\sum_{\mu=1}^{m} \theta_\mu^2}}{S_{\bar{x}} + \sqrt{\frac{1}{3} \cdot \sum_{\mu=1}^{m} \theta_\mu^2}} = \frac{t_{1-\alpha/2;f} S_{\bar{x}} + \bar{k}_\alpha \cdot \theta}{S_{\bar{x}} + \sigma(\theta)}. \qquad (6.51)$$

В зависимости от соотношения между θ и $S_{\bar{x}}$ формула (6.49) сводится к двум крайним случаям:

если $\theta / S_{\bar{x}} > 8$, то $\Delta_\alpha = \theta = \bar{k}_\alpha \sqrt{\sum_{\mu=1}^{m} \theta_\mu^2} = \bar{k}_\alpha \cdot \theta$;

если $\theta / S_{\bar{x}} < 0{,}8$, то $\Delta_\alpha = \varepsilon_{\bar{x}} = t_{1-\alpha/2;f} \cdot S_{\bar{x}}$.

Диапазон использования формулы (6.49) задается неравенством $0{,}8 < \frac{\theta}{S_{\bar{x}}} < 8$. Несимметричность этого неравенства связана с разным вкладом θ и $S_{\bar{x}}$ в S_Σ.

Преобразованным вариантом формулы (6.49) является выражение

$$\Delta_\alpha = K'_\alpha (t_{1-\alpha/2;f} S_{\bar{x}} + \bar{k} \cdot \theta). \qquad (6.52)$$

Формально из (6.49) – (6.51) для K'_α можно найти

$$K'_\alpha = \frac{\sqrt{\theta^2/3 + S_{\bar{x}}^2}}{S_{\bar{x}} + \theta/\sqrt{3}}.$$

Более строго этот параметр рассчитывается с учетом предполагаемых функций распределения $S_{\bar{x}}$ (нормальное распределение) и θ (равномерное). Значения K'_α для двух уровней значимости представлены в табл. 6.2.

Таблица 6.2

Значения коэффициента K'_α при разных $\theta / S_{\bar{x}}$

$\theta / S_{\bar{x}}$	0,5	0,75	0,80	1	2	3	4	5	6	7	8
$K'_{0,05}$	0,81	0,77	0,76	0,74	0,71	0,73	0,76	0,78	0,79	0,80	0,85
$K'_{0,01}$	0,87	0,85	0,84	0,82	0,80	0,81	0,82	0,83	0,83	0,84	0,85

2. *Косвенные измерения*. Общий подход заключается в том, что сначала находят $S_{\bar{y}}$ – СКО искомой величины в соответствии с процедурами, описанными в 6.1. Затем следует вычислить суммарную систематическую погрешность $\theta(y)$. Как и при суммировании случайных погрешностей, учтем коэффициенты влияния. Тогда, резонно полагая отсутствие корреляции между систематическими погрешностями, из формулы (6.24) получим

$$\theta(y)=\sqrt{\sum_{j=1}^{k}\left(\frac{\partial y}{\partial \bar{x}_j}\right)^2\theta_j^2}\,. \qquad (6.53)$$

Теперь можно найти $S_{\bar{y},\Sigma}$

$$S_{\bar{y},\Sigma}=\sqrt{\theta^2(y)/3+S_{\bar{y}}^2}\,. \qquad (6.53)$$

Доверительные границы погрешности результата измерения вычисляют по формулам (6.49) либо (6.52).

Примечание. Следуя альтернативному подходу, предложенному в разделе (6.1) (см. формулу (6.35)), доверительные границы суммарной погрешности можно найти как

$$\tilde{\Delta}_\alpha=\sqrt{\tilde{\varepsilon}_{\bar{y}}^2+(\bar{K}_\alpha\theta)^2}\,. \qquad (6.55)$$

6.2.3. Критерий [illegible] поправок

Введение ν-ой поправки приближает исправленное значение x_ν (или $\bar{x}_\nu$) к неизвестному, но реально существующему истинному значению x_0. С другой стороны, неизбежно появляющаяся при этом погрешность $\sigma(C_\nu)$ добавляется к другим погрешностям, увеличивая доверительные границы $\Delta_{\alpha,\nu}$ (рис. 6.1). Без введения поправок или при малом числе введенных поправок в ситуации, представленной на этом рисунке, x_0 вообще оказывается вне доверительного интервала. С увеличением ν значение x приближается к x_0, но растет $\Delta_{\alpha,\nu}$ и качество измерений снова ухудшается.

Выберем в качестве характеристики сравнения значение x, удовлетворяющее условию $x=\bar{x}+\Delta_\alpha$. Обозначим его $x^{\text{в}}$ – верхняя граница доверительного интервала.

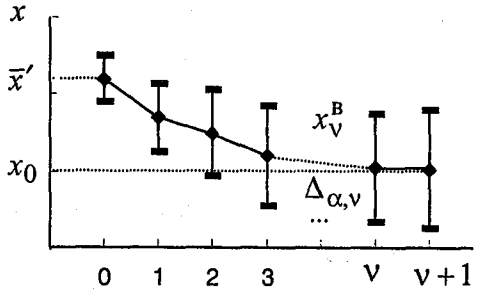


Рис. 6.1. Изменение соотношения между исправленным значением x_ν, истинным x_0 и шириной доверительного интервала $\Delta_{\alpha,\nu}$ при последовательном введении поправок.

После введения ν-ой поправки $x_\nu^{в} = \bar{x}_\nu + \Delta_{\alpha,\nu}$, после введения $(\nu+1)$-ой поправки $x_{\nu+1}^{в} = \bar{x}_{\nu+1} + \Delta_{\alpha,\nu+1}$. Условием целесообразности введения поправки является неравенство $x_\nu^{в} > x_{\nu+1}^{в}$ – введение поправки должно приближать верхнюю границу доверительного интервала к истинному значению. Но $x_{\nu+1}^{в} = \bar{x}_\nu - C_{\nu+1}$. Следовательно $(\nu+1)$-ую поправку целесообразно вводить, пока

$$C > \Delta_{\alpha,\nu+1} - \Delta_{\alpha,\nu}. \tag{6.56}$$

В более общем случае при $C_\nu \lessgtr 0$ и $\bar{x}' \lessgtr x_0$, получим

$$|C_{\nu+1}| > \Delta_{\alpha,\nu+1} - \Delta_{\alpha,\nu}, \tag{6.57}$$

Используем для вычисления $\Delta_{\alpha,\nu}$ и $\Delta_{\alpha,\nu+1}$ выражение (6.49). Подставляя в него соответственно $S_{\Sigma,\nu}^2 = S_{\bar{x}}^2 + \sigma^2(\theta) + \sum_{\nu=1}^{\nu}\sigma^2(C_\nu)$ и

$$S_{\Sigma,\nu+1}^2 = S_{\bar{x}}^2 + \sigma^2(\theta) + \sum_{\nu=1}^{\nu}\sigma^2(C_\nu) + \sigma^2(C_{\nu+1}) = S_{\Sigma,\nu}^2 + \sigma^2(C_{\nu+1}),$$

найдем далее разность

$$\Delta_{\alpha,\nu+1} - \Delta_{\alpha,\nu} = K_{\alpha,\nu+1}\sqrt{S_{\Sigma,\nu}^2 + \sigma^2(C_{\nu+1})} - K_{\alpha,\nu}\sqrt{S_{\Sigma,\nu}^2}. \tag{6.58}$$

Пренебрегая различиями между $K_{\alpha,\nu+1}$ и $K_{\alpha,\nu}$, получим

$$\Delta_{\alpha,\nu+1} - \Delta_{\alpha,\nu} = K_{\alpha,\nu}\cdot S_{\Sigma,\nu}\left(\sqrt{1+\frac{\sigma^2(C_{\nu+1})}{S_{\Sigma,\nu}^2}} - 1\right) \cong K_{\alpha,\nu}\cdot S_{\Sigma,\nu}\cdot\frac{\sigma^2(C_{\nu+1})}{2S_{\Sigma,\nu}^2}.$$

Окончательно условие целесообразности введения $(\nu+1)$ поправки (критерий пренебрежимо малых поправок) принимает вид

$$|C_{\nu+1}| > K_{\alpha,\nu}\cdot\frac{\sigma^2(C_{\nu+1})}{2S_{\Sigma,\nu}}. \tag{6.59}$$

Анализ выражения (6.59) показывает, что при сравнительно больших S_Σ введение поправки может быть оправдано, если даже эта поправка существенно меньше ее погрешности. Пусть, например, $S_\Sigma = 1{,}0$ (в отвлеченных единицах), $\sigma(C_{v+1}) = 0{,}1; K = 2$. Тогда учет поправки $|C_{v+1}| > 0{,}01$ приведет к уточнению результата измерения. Следует иметь в виду, что характеристики точности округляются до одной-двух значащих цифр, а результат измерения округляется до того же десятичного знака, что и погрешность (см. разд. 3). Поэтому введение малых поправок, не изменяющих значащие цифры результата измерений, становится бессмысленным.

Задачи

1. Для измерения температуры используется неуравновешенный резисторный термометр со шкалой (-40...60) °С, класс точности прибора 1,0. Среднее значение, вычисленное по результатам многократных ($n = 4$) измерений составило 25,0 °С, $S_{\bar{T}} = 0{,}5$ °С.

   1) Найдите доверительные границы погрешности результата измерения.
   2) Оцените то минимальное число измерений, которое необходимо выполнить, чтобы доверительные границы погрешности были также наименьшими ($\alpha = 0{,}05$).

2. На участке электрической цепи измеряются сила тока i амперметром класса точности 1,0 со шкалой (0...100) мА и падение напряжения вольтметром класса точности 2,0, со шкалой (1...50) В. Выполнено 9 измерений, $\bar{i} = 50{,}0$ мА, $S(i) = 3{,}0$ мА, $\bar{U} = 20$ В, $S(U) = 3$ В.

Найдите среднее значение и доверительные границы погрешности результата измерения тепловой мощности, выделяющейся на этом участке цепи. Коэффициент корреляции $r_{iu} = 0{,}7$.

7. СРАВНЕНИЕ ЭМПИРИЧЕСКИХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ. МЕТОДЫ ПРОВЕРКИ ГИПОТЕЗ О ПРИНАДЛЕЖНОСТИ ВЫБОРОК ОДНОЙ ГЕНЕРАЛЬНОЙ СОВОКУПНОСТИ

При анализе экспериментальных данных часто возникает задача сравнения двух или более рядов измерений. Целью такого сравнения является установление значимых различий между распределениями случайных величин, представляемых этими рядами. Положим, что есть два ряда измерений физической величины одного и того же размера, полученные различными методами. Выборочные средние и дисперсии окажутся, по-видимому, различными. Требуется выяснить, являются ли эти различия случайными или появление их определяется действием каких-либо факторов.

Если, например, значимо отличаются дисперсии, то это может свидетельствовать о неравноточности методов измерения, различие средних говорит о наличии систематической погрешности, по крайней мере в одном из рядов измерений.

Объектами сравнения могут быть и другие характеристики распределений. Когда различия между сравниваемыми характеристиками велики, то есть, когда они больше доверительных границ погрешностей этих характеристик, проблем при принятии решений не возникает. Трудности появляются, если различия между сравниваемыми величинами соизмеримы или меньше погрешностей их определения. Задачи такого рода решаются методами теории проверки статистических гипотез. Различают два вида методов или критериев проверки гипотез: *параметрические* и *непараметрические*. К параметрическим относят такие методы, в которых объектами сравнения служат параметры распределения. При этом соответствие эмпирического распределения предполагаемому теоретическому является необходимым условием выбора более вероятной гипотезы. Непараметрические методы построены на сравнении некоторых обобщающих характеристик рядов измерений. Эти методы менее чувствительны к виду распределения.

7.1. Параметрические методы проверки гипотез

Чаще всего при анализе результатов экспериментов в качестве параметров сравнения используют выборочные средние и дисперсии. Рассмотрим здесь методы их сравнения в предположении нормального распределения случайных величин.

Пусть имеется k рядов измерений физической величины x. Для каждого ряда известны его длина n_j, выборочные средние $\bar{x}_j$ и дисперсии $S^2(x_j)$, $j=\overline{1,k}$. Необходимо оценить, являются ли однородными (равными) средние значения, то есть проверить гипотезу принадлежности всех выборок одной *генеральной совокупности*. Другая задача состоит в том, чтобы проверить однородность дисперсий и равноточность рядов измерений.

7.1.1. Сравнение дисперсий

Применение различных критериев определяется числом сравниваемых дисперсий, объемами выборок и наличием априорной информации.

1. *Проверка гипотезы об однородности выборочной дисперсии и известной дисперсии генеральной совокупности.*

В этом случае $k=1,\ n_j=n_1,\ S(x_j)=S(x_1)$. Такая ситуация может сложиться например, если при проведении измерений хорошо отработанным методом с известной характеристикой точности $\sigma(x)$ были внесены изменения в условия измерения. Полученное в новой серии значение $S(x_1)$, очевидно, будет отличаться от $\sigma(x)$. Значимо ли это различие? Сформулируем гипотезы

$$H_0:\sigma^2(x_1)=\sigma^2(x),\ H_1:\sigma^2(x_1)\neq\sigma^2(x), \tag{7.1}$$

где $\sigma(x_1)$ – предполагаемое значение СКО для выборки x_1.

Проверка этих гипотез базируется на общем принципе определения доверительных границ погрешности среднего квадратического отклонения (см. раздел 3.2). При уровне значимости α двухсторонние доверительные границы для СКО задаются выражением:

$$P\{\gamma_{\alpha/2,f_1}S(x_1)\le\sigma(x_1)\le\gamma_{1-\alpha/2,f_1}S(x_1)\}=1-\alpha, \tag{7.2}$$

где $\gamma_{\alpha/2,f_1}$ и $\gamma_{1-\alpha/2,f_1}$ зависят от квантильных значений распределения χ^2 и числа степеней свободы $f_1=n_1-1$.

$$\gamma_{\alpha/2,f_1}=\sqrt{f_1/(\chi^2_{1-\alpha/2,f_1})},\quad \gamma_{1-\alpha/2,f_1}=\sqrt{f_1/(\chi^2_{\alpha/2,f_1})} \tag{7.3}$$

Выражение (7.2) определяет диапазон значений, в котором с вероятностью $1-\alpha$ находится истинное значение СКО генеральной совокупности, если $\sigma(x)$ СКО составляет $S(x_1)$.

В соответствии с нулевой гипотезой $\sigma(x_1)=\sigma(x)$. Таким образом, выбор принимаемой гипотезы определяется следующим решающим правилом:

$$\begin{aligned}&\gamma_{\alpha/2,f_1}S(x_1)\le\sigma(x)\le\gamma_{1-\alpha/2,f_1}S(x_1)\Rightarrow H_0,\\ &\sigma(x)<\gamma_{\alpha/2,f_1}S(x_1)\quad\text{или}\quad\sigma(x)>\gamma_{1-\alpha/2,f_1}S(x_1)\Rightarrow H_1.\end{aligned} \tag{7.4}$$

Правило (7.4) сформулировано для альтернативной гипотезы $\sigma(x_1) \neq \sigma(x)$ без учета знака неравенства. Однако если значение $S(x_1)$ уже получено, H_1 может быть уточнено. При $S(x_1) > \sigma(x)$, можно проверить гипотезу $\sigma(x_1) > \sigma(x)$ (и, соответственно, наоборот). В этих случаях используют односторонние критерии, более жесткие по отношению к нулевой гипотезе.

Тогда при проверке альтернативной гипотезы $H_1 : \sigma(x) > \sigma(x_1)$ решающее правило (7.4) трансформируется в неравенства

$$\sigma(x) \le \gamma_{1-\alpha, f_1} S(x_1) \Rightarrow H_0, \quad \sigma(x) > \gamma_{1-\alpha, f_1} S(x_1) \Rightarrow H_1, \tag{7.5}$$

а при гипотезе $H_1 : \sigma(x) < \sigma(x_1)$ в

$$\sigma(x) > \gamma_{\alpha, f_1} S(x_1) \Rightarrow H_0, \quad \sigma(x) < \gamma_{\alpha, f_1} S(x_1) \Rightarrow H_1. \tag{7.6}$$

Квантильные значения χ^2 для вычисления $\gamma_{\alpha/2, f}$ и $\gamma_{1-\alpha/2, f}$ можно найти в *Приложении III* или рассчитать по формулам (7.18), (7.19).

При достаточно большом объеме выборок ($n > 15...20$) для расчета множителя γ можно воспользоваться формулой, полученной ранее в разделе 3.2

$$\gamma_{\substack{\alpha, f \\ 1-\alpha, f}} = 1 \mp \frac{z_{1-\alpha}}{\sqrt{2f}}. \tag{7.7}$$

Знак [–] справа соответствует верхней паре подстрочных индексов при γ, а [+] – нижней.

Пример

Точность измерения физической величины R, характеризуемая ее СКО, составляет $\sigma(R) = 10$. По результатам 19 контрольных измерений найдено выборочное СКО $S(R_1) = 13$.

Является ли полученное различие между $\sigma(R)$ и $S(R_1)$ свидетельством ухудшения качества измерений? Зададим уровень значимости $\alpha = 0{,}05$. Поскольку $S(R_1) > \sigma(R)$, перейдем к одностороннему критерию. Рассчитаем множитель $\gamma_{0,05;18}$ по формуле (7.7), подставляя в нее $z_{1-\alpha} = 1{,}64$.

Тогда $\gamma_{0,05,18} = (1 - 1{,}64/\sqrt{36}) = 0{,}73$. Произведение $\gamma_{0,05;18} \cdot S(R_1) = 9{,}5 < \sigma(R).$, следовательно измерения равноточны (значимого различия между $\sigma(R)$ и $S(R)$) не обнаружено).

2. *Сравнение двух выборочных дисперсий. Критерий Фишера*

Пусть имеются два ряда измерений одной и той же физической величины – две выборки объемами n_1 и n_2. По выборкам найдены дисперсии $S^2(x_1)$ и $S^2(x_2)$. Далее для

краткости будем обозначать их S_1^2 и S_2^2. Значения S_1^2 и S_2^2 отличаются друг от друга. Сформулируем гипотезы:

$$H_0 : \sigma_1^2 = \sigma_2^2 \text{ и } H_1 : \sigma_1^2 \neq \sigma_2^2.$$

Здесь σ_1^2 и σ_2^2 – дисперсии генеральных совокупностей, оценками которых являются S_1^2 и S_2^2.

Для проверки гипотез используют F-критерий Фишера (или Фишера-Снедекора). Отношение двух случайных величин – выборочных дисперсий – $F = \dfrac{S_1^2}{S_2^2}$ является в свою очередь случайной величиной. Плотность вероятности распределения этой случайной величины определяется выражением

$$f(F) = \begin{cases} \dfrac{\Gamma\left(\dfrac{f_1+f_2}{2}\right)}{\Gamma\left(\dfrac{f_1}{2}\right)\cdot\Gamma\left(\dfrac{f_2}{2}\right)} \cdot \left(\dfrac{f_1}{f_2}\right)^{f_1/2} \dfrac{F^{(f_1-2)/2}}{\left(1+\dfrac{f_1}{f_2}F\right)^{(f_1+f_2)/2}}, & F \geq 0, \\ 0, \quad F < 0. \end{cases} \tag{7.8}$$

Как легко увидеть, плотность вероятности $f(F)$ зависит от чисел степеней свободы выборочных дисперсий: $f_1 = n_1 - 1, f_2 = n_2 - 1$ Представление о характере F-распределения при различных сочетаниях f_1 и f_2 дает рис 7.1.

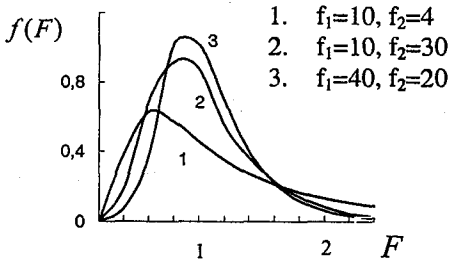


Рис. 7.1 Плотность вероятности F-распределения (распределения Фишера) при различных сочетаниях чисел степеней свободы f_1 и f_2.

Если известна плотность вероятности $f(F)$, то, очевидно, можно найти и функцию распределения $\widetilde{F}(F)$. которая по определению равна

$$\widetilde{F}(F) = \int_0^F f(F)dF. \tag{7.9}$$

В этом выражении встретились одинаковые традиционные обозначения отношения Фишера и функции распределения. Чтобы различать их, последняя в этом параграфе снабжена значком [~].

В общем случае интеграл (7.9) с подстановкой (7.8) решается численно. Если задать уровень значимости α, то, решая (7.9), можно найти критические значения $F_{\alpha/2,f_1,f_2}$ и $F_{1-\alpha/2,f_1,f_2}$ как корни уравнений

$$\alpha/2 = \int_0^{F_{\alpha/2,f_1,f_2}} f(F)dF \text{ и } 1-\alpha/2 = \int_0^{F_{1-\alpha/2,f_1,f_2}} f(F)dF . \qquad (7.10)$$

Тогда в соответствии с общим правилом определения области допустимых значений для нулевой гипотезы, можно записать

$$F_{\alpha/2,f_1,f_2} \le F \le F_{1-\alpha/2,f_1,f_2} . \qquad (7.11)$$

Невыполнение неравенства (7.11) служит основанием для отклонения нулевой гипотезы и, следовательно, принятия альтернативной. Практически поступают по-другому. Распределение Фишера обладает тем примечательным свойством, что медианное значение $F_{0,5} = 1$, а квантильные значения $F_{\alpha/2,f_1,f_2}$ и $F_{1-\alpha/2,f_1,f_2}$ связаны соотношением $\dfrac{1}{F_{\alpha/2,f_1,f_2}} = F_{1-\alpha/2,f_1,f_2}$. Это обстоятельство позволяет табулировать не весь диапазон изменения от 0 до ∞, а только половину его: от 0 до 1 или от 1 до ∞. Обычно используют последний интервал. При этом должно выполняться условие $F = S_1^2 / S_2^2 \ge 1$. Если $S_1^2 < S_2^2$, то их просто перенумеровывают, подставляя большую из дисперсий в числитель. Соответственно изменяют числа степеней свободы. Определенность эмпирического отношения $S_1^2 / S_2^2 \ge 1$ позволяет теперь переформулировать альтернативную гипотезу – $H_1 : \sigma_1^2 > \sigma_2^2$, то есть перейти к одностороннему критерию. Тогда решающее правило проверки гипотез принимает вид

$$F \le F_{1-\alpha,f_1,f_2} \Rightarrow H_0, \quad F > F_{1-\alpha,f_1,f_2} \Rightarrow H_1. \qquad (7.12)$$

Заметим снова, что поскольку при заданном α $F_{1-\alpha,f_1,f_2} < F_{1-\alpha/2,f_1,f_2}$, односторонний критерий будет чаще отвергать нулевую гипотезу.

Затабулированные значения $F_{1-\alpha,f_1,f_2}$ приведены в *Приложении IV*. Для наиболее часто используемого уровня значимости $\alpha = 0{,}05$ при $f_1, f_2 \ge 3$ табличные значения с

приемлемой для практических целей точностью можно аппроксимировать простой формулой

$$F_{1-0,05;f_1,f_2} = \frac{f_1 + 20,5}{f_1 + 6,0} + \frac{9,3}{f_2 - 1,7}. \qquad (7.13)$$

Пример По результатам обработки двух рядов измерений с $n_1 = 10$ и $n_2 = 21$ получены значения выборочных средних квадратических отклонений $S_1 = 0,08$ и $S_2 = 0,16$. Проверим при уровне значимости $\alpha = 0,05$, являются ли выборочные дисперсии однородными.

По результатам обработки двух рядов измерений с $n_1 = 10$ и $n_2 = 21$ получены значения выборочных средних квадратических отклонений $S_1 = 0,08$ и $S_2 = 0,16$. Проверим при уровне значимости $\alpha = 0,05$, являются ли выборочные дисперсии однородными.

Вычислим дисперсии: $S_1^2 = 0,0064$, $S_2^2 = 0,0256$. Поскольку $S_1^2 < S_2^2$, перенумеруем их так, что $S_1^2 = 0,0256$, $f_1 = n_1 - 1 = 20$ и $S_2^2 = 0,0064$, $f_2 = n_2 - 1 = 9$. Отношение $F = \frac{S_1^2}{S_2^2} = \frac{0,0256}{0,0064} = 4,0$. Критическое значение, вычисленное по формуле (7.13), $F_{1-0,05;20;9} = 2,8$ (табличное значение $F_{1-0,05;20;9} = 2,93$). Поскольку явно $F > F_{1-\alpha,f_1,f_2}$, нулевую гипотезу следует отвергнуть: различие между дисперсиями значимо, они неоднородны.

3. *Сравнение нескольких дисперсий ($k > 2$). Критерии Бартлетта и Кочрена*

Будем проверять гипотезы

$$H_0 : \sigma_1^2 = \sigma_2^2 = ... = \sigma_k^2 \text{ и } H_1 : \sigma_1^2 \neq \sigma_2^2 \neq ... \neq \sigma_k^2. \qquad (7.14)$$

В простейшем случае, когда числа степеней свободы всех дисперсий одинаковы $f_1 = f_2 = ... = f_k$, можно воспользоваться критерием Фишера, взяв отношение максимальной из всех дисперсий к минимальной ($S_1^2 = \max\left\{S_j^2, j = \overline{1,k}\right\}$ $S_2^2 = \min\left\{S_j^2, j = \overline{1,k}\right\}$) и сравнить его с критическим (табличным) значением. Если выполняется условие $F \leq F_{1-\alpha,f_1,f_2}$, то нулевая гипотеза будет справедлива и для любой другой пары дисперсий, следовательно, дисперсии однородны. Однако при условии $F > F_{1-\alpha,f_1,f_2}$ говорить об отклонении нулевой гипотезы еще нельзя, так как при большом числе выборочных дисперсий возможные различия между ними возрастают. Еще более неопределенными будут результаты, если дисперсии обладают разными степенями свободы. Решение задачи требует одновременного учета всей информации. С этой целью используют другие критерии.

Критерий Бартлетта. Критерий предназначен для сравнения более двух дисперсий с разными степенями свободы ($f_1 \neq f_2 \neq ... \neq f_k$). Рассчитаем следующие комбинации:

$$B = f \ln {S_0}^2 - \sum_{j=1}^{k} f_j \ln S_j^2, \quad C = 1 + \frac{1}{3(k-1)} \left(\sum_{j=1}^{k} \frac{1}{f_j} - \frac{1}{f} \right), \tag{7.15}$$

где $S_0^2 = \frac{1}{f} \sum_{j=1}^{k} f_j S_j^2$ – средневзвешенная дисперсия, $f = \sum_{j=1}^{k} f_j$ – сумма степеней свободы.

Показано, что случайная величина B/C имеет распределение, примерно соответствующее χ^2-распределению.

$$f(B/C) \cong f(\chi^2) \tag{7.16}$$

Легко убедиться, что отношение B/C тем ближе к нулю, чем меньше различия между дисперсиями. Если все S_j^2 равны между собой, то $B/C = 0$ при любых сочетаниях f_j. Это означает, что для проверки гипотез достаточно определить одностороннюю (правостороннюю) критическую область, задавая критическое значение $\chi^2_{1-\alpha, f_B}$, $f_B = k - 1$ – число степеней свободы критерия Бартлетта. Тогда для проверки гипотез (7.14) решающее правило имеет вид

$$B/C \le \chi^2_{1-\alpha, f_B} \Rightarrow H_0, \quad B/C > \chi^2_{1-\alpha, f_B} \Rightarrow H_1. \tag{7.17}$$

Затабулированные значения $\chi^2_{1-\alpha, f}$ приведены в *Приложении III*. С достаточной для практических целей точностью табличные значения аппроксимируются простыми формулами.

$$\chi^2_{1-0,05; f} = 3,8 + 2,2(f-1)^{0,86} \text{ для } \alpha = 0,05 \tag{7.18а}$$

$$\chi^2_{1-0,10; f} = 2,7 + 1,9(f-1)^{0,89} \text{ для } \alpha = 0,10 \tag{7.18б}$$

Эти формулы справедливы для $f \le 30$. При $f > 30$ рекомендуется формула

$$\chi^2_{1-\alpha, f} = \frac{1}{2} \left(\sqrt{2f - 1} + z_{1-\alpha} \right)^2. \tag{7.19}$$

Недостатки критерия Бартлетта связаны с приближенностью выражения (7.10). Поэтому при $f_j = const = f$ применяют более строгий критерий Кочрена.

Критерий Кочрена. В качестве случайной величины рассматривается отношение

$$G = S^2_{\text{макс}} / \sum_{j=1}^{k} S_j^2, \tag{7.20}$$

где $S^2_{\text{макс}}$ – максимальная из дисперсий ($S^2_{\text{макс}} = \max\{S_j^2, j = \overline{1,k}\}$). В специальной литературе можно найти выражение для плотности вероятности G-распределения. Рассчитаны и затабулированы квантильные значения $G_{1-\alpha,k,f}$, зависящие от числа сравниваемых дисперсий k и их степеней свободы f (см. *Приложение VI*).

Очевидно, что минимальное значение G при $f \to \infty$ составляет $1/k$. Решающее правило проверки гипотез имеет простой вид

$$G \le G_{1-\alpha,k,f} \Rightarrow H_0, \quad G > G_{1-\alpha,k,f} \Rightarrow H_1. \tag{7.21}$$

Пример

При многократных измерениях сопротивлений резисторов разного размера получены значения дисперсий, представленные в таблице. Проверим на уровне значимости $\alpha = 0{,}05$ гипотезу о независимости точности измерения сопротивлений от их значения.

Исходные данные				Промежуточные расчеты		
j	n_j	S_j^2	f_j	$f_1 \cdot S_j^2$	$f_j \cdot \ln S_j^2$	$1/f_j$
1	9	0,17	8	1,36	-14,18	0,1250
2	13	0,40	12	4,80	-10,99	0,0839
3	17	0,38	16	6,08	-15,48	0,0625
4	17	0,62	16	9,92	-7,65	0,0625
5	11	0,54	10	5,40	-6,16	0,1000
Суммы		2,11	62	27,56	-54,46	0,4333

а) Сравнение по критерию Бартлетта. Используя результаты, представленные в таблице, найдем

$$S_0^2 = \frac{27{,}56}{62} = 0{,}444; \quad \ln S_0^2 = -0{,}812; \quad f \cdot \ln S_0^2 = -50{,}34; \quad B = -50{,}34 - (-54{,}46) = 4{,}12;$$

$$C = 1 + \frac{0{,}4333 - 0{,}0161}{3(5-1)} = 1{,}035; \quad B/C = \frac{4{,}12}{1{,}035} = 3{,}98.$$

Рассчитанное по формуле (7.18) критическое значение $\chi^2_{1-0{,}05;4} = 9{,}5$. Поскольку $B/C < \chi^2_{1-\alpha,f} \Rightarrow H_0$, то есть дисперсии однородны, значимой зависимости дисперсий от значения сопротивления нет (заметим, что знание конкретных значений сопротивлений резистров для ответа на поставленный вопрос не потребовалось).

б) Проверим ту же гипотезу по критерию Фишера, ограничившись отношением максимальной дисперсии $S_1^2 = 0{,}62$ к минимальной $S_2^2 = 0{,}17$ (в таблице это S_4^2 и S_1^2, но в соответствии с формальной процедурой мы перенумеровали их). Числа степеней свободы $f_1 = 16, f_2 = 8$, отношение $F = S_1^2 / S_2^2 = 3{,}63$. Табличное значение $F_{1-0{,}05;16;8} = 3{,}2$, $F > F_{1-\alpha;f_1;f_2} \Rightarrow H_1$. Крайние значения дисперсий отличаются значимо, но использование всей информации по критерию Бартлетта привело к противоположному выводу.

в) Чтобы проиллюстрировать применение критерия Кочрена, воспользуемся тем же набором дисперсий, что и выше, но представим себе, что все они получены при одинаковых степенях свободы $f_j = f = 16$. Выборочное значение $G = S^2_{\text{макс}} / (\sum_{j=1}^{5} S_j^2) = \frac{0{,}62}{2{,}11} = 0{,}294$. Табличное (критическое) значение $G_{1-0{,}05;4;16} = 0{,}437$, $G < G_{1-\alpha,k,f}$ – дисперсии однородны. Поскольку мы приняли максимальное из чисел степеней свободы, то при меньших f критические значения будут, естественно, больше, и выбор нулевой гипотезы тем более окажется оправданным.

Таким образом, оба критерия – Бартлетта и Кочрена – подтверждают нулевую гипотезу.

7.1.2. Сравнение средних

Другим параметром сравнения нормально распределенных случайных величин являются их средние значения. Пусть, по-прежнему, имеется k рядов измерений. Рассчитаем $\bar{x}_j$, $j = \overline{1,k}$. Далее для сравнения потребуются дисперсии $S^2(x_j)$ и объемы выборок n_j. Выпишем гипотезы

$$H_0 : x_{01} = x_{02} = \ldots x_{0k}, \quad H_1 : x_{01} \neq x_{02} \neq \ldots x_{0k}, \tag{7.22}$$

где x_{0j} – истинное значение j-ой случайной величины.

Снова рассмотрим несколько ситуаций, отличающихся объемом и видом информации.

1. *Сравнение двух средних ($k = 2$). Критерий Стьюдента*

а) Возьмем простой случай, когда оба ряда измерены с одинаковой, известной заранее, точностью $\sigma(x_1) = \sigma(x_2) = \sigma(x)$. Введем случайную величину $\bar{y} = \bar{x}_1 - \bar{x}_2$. Доверительные границы для истинного значения y_0, как показано ранее, определяются выражением

$$P\{\bar{y} - \varepsilon_{\bar{y}} \le y_0 \le \bar{y} + \varepsilon_{\bar{y}}\} = 1 - \alpha. \tag{7.23}$$

Двойное неравенство в левой части (7.23) отражает условия выполнения H_0. Имея в виду, что в соответствии с нулевой гипотезой $y_0 = x_{01} - x_{02} = 0$, можно сразу сформулировать решающее правило проверки гипотез (7.22)

$$|\bar{x}_1 - \bar{x}_2| \le \varepsilon_{\bar{y}} \Rightarrow H_0, \quad |\bar{x}_1 - \bar{x}_2| > \varepsilon_{\bar{y}} \Rightarrow H_1. \tag{7.24}$$

Правило (7.24) имеет простую и логичную интерпретацию: если разность между средними меньше доверительных границ погрешности определения этой разности, то она незначима, а следовательно, средние однородны и – наоборот.

Остается найти $\varepsilon_{\bar{y}}$. Эта задача рассматривалась ранее в разделах 4, 6. Поэтому здесь просто выпишем необходимые соотношения

$$\varepsilon_{\bar{y}} = z_{1-\alpha/2} \cdot \sigma_{\bar{y}}, \tag{7.25}$$

В общем случае для коррелированных x_1 и x_2

$$\sigma_{\bar{y}} = \sigma(x)\sqrt{\frac{1}{n_1} - \frac{2\rho_{x_1x_2}}{\sqrt{n_1 n_2}} + \frac{1}{n_2}}. \tag{7.26}$$

Напомним, что $z_{1-\alpha/2}$ – квантиль стандартного нормального распределения, отвечающий двухсторонней критической области, а $\rho_{x_1x_2}$ – генеральный коэффициент корреляции. При отсутствии корреляции между рядами

$$\sigma_{\bar{y}} = \sigma(x)\sqrt{\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}}. \tag{7.27}$$

Если на основании априорной информации или по результатам эксперимента проверяется альтернативная гипотеза $H_1 : x_{01} > x_{02}$ (или $H_1 : x_{01} < x_{02}$), то следует перейти к одностороннему критерию. При сохранении уровня значимости решающее правило принимает вид:

$$|\bar{x}_1 - \bar{x}_2| \le z_{1-\alpha} \cdot \sigma_{\bar{y}} \Rightarrow H_0, \quad |\bar{x}_1 - \bar{x}_2| > z_{1-\alpha} \cdot \sigma_{\bar{y}} \Rightarrow H_1. \tag{7.28}$$

б) Обратимся теперь к более сложной, но чаще встречающейся ситуации, когда генеральная дисперсия неизвестна, а выборки ограничены. В этом случае кроме средних значений необходимо знать выборочные дисперсии $S^2(x_1) \equiv S_1^2$ и $S^2(x_2) \equiv S_2^2$.

Процедуру сравнения средних начинают с проверки гипотезы об однородности дисперсий S_1^2 и S_2^2. Такую проверку проводят по критерию Фишера, рассмотренному в предыдущем параграфе. В зависимости от выбора гипотезы задачу решают одним из двух следующих способов.

Дисперсии однородны. Рассчитывают средневзвешенную дисперсию

$$S_0^2 = \frac{S_1^2(n_1 - 1) + S_2^2(n_2 - 1)}{n_1 + n_2 - 2}. \tag{7.29}$$

Здесь S_0^2 характеризует рассеяние, осредненное по обоим рядам измерений. Дисперсию разности определяют как

$$S_{\bar{y}}^2 = S_0^2\left(\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}\right). \tag{7.30}$$

Рассматривается случайная величина

$$t = \frac{\bar{x}_1 - \bar{x}_2}{S_{\bar{y}}} = (\bar{x}_1 - \bar{x}_2)\sqrt{\frac{(n_1+n_2-2)}{S_1^2(n_1-1)+S_2^2(n_2-1)}\cdot\frac{n_1 n_2}{n_1+n_2}}. \tag{7.31}$$

Утверждается, что величина t имеет распределение, соответствующее распределению Стьюдента. Отсюда и название – критерий Стьюдента. В силу симметричности t-распределения относительно центра $(t=0)$ от знакопеременной величины t переходят к ее модулю $|t| = |\bar{x}_1 - \bar{x}_2| / S_{\bar{y}}$. Квантильное значение $t_{1-\alpha/2,f}$ (при двухсторонней критической области) является критическим в соответствии с решающим правилом

$$|t| \le t_{1-\alpha/2,f} \Rightarrow H_0,\ |t| > t_{1-\alpha/2,f} \Rightarrow H_1. \tag{7.32}$$

При переходе к одностороннему критерию достаточно заменить $t_{1-\alpha/2,f}$ на $t_{1-\alpha,f}$. Число степеней свободы отражает знаменатель в формуле дисперсии (7.29) $f = n_1 + n_2 - 2$.

Часто удобнее сравнивать разность $|\bar{x}_1 - \bar{x}_2|$ непосредственно с ее доверительной погрешностью

$$\varepsilon_{\bar{y}} = t_{1-\alpha/2,f}\cdot S_{\bar{y}}, \tag{7.33}$$

либо, с учетом (7.29) и (7.30),

$$\varepsilon_{\bar{y}} = t_{1-\alpha/2,f}\sqrt{\frac{S_1^2(n_1-1)+S_2^2(n_2-1)}{n_1+n_2-2}\cdot\frac{n_1+n_2}{n_1 n_2}}. \tag{7.34}$$

Для сравнения средних используется решающее правило (7.24), либо – при одностороннем критерии – правило (7.28).

Дисперсии неоднородны.

В этом случае рассчитывается искусственно сконструированный параметр T, являющийся некоторым аналогом $\varepsilon_{\bar{y}}$

$$T = \frac{t_{1-\alpha/2,f_1}S_1^2/n_1 + t_{1-\alpha/2,f_2}S_2^2/n_2}{\sqrt{S_1^2/n_1 + S_2^2/n_2}}, \tag{7.35}$$

где $f_1 = n_1 - 1$ и $f_2 = n_2 - 1$ – числа степеней свободы выборочных дисперсий. Для одностороннего критерия вместо $t_{1-\alpha/2,f}$ подставляют $t_{1-\alpha,f}$. Проверка гипотез проводится в соответствии с очевидным решающим правилом

$$|\bar{x}_1 - \bar{x}_2| \le T \Rightarrow H_0, \ |\bar{x}_1 - \bar{x}_2| > T \Rightarrow H_1. \qquad (7.36)$$

Напомним, что значения $t_{1-\alpha,f}$ затабулированы (см. *ПриложениеII*). Для уровней значимости 0,05 и 0,10 хорошей аппроксимацией табличных данных являются выражения

$$t_{1-0,05/2;f} = 1{,}96 + \frac{2{,}40}{f-1} \text{ и } t_{1-0,10/2;f} = 1{,}64 + \frac{1{,}30}{f-1}. \qquad (7.37)$$

Критерии t и T широко применяются при анализе экспериментальных данных. Однако популярность не является гарантией безупречности. Прежде всего отметим, что критерии взаимно не согласованы. Легко убедиться, что при одних и тех же значениях n_1 и n_2 и S_1^2 и S_2^2 доверительные границы $\varepsilon_{\bar{y}}$ и параметр T, рассчитанные соответственно по формулам (7.34) и (7.35), оказываются различными. Это означает, что при близком к критическому отношении Фишера ($F \approx F_{1-\alpha_1,f_1,f_2}$) одна и та же разность $|\bar{x}_1 - \bar{x}_2|$ может быть отнесена по одному критерию к нулевой гипотезе, а по другому – к альтернативной.

Так например, если $n_1 = 25$, а $n_2 = 4$ и отношение $F = S_1^2 / S_2^2 = 8{,}6 = F_{1-0,05;24;3}$, то $\varepsilon_{\bar{y}} = 3S_2$, а $T = 2S_2$. Следовательно, при значениях разности средних в интервале $2S_2 < |\bar{x}_1 - \bar{x}_2| < 3S_2$ выбор гипотезы может осуществляться «по желанию заказчика».

Другую иллюстрацию несогласованности t- и T-критериев можно получить, если приравнять правые части формул (7.34) и (7.35), то есть попытаться найти условия равенства $\varepsilon_{\bar{y}}$ и T. Получающееся выражение оказывается громоздким. Но подставим в него $n_1 = n_2$. Тогда условие равенства $\varepsilon_{\bar{y}} = T$ сводится к формально невозможному требованию равенства $t_{1-\alpha/2,f}$ и $t_{1-\alpha/2,f_1}$, где $f = f_1 + f_2 = 2f_1$. Конечно при больших n_1 $t_{1-\alpha/2,f} \approx t_{1-\alpha/2,f_1}$, но при ограниченных выборках различия становятся большими, а выбор гипотезы неопределенным. Фактически здесь мы снова возвращаемся к проблеме числа степеней свободы для дисперсии разности. В разделе 6 было показано, что число степеней свободы для дисперсии разности не должно превышать большее из числа степеней свободы уменьшаемого или вычитаемого. Для S_0^2 условие $f = f_1 + f_2$ безусловно спра-

ведливо. Поэтому возникает сомнение относительно правомочности использования S_0^2 для оценки погрешности разности средних.

Назовем еще одно важное обстоятельство, никак не учитываемое в t- и T-критериях. Это корреляция между рядами измерений. Небольшое, но устойчивое различие средних можно выявить, если рассчитывать доверительные границы погрешности с учетом корреляции.

в) Представляется, что все перечисленные неопределенности и недостатки критериев t и T могут быть исключены, если перейти к универсальному критерию. Назовем его UT. Определим его как доверительную границу результата косвенного измерения разности $\bar{y} = \bar{x}_1 - \bar{x}_2$. Тогда, в соответствии с предположенным в разделе 6 подходом,

$$UT = \sqrt{\varepsilon_{\bar{x}_1}^2 - 2r_{x_1x_2}\varepsilon_{\bar{x}_1}\varepsilon_{\bar{x}_2} + \varepsilon_{\bar{x}_2}^2}\,, \tag{7.38}$$

где, напомним, $\varepsilon_{\bar{x}_1}$ и $\varepsilon_{\bar{x}_2}$ – доверительные границы погрешностей измерения x_1 и x_2, а $r_{x_1x_2}$ – выборочный коэффициент корреляции.

Решающее правило

$$|\bar{x}_1 - \bar{x}_2| \le UT \Rightarrow H_0,\ |\bar{x}_1 - \bar{x}_2| > UT \Rightarrow H_1. \tag{7.39}$$

Если сравниваемые ряды представляют собой результаты совместных измерений и элементы рядов попарно синхронизированы, то удобно перейти к $y_i = x_{1i} - x_{2i}$, как отдельному результату косвенного измерения. При этом достаточно рассчитать $\varepsilon_{\bar{y}}^*$ методом приведения

$$\varepsilon_{\bar{y}}^* = t_{1-\alpha/2,f} S_{\bar{y}}^* = t_{1-\alpha/2,f}\sqrt{\frac{1}{n(n-1)}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2},\ i = \overline{1,n}\,. \tag{7.40}$$

В этом случае проверяется гипотеза $H_0 : y_0 = 0$ против $H_1 : y_0 \neq 0$. Решающее правило

$$|\bar{y}| \le \varepsilon_{\bar{y}}^* \Rightarrow H_0,\ |\bar{y}| > \varepsilon_{\bar{y}}^* \Rightarrow H_1. \tag{7.41}$$

2. *Сравнение более двух средних*

Прежде всего следует проверить гипотезу об однородности дисперсий (по критериям Бартлетта или Кочрена). В зависимости от результата выбирается метод сравнения средних. В этом параграфе рассматриваются методы сравнения рядов с однородными дисперсиями.

а) *Сравнение экстремальных значений.* Начнем с самого простого варианта: дисперсии однородны, равны или различаются несущественно. Сравним между собой максимальное $\bar{x}_{\text{макс}} = \max\{\bar{x}_j,\ j=\overline{1,k}\}$ и минимальное $\bar{x}_{\text{мин}} = \{\bar{x}_j, j=\overline{1,n}\}$ значения, используя критерий UT (либо традиционный критерий t). Если подтверждается нулевая гипотеза о равенстве экстремальных значений, то она справедлива и для всех других средних.

Однако отклонение нулевой гипотезы о равенстве этих значений не говорит о неоднородности средних. Для получения более надежных выводов следует использовать всю имеющуюся информацию.

б) *Метод однофакторного дисперсионного анализа.* Дисперсионный анализ является эффективным средством выявления факторов, действующих на исследуемую величину. Ему посвящен ниже специальный раздел. Ограничимся здесь лишь простейшим вариантом однофакторного дисперсионного анализа. При этом в качестве формального фактора Ф принимается наличие разных рядов измерений. Если средние по выборкам различаются, то эти различия могут быть связаны как со случайностью, так и с их закономерным изменением. Влияние последнего характеризуется дисперсией σ_Φ^2. Здесь используется обозначение σ_Φ^2, а не S_Φ^2, чтобы подчеркнуть неслучайность влияния фактора. Если $\sigma_\Phi^2 = 0$, влияние фактора незначимо, генеральные средние равны между собой. Таким образом,

$$H_0 : \sigma_\Phi^2 = 0,\ \ H_1 : \sigma_\Phi^2 > 0. \tag{7.42}$$

Для реализации метода необходимо рассчитать средневзвешенную дисперсию по всем выборкам (ее называют *дисперсией воспроизводимости)*

$$S_0^2 = \frac{1}{f}\sum_{j=1}^{k} f_j S_j^2, \tag{7.43}$$

где $f_j = n_j - 1$, а $f = \sum_{j=1}^{k} f_j = f_{S_0^2}$ – число степеней свободы дисперсии воспроизводимости; общее среднее по всем рядам измерений

$$\bar{\bar{x}} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{k}\sum_{i=1}^{n_j} x_{ij} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{k} n_j \bar{x}_j, \tag{7.44}$$

где x_{ij} – i-ый элемент в j-ом ряду, $i=\overline{1,n_j}$, $n = \sum_{j=1}^{k} n_j$; межгрупповую дисперсию (дисперсию средних по выборкам относительно общего среднего)

$$S_{\text{м}}^2 = \frac{1}{k-1}\sum_{j=1}^{k} n_j(\bar{x}_j - \bar{\bar{x}})^2 , \qquad (7.45)$$

где $k-1 = f_{S_{\text{м}}^2}$ число степеней свободы $S_{\text{м}}^2$. Межгрупповая дисперсия включает в себя рассеяние, связанное со случайностью выборок и влиянием фактора. Тогда, по правилам суммирования дисперсий

$$S_{\text{м}}^2 = S_0^2 + \sigma_{\Phi}^2 . \qquad (7.46)$$

В соответствии с нулевой гипотезой $\sigma_{\Phi}^2 = 0$. Остается проверить однородность дисперсий $S_{\text{м}}^2$ и S_0^2. С этой целью используем критерий Фишера. Отношение $F = S_{\text{м}}^2 / S_0^2$ следует сравнить с критическим значением $F_{1-\alpha, f_{S_{\text{м}}^2}, f_{S_0^2}}$ и выбрать гипотезу, руководствуясь решающим правилом

$$S_{\text{м}}^2 / S_0^2 \le F_{1-\alpha, f_{S_{\text{м}}^2}, f_{S_0^2}} \Rightarrow H_0, \quad S_{\text{м}}^2 / S_0^2 > F_{1-\alpha, f_{S_{\text{м}}^2}, f_{S_0^2}} \Rightarrow H_1. \qquad (7.47)$$

Внимание! *Поскольку априори предполагается, что* $S_{\text{м}}^2 \ge S_0^2$, *то места* $S_{\text{м}}^2$ *в числителе, а* S_0^2 *в знаменателе жестко закреплены и перенумерации не подлежат. Если в силу случайности окажется, что* $S_{\text{м}}^2 < S_0^2$, *то это обстоятельство однозначно свидетельствует в пользу нулевой гипотезы.*

Пример

Контроль стабильности физической величины Q осуществляют регулярно каждую неделю. В четырех серях измерений получены следующие результаты: $n_1 = 5$, $\overline{Q}_1 = 27$, $S_1^2 = 10$, $n_2 = 10$, $\overline{Q}_2 = 29$, $S_2^2 = 10$, $n_3 = 5$, $\overline{Q}_3 = 33$, $S_3^2 = 20$, $n_4 = 10$, $\overline{Q}_4 = 31$, $S_4^2 = 20$.

Наблюдается некоторое увеличение среднего значения и дисперсии со временем. Являются ли эти изменения проявлением случайности или они отражают влияние неконтролируемого фактора? Уровень значимости 0,05.

Решение:

1. Проверим гипотезу об однородности дисперсий по критерию Бартлетта. Приведем результаты вычислений: $S_0^2 = 15$, $f = 26$, $B = 1{,}6$, $C = 1{,}08$, $B/C = 1{,}5$. Число степеней свободы $f_B = 3$, $\chi^2_{1-0{,}05;3} = 7{,}8$, $B/C < \chi^2_{1-0{,}05;3}$ – дисперсии однородны.
2. Проверим однородность средних методом однофакторного дисперсионного анализа. S_0^2 уже известно. Найдем $\overline{\overline{Q}} = 30$. Межгрупповая дисперсия $S_{\text{м}}^2 = 37$, отношение Фишера $F = 37/15 = 2{,}5$; $F_{1-0{,}05;3;26} = 3{,}0$, $F < F_{1-0{,};3;26}$ – средние однородны, нет оснований считать значимыми изменения средних и дисперсий со временем.

в) *Ранговый критерий Дункана.* Критерий предназначен для оценки значимости различий между парами средних $\bar{x}_j$ и $\bar{x}_u$, $j,u=\overline{1,k}$, $j \neq u$. В отличие от критериев t и UT при сравнении используются не только данные, относящиеся к сравниваемой паре, но и информация об остальных средних.

Для реализации метода снова находят дисперсию воспроизводимости S_0^2 (по формуле (7.43)) с числом степеней свободы $f_{S_0^2} = f = \sum_{j=1}^{k} f_j$. Параметр $S_0 = \sqrt{S_0^2}$ рассматривается как осредненная характеристика точности измерений (СКО результата отдельного измерения). СКО результатов измерения (то есть любого $\bar{x}_j$) находят как $S_{\bar{x}_j} = S_0 / \sqrt{n_j}$. Оценка значимости каждой разности $(\bar{x}_j - \bar{x}_u)$ осуществляется путем сравнения их с критическими значениями $\varepsilon_{p,j}$, вычисляемыми по формуле

$$\varepsilon_{p,j} = r_{1-\alpha,f,p} \cdot S_{\bar{x}_j}, \tag{7.48}$$

где $r_{1-\alpha,f,p}$ – так называемые наименьшие значимые ранги Дункана, определяемые уровнем значимости α, числом степеней свободы дисперсии воспроизводимости f и технологическим числом p, $p=\overline{2,k}$. Чтобы организовать процедуру сравнения, построим возрастающий вариационный ряд из $\bar{x}_j$, соответственно изменяя их нумерацию

$$\bar{x}_1, \bar{x}_2, ..., \bar{x}_j ... \bar{x}_k, \text{ где } \bar{x}_{j+1} \geq \bar{x}_j.$$

Далее исходную информацию и схему вычислений представим в виде табл. 7.1.

Таблица 7.1

Сравнение средних по критерию Дункана

1	j	1	2	3	...	$k-1$	k
2	$\bar{x}_j$	$\bar{x}_1$	$\bar{x}_2$	$\bar{x}_3$		$\bar{x}_{k-1}$	$\bar{x}_k$
3	S_i^2	S_1^2	S_2^2	S_3^2		S_{k-1}^2	S_k^2
4	n_j	n_1	n_2	n_3		n_{k-1}	n_k
5	$S_{\bar{x}_i} = S_0 / \sqrt{n_i}$	$S_{\bar{x}_1}$	$S_{\bar{x}_2}$	$S_{\bar{x}_3}$		$S_{\bar{x}_{k-1}}$	$S_{\bar{x}_k}$
6	p	–	2	3		$k-1$	k
7	$r_{1-\alpha;f;p}$	–	$r_{f,2}$	$r_{f,3}$		$r_{f,k-1}$	$r_{f,k}$
8	$\varepsilon_{p,k}$	–	$\varepsilon_{2,k}$	$\varepsilon_{3,k}$		$\varepsilon_{k-1,k}$	$\varepsilon_{k,k}$
9	$\varepsilon_{p,k-1}$	–	$\varepsilon_{2,k-1}$	$\varepsilon_{3,k-1}$		$\varepsilon_{k-1,k-1}$	
...	$\varepsilon_{p,k-j}$	–	$\varepsilon_{2,k-j}$	$\varepsilon_{3,k-j}$			
$N-1$	$\varepsilon_{p,3}$	–	$\varepsilon_{2,3}$	$\varepsilon_{3,3}$			
N	$\varepsilon_{p,2}$	–	$\varepsilon_{2,2}$				

Строки 1–5, по-видимому, пояснений не требуют. В строке 6 выписаны числа p, которые формально совпадают с j, но имеют, как будет показано, другой смысл. В строке 7 выписаны из *Приложения VII* значения $r_{1-\alpha,f,p}$ – НЗР (наименьшие значимые ранги). Затем по формуле (7.48) рассчитываются $\varepsilon_{p,j}$ (строки 8–N). Если все n_j одинаковы, то одинаковыми оказываются и $S_{\bar{x}_j}$. В этом случае таблица заканчивается строкой 8, поскольку ею исчерпываются все произведения $r_{f,p} \cdot S_{\bar{x}_j}$ (индекс $(1-\alpha)$ при НЗР для сокращения записи опущен). При различных n_j таблица должна быть дополнена строками 9–N. При этом в каждом столбце сохраняются $r_{f,p}$,, но в каждой новой строке j уменьшается на единицу. Разность $(\bar{x}_j - \bar{x}_u)$ сравнивается с критическим значением $\varepsilon_{p,j}$, в котором индекс p определяется условием

$$p = j+1-u\,,\ j>u\,,\ j,u=\overline{1,k}\,. \tag{7.49}$$

Если, например, $j=k$, а $u=1$, то разность $\bar{x}_k - \bar{x}_1$ следует сравнить с $\varepsilon_{k,k}$ (строка 8); при $j=k$, $u=k-1$ для сравнения используется критическое значение в той же строке $\varepsilon_{2,k}$; при $j=3$, $u=2$ следует взять критическое значение $\varepsilon_{2,3}$ в $N-1$ строке $\varepsilon_{2,3}$ и т. д.

Решающее правило

$$\bar{x}_j - \bar{x}_u \le \varepsilon_{p,j} \Rightarrow H_0,\ \bar{x}_j - \bar{x}_u > \varepsilon_{p,j} \Rightarrow H_1. \tag{7.50}$$

Пример

Используем те же исходные данные, что и в предыдущем примере. Составим вариационный ряд в порядке возрастания средних и перенумеруем выборки. Выпишем в таблицу соответствующие значения S_j^2, n_j и наименьшие ранги $r_{f,p}$. Найдем $f=26$ и $S_0=3{,}9$ и рассчитаем $\varepsilon_{p,j}$. Выпишем сравнение разностей с критическими значениями.

Результаты расчетов				
j	1	2	3	4
$\bar{Q}_j$	27	29	31	33
S_j^2	10	10	20	20

Сравнение
$\bar{Q}_4 - \bar{Q}_1 = 6 > 5{,}5 \Rightarrow H_1$
$\bar{Q}_4 - \bar{Q}_2 = 4 < 5{,}3 \Rightarrow H_0$
$\bar{Q}_4 - \bar{Q}_3 = 2 < 5{,}0 \Rightarrow H_0$

n_j	5	10	10	5
$S_{\bar{x}_j}$	1,74	1,23	1,23	1,74
p	–	2	3	4
$r_{f,p}$	–	2,91	3,06	3,14
$\varepsilon_{p,4}$	–	5,0	5,3	5,5
$\varepsilon_{p,3}$	–	3,6	3,8	
$\varepsilon_{p,2}$	–	3,6		

$\overline{Q}_3 - \overline{Q}_1 = 4 > 3{,}8 \Rightarrow H_1$
$\overline{Q}_3 - \overline{Q}_2 = 2 < 3{,}6 \Rightarrow H_0$
$\overline{Q}_2 - \overline{Q}_1 = 2 < 3{,}6 \Rightarrow H_0$

Таким образом, сравнение средних по критерию Дункана говорит о значимом, хотя и небольшом, превышении разностями $\overline{Q}_4 - \overline{Q}_1$ и $\overline{Q}_3 - \overline{Q}_1$ их критических значений. Несмотря на то, что все остальные разности незначимы, предположение о росте среднего значения со временем находит подтверждение. Здесь мы встретились с типичной при статистических оценках ситуацией: применение различных критериев (методов) приводит к принятию противоположных гипотез. Чаще всего это происходит при малых объемах выборок. Радикальный путь преодоления противоречий заключается в продолжении экспериментов, увеличении длины сравниваемых рядов измерений. Если последнее оказывается невозможным, следует привлечь для анализа другие методы, в том числе, непараметрические.

7.2. Непараметрические методы сравнения эмпирических распределений

Применение параметрических методов обусловлено предположением об известном, обычно нормальном, законе распределения. Когда рассматриваются метеорологические величины, предположение о нормальности, как уже отмечалось, часто не выполняется. Непараметрические методы свободны от этого ограничения. Сравнение эмпирических распределений осуществляется на основе некоторых обобщающих характеристик, рассчитываемых по всем элементам сравниваемых выборок. Если $F_j(x)$ есть предполагаемая, но необязательно известная функция распределения случайной величины, то гипотезы можно сформулировать следующим образом

$$H_0 : F_j(x) = F_u(x); \;\; H_1 : F_j(x) \neq F_u(x). \qquad (7.51)$$

Альтернативная гипотеза может быть задана более определенно неравенствами $F_j(x) > F_u(x)$ или $F_j(x) < F_u(x)$. Здесь $j,u = \overline{1,k}$, $-\infty < x < \infty$ (или $0 < x < \infty$). Неравенство, например при $k = 2$, $F_1(x) > F_2(x)$, по определению функции распределения отвечает соотношению $P\{x_{01} < x\} > P\{x_{02} < x\}$, что в свою очередь свидетельствует о выполнении неравенства $x_{01} < x_{02}$ или значимости неравенства $\bar{x}_1 - \bar{x}_2 < 0$. Условие $F_1(x) \neq F_2(x)$ при знакопеременном неравенстве $P\{x_{01} < x\} \gtrless P\{x_{02} < x\}$ свидетельствует о различии диспер-

сий. Таким образом, в конечном итоге речь снова идет о проверке гипотез равенства средних или однородности дисперсий.

7.2.1. Метод Вилкоксона

Метод Вилкоксона (или Вилкоксона – Манна-Уитни) предназначен для сравнения средних двух рядов измерений одной и той же случайной величины. В различных литературных источниках метод излагается в двух вариантах, отличающихся по технике вычислений, но по сути одинаковых. Их называют *метод инверсий* и *ранговый метод.*

Метод инверсий. Пусть имеются два ряда измерений: x_{1i}, $i=\overline{1,n}$ и x_{2l}, $l=\overline{1,m}$. Построим по каждой выборке возрастающие вариационные ряды, перенумеровав элементы выборок. Введем для наглядности обозначения $x_{1i}=a_i,$, $x_{2l}=b_l$. А теперь составим общий вариационный ряд из обеих выборок, сохраняя обозначения и нумерацию элементов. Допустим, получили следующий ряд

$$a_1a_2a_3a_4b_1a_5b_2b_3a_6a_7b_4a_8b_5b_6b_7a_9b_8a_{10}b_9b_{10}b_{11}. \qquad (7.52)$$

Назовем инверсией появление элемента одной выборки перед элементом другой в их общем вариационном ряду. В ряду (7.52) перед b_1 находятся a_1, a_2,a_3,a_4 – это инверсии. Следовательно, перед b_1 содержится четыре инверсии, перед b_2 – пять и т.д. Разумеется, можно подсчитать появление элементов b_l перед a_i.. Так, перед a_1 (а так же перед a_2,a_3,a_4) элементов ряда b нет – ноль инверсий. Перед a_5 только одно значение b_l – одна инверсия и т.д. Фактически, порядковый номер i-ого элемента a_i, стоящего перед b_l, означает число инверсий. Если встречаются одинаковые значения из одной и той же выборки, то порядок их расположения в общем ряду роли не играет. Но если несколько раз встречаются одинаковые значения a_i и b_l, то их положение следует чередовать. Далее подсчитывается общая сумма инверсий U: либо a_i перед b_l, обозначим ее $U_{a|b}$, либо b_l перед a_i – $U_{b|a}$. Для вариационного ряда (7.52) получим

$$U_{a|b}=4+5+5+7+8+8+8+9+10+10+10=84,$$
$$U_{b|a}=0+0+0+0+1+3+3+4+7+8=26.$$

Практически достаточно рассчитать только одну из сумм. Другую можно использовать для контроля: должно выполняться условие: $U_{a|b}+U_{b|a}=nm$.

Случайная величина U обладает тем примечательным свойством, что она имеет нормальное распределение. Для эмпирических распределений, соответствующих нулевой гипотезе, истинное значение U_0 (математическое ожидание)

$$U_0 = mn/2 \tag{7.53}$$

и дисперсия

$$\sigma^2(U) = \frac{mn}{12}(m+n+1). \tag{7.54}$$

Как обычно, доверительные границы для U_0 можно записать в виде

$$P\{U - z_{1-\alpha/2}\sigma(U) \le U_0 \le U + z_{1-\alpha/2}\sigma(U)\} = 1-\alpha. \tag{7.55}$$

Так как U_0 уже известно, выражение (7.55) можно сразу преобразовать в решающее правило принятия гипотез

$$\begin{aligned} &U_0 - z_{1-\alpha/2}\cdot\sigma(U) \le U_{\substack{a|b\\b|a}} \le U_0 + z_{1-\alpha/2}\sigma(U) \Rightarrow H_0, \\ &U_{\substack{a|b\\b|a}} < U_0 - z_{1-\alpha/2}\sigma(U) \quad \text{или} \quad U_{\substack{a|b\\b|a}} > U_0 + z_{1-\alpha/2}\sigma(U) \Rightarrow H_1. \end{aligned} \tag{7.56}$$

Если альтернативная гипотеза задается более жестким неравенством: $H_1 : F(a) > F(b)$ или $F(a) < F(b)$, в (7.56) следует заменить $z_{1-\alpha/2}$ на $z_{1-\alpha}$, а при выборе знака неравенства между a_0 и b_0 учитывать способ вычисления инверсий:

$$U_{a|b} > U_0 + z_{1-\alpha}\sigma(U) \Rightarrow H_1 : F(a) > F(b) \text{ или } a_0 < b_0,$$

$$U_{a|b} < U_0 - z_{1-\alpha}\sigma(U) \Rightarrow H_1 : F(a) < F(b) \text{ или } a_0 > b_0,$$

$$U_{b|a} > U_0 + z_{1-\alpha}\sigma(U) \Rightarrow H_1 : F(b) > F(a) \text{ или } b_0 < a_0,$$

$$U_{b|a} < U_0 - z_{1-\alpha}\sigma(U) \Rightarrow H_1 : F(b) < F(a) \text{ или } b_0 > a_0.$$

Практически, если заранее рассчитаны $\bar{a}$ и $\bar{b}$, то выбор альтернативной гипотезы упрощается: знак неравенства между a_0 и b_0 определяется знаком между $\bar{a}$ и $\bar{b}$. Для вариационного ряда (7.52) $U_0 = 55$, $\sigma(U) = 14{,}2$, $U_{a|b} = 84$. При $\alpha = 0{,}05$ $z_{1-0{,}05/2} = 1{,}96$.

Таким образом, $U_0 + z_{1-\alpha/2}\sigma(U) = 55 + 1{,}96 \cdot 14{,}2 \approx 83 < 84$. Следовательно, при использовании двухстороннего критерия формально нулевая гипотеза должна быть отвергнута, хотя различие между эмпирическим значением и верхним критическим пределом несущественно. Переход к одностороннему критерию при $z_{1-0{,}05} = 1{,}64$ определенно приводит к принятию альтернативной гипотезы: $U_0 + z_{1-\alpha}\sigma(U) = 55 + 1{,}64 \cdot 14{,}2 = 78{,}5 < 84$.

Это означает, что $\bar{a}$ значимо меньше $\bar{b}$ или, возвращаясь к исходным обозначениям, $\bar{x}_1 < \bar{x}_2$. Метод рекомендуется использовать при $n, m > 10$.

Примечание

Построение вариационного ряда делает процедуру вычисления инверсий весьма простой и наглядной. При работе на ПК собственно вариационный ряд можно и не строить. В общем случае с учетом возможного появления одинаковых значений a_i, b_l, алгоритм вычисления инверсий можно реализовать в следующем виде.

Сначала сосчитаем $U'_{a|b}$ и $U'_{b|a}$

$$U'_{a|b} = \sum_{l=1}^{m}\sum_{i=1}^{n}\theta\{(b_l - a_i)\}, \quad \theta = \begin{cases} 1, b_l - a_i \geq 0, \\ 0, b_l - a_i < 0, \end{cases} \tag{7.57а}$$

$$U'_{b|a} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{l=1}^{m}\theta\{(a_i - b_l)\}, \quad \theta = \begin{cases} 1, a_i - b_l \geq 0, \\ 0, a_i - b_l < 0. \end{cases} \tag{7.57б}$$

Действительные значения $U_{a|b}$ и $U_{b|a}$, соответственно, равны

$$U_{a|b} = U'_{a|b} - \frac{U'_{a|b} + U'_{b|a} - mn}{2}, \tag{7.58а}$$

$$U_{b|a} = U'_{b|a} - \frac{U'_{a|b} + U'_{b|a} - mn}{2}, \tag{7.58б}$$

Ранговый критерий (метод) Вилкоксона.

Как уже отмечалось, этот критерий является просто другой формой реализации метода инверсий. Так же как и последний, он предназначен для проверки гипотезы о равенстве средних двух рядов измерений произвольно распределенной случайной величины. Снова по двум выборкам построим общий возрастающий вариационный ряд. Пронумеруем последовательно все элементы этого ряда, то есть присвоим каждому элементу свой ранг. Характеристикой однородности служит сумма рангов, то есть «сумма мест» элементов одного из рядов в общем вариационном ряду. Чтобы сократить число операций, будем считать сумму рангов для более короткого ряда. Обозначим длину его n, длина второго ряда $m (n \leq m)$. Тогда

$$R = \sum_{i=1}^{n} r_i, \tag{7.59}$$

где r_i – ранги элементов короткого ряда.

Если в общем ряду встречаются подряд два или несколько элементов с одинаковыми значениями, независимо от того из какой они выборки, всем им присваивается один и тот же средний для них ранг.

Параметр $R,$, как и U в методе инверсий, имеет нормальное распределение. Его истинное значение в случае идеально однородных рядов (при выполнении нулевой гипотезы) определяется выражением

$$R_0 = (n(n+m+1)-1)/2. \tag{7.60}$$

Дисперсию $\sigma^2(R)$ вычисляют по формуле, аналогичной (7.54)

$$\sigma^2(R) = \frac{mn}{12}(m+n+1). \tag{7.61}$$

Приведем решающее правило проверки гипотез:

– для двухстороннего критерия

–

$$\begin{aligned} &R_0 - z_{1-\alpha/2}\sigma(R) < R < R_0 + z_{1-\alpha/2}\sigma(R) \Rightarrow H_0 : F(a) = F(b), \\ &R_0 - z_{1-\alpha/2}\sigma(R) > R > R_0 + z_{1-\alpha/2}\sigma(R) \Rightarrow H_1 : F(a) \neq F(b). \end{aligned} \tag{7.62}$$

– для одностороннего критерия

$$\begin{aligned} &R \le R_0 + z_{1-\alpha}\sigma(R) \Rightarrow H_0 : F(a) = F(b), \\ &R_0 + z_{1-\alpha}\sigma(R) < R \Rightarrow H_1 : F(a) < F(b), \end{aligned} \tag{7.63а}$$

либо

$$R < R_0 - z_{1-\alpha}\sigma(R) \Rightarrow H_1 : F(a) > F(b). \tag{7.63б}$$

Рассмотрим для примера снова вариационный ряд (7.52). Проранжируем его

	a_1	a_2	a_3	a_4	b_1	a_5	b_2	b_3	a_6	a_7
r_i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10

b_4	a_8	b_5	b_6	b_7	a_9	b_8	a_{10}	b_9	b_{10}	b_{11}
11	13	13	13	15	16	17	18	19	20	21

(Численные значения элементов a_8, b_5, b_6 равны между собой. Им присвоен одинаковый средний ранг 13). Поскольку более короткой является выборка a, то рассчитаем сумму рангов этой выборки

$$R = 1+2+3+4+6+9+10+13+16+18 = 82,$$

$$R_0 = \frac{10(10+11+1)-1}{2} = 109{,}5, \quad \sigma(R) = 14{,}2.$$

Для двухстороннего критерия $z_{1-0,05/2}\sigma(R) = 1{,}96 \cdot 14{,}2 \approx 28$,

$$R_0 - z_{1-0,05/2}\sigma(R) = 109{,}5 - 28 = 81{,}5 < 82 \Rightarrow H_0 : F(a) = F(b).$$

Этот результат противоречит выводу, полученному методом инверсий. Правда, эмпирические значения U и R незначительно отличаются от критических. Различие в ответах связано с расположением в ряду (7.52) равных элементов a_8, b_5, b_6. В ранговом ме-

тоде их равенство учтено введением среднего ранга. Если поменять местами a_8 и b_5, то метод инверсий, как легко убедиться, даст также нулевую гипотезу. При использовании одностороннего критерия различия между эмпирическими и критическими значениями U и R оказываются больше и небольшие расхождения в подсчетах инверсий (или рангов) не приводят к противоречиям $R_0 - z_{1-0,05}\sigma(R) = 109{,}5 - 1{,}64 \cdot 14{,}2 = 87 > 82 \Rightarrow H_1$.

Ранговый метод Вилкоксона рекомендуется использовать при $n, m > 6$, при этом, как уже отмечалось, следует задавать $m \geq n$.

7.2.2. Ранговый критерий Сиджела-Тьюки

Этот метод является видоизменением рангового метода Вилкоксона. Он предназначен для сравнения эмпирических распределений, отличающихся рассеянием относительно средних, то есть для проверки гипотезы об однородности дисперсий. Как и в ранговом методе Вилкоксона, исходная информация представляется в виде общего вариационного ряда. Однако ранжирование элементов этого ряда осуществляется по-другому. Меньшие ранги присваиваются крайним элементам вариационного ряда, а большие – центральным. Ранг 1 присваивается крайнему слева, наименьшему по значению элементу, ранг 2 – крайнему справа, то есть максимальному, ранг 3 – второму элементу справа, ранги 4 и 5 – второму и третьему элементам слева, ранги 6 и 7 – третьему и четвертому элементам справа и т.д.

Далее подсчитывается сумма рангов для меньшей по объему выборки

$$R_{\text{С.-Т.}} = \sum_{i=1}^{n} r_i \,. \tag{7.64}$$

Математическое ожидание числа рангов $R_{\text{С.-Т.},0}$ и его дисперсия $\sigma^2(R_{\text{С.-Т.}})$ определяется по формулам (7.60) и (7.61). Решающее правило остается тем же: (7.62) , (7.63).

Проиллюстрируем применение критерия Сиджела-Тьюки на примере того же вариационного ряда, который был использован выше.

	a_1	a_2	a_3	a_4	b_1	a_5	b_2	b_3	a_6	a_7
r_i	1	4	5	8	9	12	13	16	17	20

b_4	a_8	b_5	b_6	b_7	a_9	b_8	a_{10}	b_9	b_{10}	b_{11}
21	19	18	15	14	11	10	7	6	3	*2

$$R_{\text{С.-Т.}} = 1+4+5+8+12+17+20+19+11+7 = 104\,.$$

Используем рассчитанные ранее (см.7.2.1.) значения $R_0 = 109{,}5$ и $\sigma(R) = 14{,}2$. Тогда для двухстороннего критерия при $\alpha = 0{,}05$ $R_0 - z_{1-\alpha/2}\sigma(R) = 81{,}5 < 104 \Rightarrow H_0 : F(a) = F(b)$. Для одностороннего критерия $R_0 - z_{1-\alpha}\sigma(R) = 87 < 104 \Rightarrow H_0 : F(a) = F(b)$.

Следовательно выборочные дисперсии отличаются незначимо, $S^2(a)$ и $S^2(b)$ или $S^2(x_1)$ и $S^2(x_2)$ однородны.

Рекомендации по условиям применения критерия те же, что и для рангового метода Вилкоксона.

7.2.3. χ^2-критерий (критерий Пирсона)

Еще один непараметрический метод сравнения двух и более эмпирических распределений произвольного вида базируется на вычислении случайной величины χ^2, которая, отвечая своему обозначению, приближенно соответствует известному теоретическому распределению Пирсона (χ^2-распределению). При этом, практически, равенство или неравенство распределений трактуется как однородность или неоднородность выборочных средних.

Исходные ряды измерений x_{ji}, $i = \overline{1, n_j}$, $j = \overline{1, k}$ разбивают на интервалы, одинаковые для всех рядов (кроме крайних интервалов, если $-\infty < x < \infty$). Выбор числа интервалов производится по общим правилам (см. раздел 4). Подсчитывается число элементов каждого ряда, попадающих в u-тый интервал n_{ju}, $u = \overline{1, l}$. Для наглядности представим результаты группировки в виде следующей таблицы.

Интервалы	Ряды измерений						Суммы по строкам
	1	2	...	j	...	k	
1	n_{11}	n_{21}		n_{j1}		n_{k1}	m_1
2	n_{12}	n_{22}		n_{j2}		n_{k2}	m_2
...							
u	n_{1u}	n_{2u}		n_{ju}		n_{ku}	m_u
...							
l	n_{1l}	n_{2l}		n_{jl}		n_{kl}	m_l
Суммы по рядам	n_1	n_2		n_j		n_k	$n = \sum_{j=1}^{k} n_j = \sum_{u=1}^{l} m_u$

Ранее мы уже использовали χ^2-критерий для проверки гипотезы о соответствии эмпирического распределения предполагаемому теоретическому. Величину χ^2 мы нахо-

дили по формуле $\chi^2 = \sum_{u=1}^{l} \frac{(n_u - np_u)^2}{np_u}$, где p_u – теоретическая вероятность попадания случайной величины в соответствующий интервал. При сравнении двух и более эмпирических распределений в качестве оценки такой вероятности принимают отношение числа элементов всех рядов, попадающих в u-тый интервал (сумма по строкам m_u), к общему числу измерений n. В таком случае

$$\chi^2 = \sum_{u=1}^{l}\sum_{j=1}^{k} \frac{\left(n_{ju} - n_j \frac{m_u}{n}\right)^2}{n_j \frac{m_u}{n}}. \tag{7.65}$$

Полученное значение χ^2 сравнивают с табличным $\chi^2_{1-\alpha,f}$ (см. также формулы (7.18, 7.19)). Число степеней свободы $f = (k-1)(l-1)$. Решающее правило

$$\chi^2 \le \chi^2_{1-\alpha,f} \Rightarrow H_0, \quad \chi^2 > \chi^2_{1-\alpha,f} \Rightarrow H_1. \tag{7.66}$$

Когда $k = 2$, расчет χ^2 резко упрощается

$$\chi^2 = n_1 n_2 \sum_{u=1}^{l} \frac{1}{n_{1u} + n_{2u}} \left(\frac{n_{1u}}{n_1} - \frac{n_{2u}}{n_2}\right)^2. \tag{7.67}$$

В этом случае число степеней свободы $f = l - 1$. Необходимо подчеркнуть, что при малых k, в частности при $k = 2$, отношение m_u / n, а вместе с ним и χ^2 оказываются очень чувствительными к случайным значениям n_{ju}. Поэтому этот критерий может быть использован лишь при достаточно больших объемах выборок, по крайней мере при $n > 50$.

7.2.4. Критерий знаков

Критерий знаков используют для сравнения двух рядов, попарные элементы которых получены при параллельных измерениях (в сопоставимых условиях). Критерий применяется также для оценки однородности двух зависимостей случайной величины от одного и того же фактора.

Рассматриваются два ряда одинаковой длины x_{1i} и x_{2i}, $i = \overline{1,n}$. Проверяются гипотезы об однородности эмпирических распределений,

$$H_0 : F_1(x) = F_2(x), \quad H_1 : F_1(x) \ne F_2(x) \tag{7.68}$$

или однородности зависимости x_1 и x_2 от фактора Φ.

$$H_0 : x_1(\Phi) = x_2(\Phi),\ \ H_1 : x_1(\Phi) \neq x_2(\Phi) \tag{7.69}$$

Для парных значений x_{1i} и x_{2i} вычисляют разности $d_i = x_{1i} - x_{2i}$ и находят число положительных и отрицательных разностей $m^+ = \sum_{i=1}^{n} \theta\{d_i\},\ \ m^- = \sum_{i=1}^{n} \theta\{-d_i\}$, где функция Хэвисайда $\theta\{y\} = \begin{cases} 1, & y > 0, \\ 0, & y \leq 0, \end{cases} \qquad y = d_i,\ -d_i.$

Введем обозначение $N = m^+ + m^-$. Нулевые разности из дальнейшего анализа исключаются. Случайная величина $m = m^+, m^-$ имеет распределение, близкое к нормальному с несмещенной оценкой математического ожидания

$$m_0 = (N-1)/2 \tag{7.70}$$

и дисперсией

$$\sigma^2(m) = (N+1)/4\,. \tag{7.71}$$

Доверительные границы для m_0 при уровне значимости α выражаются стандартным способом

$$P\{m - z_{1-\alpha/2}\sigma(m) \leq m_0 \leq m + z_{1-\alpha/2}\sigma(m)\} = 1-\alpha\,. \tag{7.72}$$

Имея в виду, что m_0 уже определено формулой (7.70), двойное неравенство в (7.72) можно превратить в условие выполнения нулевой гипотезы

$$m_0 - z_{1-\alpha/2}\sigma(m) \leq m \leq m_0 + z_{1-\alpha/2}\sigma(m), \tag{7.73}$$

где в качестве m можно подставить либо m^-, либо m^+. Поскольку m^+ и m^- связаны между собой однозначно через N, то чаще для упрощения используют меньшее из них $m = m_{\text{мин}} = \min\left\{ m^+, m^- \right\}$. Тогда достаточно определить только одно критическое значение

$$m_{\text{кр}} = m_{1-\alpha,N} = m_0 - z_{1-\alpha/2}\sigma(m) \tag{7.74}$$

или

$$m_{1-\alpha,N} = (N-1)/2 - z_{1-\alpha/2}\sqrt{N+1}/2\,. \tag{7.74а}$$

Решающее правило

$$m \geq m_{1\text{-}\alpha,N} \Rightarrow H_0,\ \ m < m_{1-\alpha,N} \Rightarrow H_1. \tag{7.75}$$

Формула (7.74) справедлива уже при $N > 8$, обычно значения $m_{1-\alpha,N}$ округляют до целого числа. При $N \le 8$ $m_{1-\alpha,N} = 0$. Это означает, что при $N \le 8$, если даже все разности d_i оказываются одного знака, нулевая гипотеза не может быть отвергнута.

Пример

Сравнивается работа двух стабилизаторов напряжения при различных температурах. По результатам синхронных отсчетов определяются знаки разностей напряжений и вычисляется число положительных и отрицательных разностей. Исходная информация и результаты анализа при $\alpha = 0{,}05$ представлены в таблице

Диапазон температур	Число N	Из них		$m_{1-0,05/2,N}$	$H_0 \vee H_1$
		m^+	m^-		
0...15	30	12	18	9	H_0
15...30	50	20	30	17	H_0
30...45	20	4	16	5	H_1
0...45	100	36	64	39	H_1

Из-за ограниченности объемов выборок для каждого из диапазонов температуры нельзя считать стабилизаторы отличающимися по качеству, но суммарный эффект (последняя строка в таблице) служит основанием для принятия H_1.

Задача

В сеансе телепатической связи перципиент B правильно воспроизвел 15 из 25 образов, переданных индуктором A. В свою очередь A правильно воспроизвел 15 из 20 образов, переданных ему B. Оцените на уровне значимости $\alpha = 0{,}05$ справедливость утверждения о наличии телепатической связи между A и B в вариантах $A \to B$, $B \to A$.

7.3. Метод рерандомизации и бутстреп-метод

Методы, названия которых вынесены в заголовок этого параграфа, не являются ни параметрическими, ни непараметрическими. Они служат примерами специальных методов анализа, ставших возможными в связи с доступностью быстродействующей вычислительной техники. В таких методах реализуются принципы численного моделирования. Короткие ряды измерений (малые выборки) искусственно «расширяются» путем численной имитации физического эксперимента.

7.3.1. Метод рерандомизации

Предназначен для проверки гипотезы о равенстве средних двух эмпирических распределений. Суть его состоит в следующем. Пусть имеется два ряда измерений одной и той

же физической величины x_{1i}, $i=\overline{1,n_1}$, x_{2i}, $i=\overline{1,n_2}$. Найдем сначала по обоим рядам средние значения $\bar{x}_1$ и $\bar{x}_2$ и как меру различия между ними разность $d_д=\bar{x}_1-\bar{x}_2$. Обе выборки объединим в общий ряд и пронумеруем произвольным образом элементы ряда x_u, $u=\overline{1,n}$, $n=n_1+n_2$. Вычислим среднее значение элементов этого ряда $\bar{x}=\sum_{u=1}^{n}x_u/n=(n_1\bar{x}_1+n_2\bar{x}_2)/n$.

Теперь из общего ряда случайным образом извлечем n_1 или n_2 значений x_u. Далее для определенности будем рассматривать только вариант извлечения n_1 элементов. При работе на ПК такой выбор легко осуществить с помощью генератора случайных чисел (RND). Генератор вырабатывает случайные равномерно распределенные рациональные числа в интервале [0,1]. Если случайное число, заданное генератором, умножить на (n_1+1) и отбросить дробную часть произведения, то получим порядковый номер элемента, извлекаемого из общего ряда. Подобным образом в режиме «испытаний без возврата» сформируем новую выборку $x_{11\nu}$, $\nu=\overline{1,n}$. Найдем среднее значение элементов этой выборки $\bar{x}_{11}$.

Среднее значение оставшихся n_2 элементов общего ряда легко вычисляется: $\bar{x}_{21}=(n\bar{x}-n_1\bar{x}_{11})/n_2$.

Найдем разность $d_1=\bar{x}_{11}-\bar{x}_{21}$. Проделаем все операции еще раз и вычислим $\bar{x}_{12}$, $\bar{x}_{22}$ и d_2. Повторяя операции снова, получим ряд d_μ, $\mu=\overline{1,m}$, m – длина нового ряда. Число m следует задавать достаточно большим, чтобы получить устойчивое распределение случайной величины d. (Максимальное число возможных неповторяющихся вариантов случайных выборок равно числу сочетаний $C_n^{n_1}=\dfrac{n!}{n_1!n_2!}$. При небольших n число m должно быть соизмеримо с C_n^m). Очевидно, что при большом числе m среднее значение $\bar{d}\to 0$, а $\sigma^2(d)=\dfrac{1}{m-1}\sum_{\mu=1}^{m}d_\mu^2$. В силу центральной предельной теоремы случайная величина d имеет нормальное распределение, а нормированная величина $d/\sigma(d)$ подчиняется стандартному нормальному распределению.

Вернемся к $d_д$ – фактической разности средних двух исходных рядов. Отношение $|d_д|/\sigma(d)$ можно теперь сравнить с квантильным значением $z_{1-\alpha}$. Решающее правило:

$$|d_д|/\sigma(d)\le z_{1-\alpha}\Rightarrow H_0,\quad |d_д|/\sigma(d)>z_{1-\alpha}\Rightarrow H_1. \qquad (7.77)$$

Обратим внимание на то, что метод рерандомизации применим для сравнения только некоррелированных рядов измерений, полученных в рандомизированных экспериментах. Отсюда и название – рерандомизация. Если коэффициент корреляции $r_{x_1x_2}$ значим и существенно отличается от нуля, то выбор гипотезы может оказаться сомнительным.

7.3.2. Бутстреп-метод

Это еще один пример статистического численного моделирования. Строго говоря, бутстреп не является методом сравнения рядов измерений. Это просто способ искусственного удлинения выборок малого объема, которые затем сравниваются с помощью обычных критериев.

Сущность бутстрепа заключается в следующем. Предположим, имеется короткий ряд измерений x_{1i}, $i=\overline{1,n_1}$, n_1 – длина ряда, среднее значение $\bar{x}_1$. Истинное СКО $\sigma(x_1)$ неизвестно. Рассчитанные с учетом выборочного СКО $S(x_1)$ доверительные границы для истинного значения неприемлемо велики. Попытаемся их уменьшить. Пронумеруем исходную выборку от 1 до n_1. Воспользуемся снова RND (генератором случайных чисел). Выработанное генератором число умножим на (n_1+1) и ограничим ответ целой частью числа. Извлечем из исходной выборки значение x_{11}, зафиксируем его и вернем в исходную выборку. Это означает, что, в отличие от предыдущего метода, теперь отбор осуществляется в режиме «испытаний с возвратом».

Подобным образом извлечем из исходной выборки n_1 значений. При этом некоторые из элементов будут извлечены два или более раз, другие – ни разу.

Просуммируем все значения и рассчитаем $\bar{x}_{11}$. Повторим операции и найдем $\bar{x}_{12}, \bar{x}_{13}, ..., \bar{x}_{1\mu}, ..., \bar{x}_{1m}$ $(\mu=\overline{1,m})$. Число испытаний m снова следует выбирать сравнительно большим, чтобы получить устойчивое распределение $\bar{x}_1$. Практически, m должно быть не меньше 100, лучше – больше. Искусственно сформированная случайная величина $\bar{x}_1$ имеет распределение близкое к нормальному. Для нее можно сосчитать $\bar{\bar{x}}_1$ и $\sigma(\bar{x}_1)$

$$\bar{\bar{x}}_1 = \frac{1}{m}\sum_{\mu=1}^{m}\bar{x}_{1\mu}, \tag{7.78}$$

$$\sigma(\bar{x}_1) = \sqrt{\frac{1}{m-1}\sum_{\mu=1}^{m}(\bar{x}_{1\mu}-\bar{\bar{x}}_1)^2}. \tag{7.79}$$

Мы использовали здесь для выборочного СКО обозначение $\sigma(\bar{x}_1)$, имея в виду, что m велико. Доверительные границы погрешности измерения x_{01} можно существенно сузить, определяя их как

$$\varepsilon_{\bar{x}_1} = z_{1-\alpha/2} \cdot \sigma(\bar{x}_1)/\sqrt{n_1}\ . \qquad (7.80)$$

(Формально можно было бы записать еще жестче: $\varepsilon_{\bar{\bar{x}}_1} = z_{1-\alpha/2}\sigma(\bar{x}_1)/\sqrt{m}$. Однако представляется, что этот формальный подход не отражает реальной картины).

Вернемся к задаче сравнения рядов измерений. Если сравниваются два коротких ряда, то для них будстреп-методом следует найти $\sigma^2(\bar{x}_1)$, $\sigma^2(\bar{x}_2)$. Далее по критерию Фишера можно проверить эти дисперсии на однородность; число степеней свободы дисперсий – $f_1 = n_1 - 1$ и $f_2 = n_2 - 1$ (n_2 – длина второго ряда).

Сравнение средних осуществляется по правилу

$$|\bar{x}_1 - \bar{x}_2| \le \varepsilon_{\bar{y}} \Rightarrow H_0,\ |\bar{x}_1 - \bar{x}_2| > \varepsilon_{\bar{y}} \Rightarrow H_1, \qquad (7.81)$$

где

$$\varepsilon_{\bar{y}} = z_{1-\alpha}\sqrt{\frac{\sigma^2(\bar{x}_1)}{n_1} + \frac{\sigma^2(\bar{x}_2)}{n_2}}\ . \qquad (7.82)$$

8. ОБРАБОТКА РЕЗУЛЬТАТОВ НЕРАВНОТОЧНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ

Неравноточными называются измерения, которые выполняются различающимися по точности средствами измерений и/или в различных условиях.

Если имеется несколько рядов (серий, групп) измерений некоторой физической величины, полученных в разные сроки либо в различных условиях, либо различными исполнителями, то результаты этих измерений и характеристики рассеяния неизбежно отличаются друг от друга. Целью обработки является получение достоверных сведений о действительном значении физической величины и доверительных границах ее погрешности на основе полного использования информации, содержащейся во всех измерениях. Однако степень доверия к результатам различных рядов может быть разной. Это обстоятельство следует учесть при обработке.

Пусть для каждой из k групп известны $\bar{x}_j$, $S^2(x_j)$, n_j, $j=\overline{1,k}$. (Вместо значения $S^2_{\bar{x}_j}$ может быть использовано $S^2_{\Sigma,j}$ – суммарная дисперсия результата измерений, включающая случайную и систематическую составляющие погрешности $S^2_{\Sigma,j}=S^2_{\bar{x}}+\sigma^2(\theta)$).

Предварительно исходная информация проверяется на однородность дисперсий (равноточность измерений) и однородность средних (отсутствие больших систематических погрешностей). Таким образом, сначала проверяются гипотезы

$$H'_0:\sigma^2(x_j)=\sigma^2(x_u),\ H'_1:\sigma^2(x_j)\neq\sigma^2(x_u), \tag{8.1а}$$

$$H''_0:x_{0j}=x_{0u},\ H''_1:x_{0j}\neq x_{0u},\ j,u=\overline{1,k}. \tag{8.1б}$$

В случае выполнения H'_0 – измерения равноточны и результаты групп просто осредняются с учетом n_j.. Если принимается H'_1 – измерения неравноточны. Теперь анализируется H'': если принимается H''_1 это означает, что между средними существуют значительные различия, определяемые неучтенными факторами (не исключенной систематической погрешностью, влиянием условий измерения, изменением размера измеряемой величины). H'_0, H'_1 проверяются по критериям Бартлетта или Кочрена. H''_0, H''_1 – по методу однофакторного дисперсионного анализа, если $k>2$. При совместном принятии гипотез H''_0 и H'_1 осуществляется обработка всех рядов как неравноточных.

Трудность заключается в том, чтобы учесть разную степень доверия к рядам измерений. С этой целью для каждого ряда задают вес $g_j, j=\overline{1,k}$. Существуют различные

способы определения весов. Например, можно использовать экспертное оценивание. Эксперты, руководствуясь своими субъективными представлениями, выражают степень доверия к рядам измерений в баллах. При квалифицированной экспертизе средний балл может быть приемлемой характеристикой качества рядов.

Математическая статистика дает более объективный способ задания весов измерений. На основе метода максимального правдоподобия доказывается, что наилучшей оценкой веса служит величина, обратная дисперсии среднего арифметического

$$g_j = 1/S_{\bar{x}}^2. \tag{8.2}$$

Легко видеть, что g_j в этом случае является размерной величиной. Можно перейти и к безразмерным весам $\tilde{g}_j$.

$$\tilde{g}_j = S_{\text{оп}}^2 / S_{\bar{x}_j}^2, \tag{8.2}$$

где $S_{\text{оп}}^2$ – некоторое опорное значение одной из $S_{\bar{x}_j}^2$. Например, $S_{\text{оп}}^2 = \max\left\{S_{\bar{x}_j}^2, j = \overline{1,k}\right\}$. В таком случае все веса $\tilde{g}_j \geq 1$. Чтобы не усложнять запись, далее мы будем использовать веса в форме g_j, рассчитываемые по формуле (8.2). Среднее взвешенное значение случайной величины по всем рядам измерений теперь находят как

$$\bar{x} = \left(\sum_{j=1}^{k} g_j \bar{x}_j\right)/g, \tag{8.4}$$

где сумма весов $g = \sum_{j=1}^{k} g_j$.

Рассматривая $\bar{x}$ как результат косвенного измерения, рассчитаем для него дисперсию

$$S_{\bar{x}}^2 = \sum_{j=1}^{k}\left(\frac{\partial \bar{x}}{\partial \bar{x}_j}\right)^2 \cdot S_{\bar{x}_j}^2 = \sum_{j=1}^{k}\left(\frac{g_j}{g}\right)^2 \cdot \frac{1}{g_j} = \frac{1}{g} \tag{8.5}$$

или с учетом (8.2)

$$S_{\bar{x}}^2 = 1/\sum_{j=1}^{k} \frac{1}{S_{\bar{x}_j}^2}. \tag{8.6}$$

В частном случае суммирования результатов отдельных измерений, когда $g_j = 1$, $k = n$, $j = i$, а $\sigma(x)$ – известна, из (8.4) и (8.6) получим обычное выражение для среднего $\bar{x} = \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)/n$ и СКО результата измерения $\sigma_{\bar{x}} = \sigma(x)/\sqrt{n}$.

Формула (8.6) отражает то примечательное обстоятельство, что дисперсия результата измерения, вычисляемая с учетом весов, оказывается меньше минимальной из частных дисперсий. Таким образом, при совместной обработке не только уточняется значение среднего, но и уменьшается его СКО. Практически важной, но не имеющей четкого решения является задача нахождения доверительных границ погрешности $\varepsilon_{\bar{x}}$. Традиционная формула

$$\varepsilon_{\bar{x}} = t_{1-\alpha/2,f^*} \cdot S_{\bar{x}} \tag{8.7}$$

не вызывает сомнений. Сомнения вызывают рекомендации по вычислению f^* – числа степеней свободы $S^2_{\bar{x}}$. Эту проблему мы уже обсуждали в разделе 6. Там же было приведено имеющее широкое хождение в метрологической литературе выражение для расчета f^* (формула (6.34)).

Если в формулу (6.34) в качестве коэффициентов влияния подставить $\partial\bar{x}/\partial\bar{x}_j = g_j/g$, то она приводится к виду

$$f^* = \frac{g^2}{\sum\limits_{j=1}^{k} g_j^2/(n_j+1)} - 2. \tag{8.8}$$

Мы уже отмечали, что формулы (6.34), а значит и (8.8) завышают f^*. Легко убедиться, что в случае $g_j = const = g_1$, $n_j = const = n_1$, $f^* = k(n_1+1)-2$; при $k>2$ оказывается $f^* > \sum\limits_{j=1}^{k} n_j$. Завышение f^* влечет за собой подстановку в формулу (8.7) заниженных значений $t_{1-\alpha/2,f^*}$ и следовательно, к завышению точности измерения $\bar{x}$.

Отражением неудовлетворенности формулой (8.8) служит рекомендация использовать выражение

$$f^{**} = k(n_{\text{мин}} - 1), \tag{8.9}$$

где $n_{\text{мин}} = \min\{n_j,\ j = \overline{1,k}\}$ равное длине самого короткого ряда.

Представляется, что неопределенность, связанную с выбором f^*, можно исключить, если обратиться к предложенному в разделе 6 методу расчета доверительных границ погрешности результата косвенных измерений (см. выражение (6.35)). Для задачи, решаемой в настоящем разделе, это выражение легко трансформируется к виду

$$\tilde{\varepsilon}_{\bar{x}} = \left[\sqrt{\sum_{j=1}^{k}(\varepsilon_{\bar{x}_j} \cdot g_j)^2}\right] / g . \qquad (8.10)$$

Число степеней свободы $\tilde{f}$ для $S^2_{\tilde{x}}$ при необходимости можно найти из соотношения

$$t_{1-\alpha/2,\tilde{f}} = \tilde{\varepsilon}_{\bar{x}} / S_{\bar{x}} . \qquad (8.11)$$

Формула (8.10) позволяет не только обрабатывать ряды неравноточных измерений, но и исключать те из них, которые ухудшают результаты осреднения. Покажем это на примере.

Пример

По литературным данным собраны результаты измерений γ – удельной поверхностной энергии некоторой жидкости. Необходимо уточнить среднее значение и доверительные границы погрешности результата измерения при $\alpha = 0{,}05$. Исходная информация и некоторые результаты вычислений представлены в следующей таблице. (Значения $\bar{\gamma}_j$, $S(\gamma_j)$ даны в мДж/м^2).

j	Исходная информация			Результаты вычислений					
	$\bar{\gamma}_j$	$S(\gamma_j)$	n_j	$S^2_{\bar{\gamma}_j}$	g_j	$S^{(j)}_{\bar{\gamma}}$	$t_{1-0,05/2,f_j}$	$\varepsilon_{\bar{\gamma}_j}$	$\tilde{\varepsilon}^{(j)}_{\bar{\gamma}}$
1	19,5	1,5	9	0,25	4	0,5	2,31	1,16	1,16
2	20,0	1,6	25	0,10	10	0,27	2,06	0,62	0,55
3	18,4	2,8	16	0,50	2	0,25	2,13	1,49	0,52
Суммы			50		16				
4	20,1	0,6	3	0,12	8,3	0,20	4,30	1,50	0,62

Остановимся сначала на анализе данных, приведенных в первых трех строках таблицы. Прежде всего убедимся, что средние значения поверхностной энергии в первых трех рядах измерений однородны, нет значимых систематических погрешностей ни в одном из рядов. Для проверки гипотезы однородности средних воспользуемся методом однофакторного дисперсионного анализа (см. раздел 7). Рассчитаем дисперсию воспроизводимости $S^2_0 = \frac{1}{f}\sum_{i=1}^{k} f_j S^2(\gamma_j) = \frac{1}{47}(8 \cdot 2{,}25 + 24 \cdot 2{,}56 + 15 \cdot 7{,}84) = 4{,}2$ (напомним, что $f_j = n_j - 1$, а $f = \sum_{j=1}^{k} f_j$). Затем найдем среднее взвешенное по числу измерений значение $\bar{\gamma}_n = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{k} n_j \bar{\gamma}_j = \frac{1}{50}(9 \cdot 19{,}5 + 25 \cdot 20{,}0 + 16 \cdot 18{,}4) = 19{,}4$. Рассчитаем межгрупповую дисперсию $S^2_{\text{м}} = \frac{1}{k-1}\sum_{j=1}^{k} n_j(\bar{\gamma}_j - \bar{\gamma}_n)^2 = \frac{1}{2}[9 \cdot (19{,}5 - 19{,}4)^2 + 25(20{,}0 - 19{,}4)^2 + 16(18{,}4 - 19{,}4)^2] = 12{,}5$. Отношение Фишера $F = S^2_{\text{м}} / S^2_0 = 12{,}5 / 4{,}2 = 3{,}0$. Критическое значение $F_{1-0,05;2;47} = 3{,}2$, $F < F_{1-0,05;2;47}$. Следовательно, средние однородны.

Выясним теперь, можно ли считать эти измерения равноточными. С этой целью следует проверить гипотезу об однородности дисперсий. Поскольку объемы выборок неодинаковы, а $k > 2$, воспользуемся критерием Бартлетта.

Рассчитаем $\chi^2 = B/C$:

$$B = f \ln S_0^2 - \sum_{j=1}^{k} f_j \ln S_{(\gamma_j)}^2 = 47 \ln 4{,}2 - (8 \ln 2{,}25 + 24 \ln 2{,}56 + 15 \ln 7{,}84) = 7{,}6,$$

$$C = 1 + \frac{1}{3(k-1)}\left(\sum_{j=1}^{k} \frac{1}{f_j} - \frac{1}{f}\right) = 1 + \frac{1}{6}\left[\left(\frac{1}{8} + \frac{1}{24} + \frac{1}{15}\right) - \frac{1}{47}\right] = 1{,}035, \quad \chi^2 = 7{,}35.$$

Критическое значение $\chi^2_{1-0,05;2} = 6{,}0$. Так как $\chi^2 > \chi^2_{1-0,05;2}$, дисперсии неоднородны, а значит измерения неравноточны.

Теперь выполним обработку данных как рядов неравноточных измерений. Выпишем $S^2_{\bar{\gamma}_j}$ и найдем $g_j = 1/S^2_{\bar{\gamma}_j}$. Результаты выписаны в таблице. Там же приведены значения коэффициента Стьюдента $t_{1-0,05/2;f_j}$, $(f_j = n_j - 1)$ и доверительные границы погрешностей $\varepsilon_{\bar{\gamma}_j} = t_{1-0,05/2;f_j} \cdot S_{\bar{\gamma}_j}$. Рассчитаем среднее значение с учетом веса каждого ряда (по формуле (8.4)) $\bar{\gamma}^{(3)} = 19{,}7$ (цифра в скобках в надстрочном индексе показывает число суммируемых рядов). Обратите внимание на то, что $\bar{\gamma}^{(3)}$ заметно отличается от $\bar{\gamma}_n$, это связано с малым весом третьего ряда. Используя формулу (8.6), найдем результирующее СКО $S^{(3)}_{\bar{\gamma}} = 0{,}25$.

Как и следовало ожидать, $S^{(3)}_{\bar{\gamma}}$ оказалось меньше любого из суммируемых $S_{\bar{\gamma}_j}$. Далее расчеты выполним в двух вариантах: по формулам (8.7), (8.8), рекомендуемым в литературе, и по предлагаемым в данном пособии формулам (8.10), (8.11). Соответственно получим $f^{*(3)} = 43$, $\varepsilon^{(3)}_{\bar{\gamma}} = 0{,}50$ и $\tilde{\varepsilon}_{\bar{\gamma}} = 0{,}52$, $\tilde{f} = 21$. Доверительные границы погрешности (ДГП) результата измерений по обоим вариантам оказались практически равными. Числа степеней свободы f^* и $\tilde{f}$ отличаются больше, но значения коэффициентов Стьюдента отличаются незначительно. Стоило ли противопоставлять друг другу варианты расчета?

Привлечем к анализу результаты еще одного – четвертого ряда измерений (см. таблицу). Длина ряда невелика, но он характеризуется небольшим СКО и, следовательно, значительным весом. С добавлением этого ряда среднее немного увеличилось $\bar{\gamma}^{(4)} = 19{,}8$, но существенно уменьшилось СКО $S^{(4)}_{\bar{\gamma}} = 0{,}20$. Еще более существенными, даже принципиально различными оказываются результаты расчета ДГП по различным формулам.

В первом варианте $f^{(4)} = 24$, $\varepsilon^{(4)}_{\bar{\gamma}} = 0{,}41$, с добавлением нового ряда уменьшаются и СКО, и доверительные границы погрешности общего результата измерения. Однако $\tilde{\varepsilon}_{\bar{\gamma}} = 0{,}62$, то есть добавление четвертого ряда приводит к ухудшению результатов.

В столбце таблицы, обозначенном $\tilde{\varepsilon}_{\bar{\gamma}}^{(j)}$, представлены значения ДГП при последовательном суммировании рядов. Можно видеть, что $\tilde{\varepsilon}_{\bar{\gamma}}^{(1)} > \tilde{\varepsilon}_{\bar{\gamma}}^{(2)} > \tilde{\varepsilon}_{\bar{\gamma}}^{(3)}$, то есть обобщение этих рядов является оправданным. Привлечение к обработке четвертого ряда нецелесообразно.

Ответ: $\gamma = (19{,}7 \pm 0{,}5)$ мДж/м^2, $p = 0{,}95$.

Дополнительное замечание

Дисперсия $S_{\bar{x}}^2$ по определению характеризует рассеяние средних относительно истинного значения. Эту же величину можно выразить по-другому. Будем рассматривать $\bar{x}_j$, $j = \overline{1,k}$ как выборку случайных величин. Изменчивость значений $\bar{x}_j$ связана с ограниченностью рядов измерений n_j и с влиянием неисключенных остатков систематических погрешностей. Последние, в силу своей некоррелированности, также можно рассматривать как фактор случайности. Таким образом, с учетом весов каждого из $\bar{x}_j$ найдем еще одну дисперсию

$$\tilde{\tilde{S}}_{\bar{x}}^2 = \frac{1}{(k-1)g} \sum_{j=1}^{k} g_j (\bar{x}_j - \bar{x})^2 . \qquad (8.12)$$

Если средние однородны, то, как правило, выполняется соотношение $\tilde{\tilde{S}}_{\bar{x}}^2 \le S_{\bar{x}}^2$. Это приближение заранее не определено. Однако если оказывается, что $S_{\bar{x}}^2 < \tilde{\tilde{S}}_{\bar{x}}^2$, то это обстоятельство становится настораживающим. Оно может свидетельствовать о том, что в одном из рядов (или в нескольких из них) вольно или невольно сделано «улучшение» данных. Например, исследователь мог исключить непонравившиеся ему результаты отдельных измерений, принимая их без достаточных оснований за промахи. Составляя при обработке комбинации различных рядов, можно попытаться выявить из них подозрительные.

Вернемся к нашему примеру. По трем рядам измерений найдем $\tilde{\tilde{S}}_{\bar{\gamma}}^{2(3)} = 0{,}14$. Значение $S_{\bar{\gamma}}^{2(3)} = (0{,}25)^2$. Отношение $\tilde{\tilde{S}}_{\bar{\gamma}}^{2(3)} / S_{\bar{\gamma}}^{2(3)} = 2{,}2$. Следовательно, исходные данные в одном из рядов «улучшены». Для сравнения вычислим обе дисперсии по двум первым рядам: $\tilde{\tilde{S}}_{\bar{\gamma}}^{2(2)} = 0{,}05$, $S_{\bar{\gamma}}^{2(2)} = 0{,}07$, отношение $\tilde{\tilde{S}}_{\bar{\gamma}}^{2(2)} / S_{\bar{\gamma}}^{2(2)} < 1$. Исходные данные третьего ряда требуют перепроверки.

9. ПЛАНИРОВАНИЕ И АНАЛИЗ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПРИ ЗАДАННЫХ ВЕРОЯТНОСТЯХ ОШИБОК ПЕРВОГО И ВТОРОГО РОДОВ

9.1. Ошибки первого и второго родов

Рассмотренные в предыдущих разделах методы проверки статистических гипотез построены по одному и тому же принципу: при заданном уровне значимости α определяются двусторонние или односторонние границы области допустимых для нулевой гипотезы значений. Выход проверяемого параметра за пределы этой области является основанием для принятия альтернативной гипотезы. Однако следует иметь в виду, что, выбирая одну из двух гипотез, в действительности мы имеем не два, а четыре возможных исхода. В самом деле, мы можем:

– принять нулевую гипотезу, когда она верна – вероятность этого исхода $1-\alpha$;

– отвергнуть нулевую гипотезу, когда она верна, и принять ложную альтернативную – при этом совершается ошибка первого рода, равная α, то есть уровню значимости;

– принять нулевую гипотезу, когда она ложна, и отвергнуть верную альтернативную гипотезу – при этом совершается ошибка второго рода, обозначим ее β;

– отвергнуть нулевую гипотезу, когда она неверна, и принять верную альтернативную гипотезу – вероятность такого исхода называют *мощностью критерия,* ее значение $1-\beta$.

Для наглядности вероятности всех возможных исходов показаны в табл. 9.1.

Таблица 9.1

Принимаемая гипотеза	Верная гипотеза	
	H_0	H_1
H_0	$1-\alpha$	β
H_1	α	$1-\beta$

Таким образом, выбирая любую из гипотез, мы рискуем совершить ошибку первого или второго рода. Последствия этих ошибок могут быть очень разными. Рассмотрим типичную ситуацию. Пусть некоторый радиолокационный критерий используется для идентификации гроз. Если найденное по данным МРЛ значение критерия превышает критическое, то нулевая гипотеза (гроз нет) отвергается и принимается альтернативная (облако грозоопасно). В случае, когда реальное облако оказывается негрозовым, то есть когда отвергается верная нулевая и принимается ложная альтернативная гипотеза, совершается ошибка первого рода. Следствием этой ложной тревоги является, например, закрытие аэропорта, указание самолетам следовать на запасные аэродромы и т.п. Авиакомпания несет

дополнительные расходы, а пассажиры теряют время и деньги, вынуждены изменять свои планы. Однако возможен и другой исход.

Вычисленное значение критерия меньше критического, принимается нулевая гипотеза, когда справедлива альтернативная – облако грозовое. Самолет, попавший в такое облако, может быть поражен молнией, и тогда последствия могут оказаться трагическими. Такова плата за ошибку второго рода. В производственной сфере часто интерпретируют вероятность ошибки первого рода как риск поставщика, а вероятность ошибки второго рода как риск потребителя.

Задача заключается в том, чтобы уменьшить ту из ошибок, нежелательные последствия которой больше. Естественное желание уменьшить обе ошибки, к сожалению, не может быть удовлетворено без существенного увеличения числа испытаний. Продемонстрируем связь между ошибками α и β. Пусть исследуется некоторая физическая величина x. Обозначим предполагаемое среднее значение этой величины, соответствующее нулевой гипотезе, через $\bar{x}_0$, а аналогичное значение, соответствующее альтернативной гипотезе, через $\bar{x}_1$. Назовем разность $\bar{x}_1 - \bar{x}_0$ *смещением параметра.* Плотность распределения случайной величины x, при условии выполнения нулевой гипотезы, обозначим $f(x|H_0)$, соответственно для альтернативной – $f(x|H_1)$. В общем случае виды распределений $f(x|H_0)$ и $f(x|H_1)$ могут быть разными – рис. 9.1.

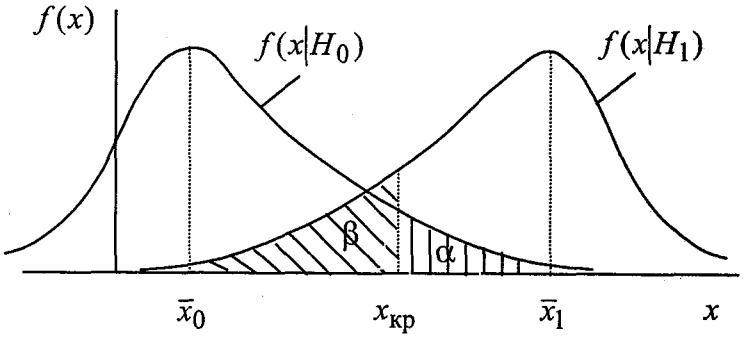


Рис. 9.1. Графическая интерпретация ошибок первого и второго рода.

Зададим $x_{кр}$ в качестве одностороннего критерия, разделяющего области принятия H_0 и H_1.. Если измеренное значение x удовлетворяет условию $x < x_{кр}$,, то следует принять нулевую гипотезу, в противном случае при $x > x_{кр}$ – альтернативную. Следовательно, ошибка первого рода (или уровень значимости) определяется выражением

$$\alpha = \int_{x_{кр}}^{\infty} f(x|H_0)dx. \qquad (9.1)$$

В свою очередь

$$\beta = \int_{-\infty}^{x_{кр}} f(x|H_1)dx. \qquad (9.2)$$

Примечание: если $\bar{x}_1 - \bar{x}_0 < 0$, то α и β на рис. 9.1 поменяются местами. Соответственно изменятся пределы интегрирования.

Легко видеть, что соотношение между α и β зависит от положения $x_{кр}$. Если на рис. 9.1 сместить $x_{кр}$ вправо, то α уменьшится, а β увеличится. Уменьшая $x_{кр}$, мы получим увеличение α и уменьшение β.

Есть еще один фактор, изменяющий соотношение между α и β. Это смещение параметра $\bar{x}_1 - \bar{x}_0$. Если например зафиксировать $\bar{x}_0$ и $x_{кр}$ и увеличивать $\bar{x}_1$, то ошибка второго рода будет монотонно уменьшаться, мощность критерия будет стремиться к единице, отражая тот тривиальный факт, что, чем больше различие между гипотезами, тем увереннее мы их различаем.

9.2. Планирование числа испытаний при заданных значениях α и β

Если смещение параметра $\bar{x}_1 - \bar{x}_0$ заранее задано, то единственным путем одновременного уменьшения ошибок первого и второго рода является увеличение числа испытаний. При этом соотношение между α и β по-прежнему определяется значением $x_{кр}$, разделяющим области принятия H_0 и H_1. Пусть случайная величина x имеет нормальное распределение с дисперсией $\sigma^2(x)$. Плотности вероятности $f(x|H_0)$ и $f(x|H_1)$ отличаются только параметрами $\bar{x}_0$ и $\bar{x}_1$, как смещенными друг относительно друга центрами распределений – рис. 9.2.

С увеличением числа испытаний дисперсия $\sigma^2_{\bar{x}}$ уменьшается в соответствии с со отношением $\sigma^2_{\bar{x}} = \sigma^2(x)/n$. Тогда графики плотностей вероятности $f(\bar{x}|H_0)$ и $f(\bar{x}|H_1)$ сжимаются

С увеличением числа испытаний дисперсия $\sigma^2_{\bar{x}}$ уменьшается в соответствии с соотношением $\sigma^2_{\bar{x}} = \sigma^2(x)/n$. Тогда графики плотностей вероятности $f(\bar{x}|H_0)$ и $f(\bar{x}|H_1)$ сжимаются по оси абсцисс. Соответственно уменьшаются площади криволинейных треугольников, равные α и β.

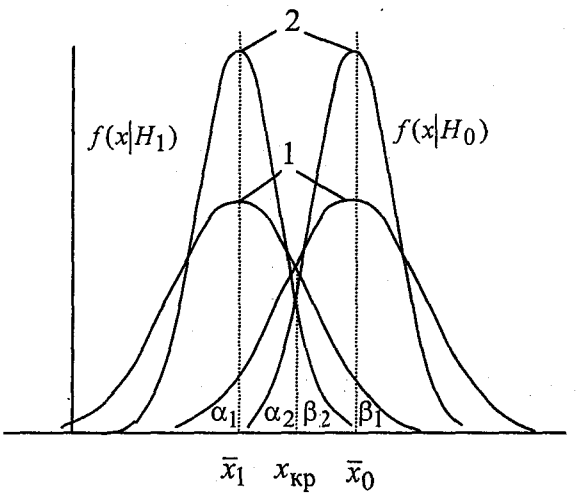


Рис. 9.2. Изменение ошибок первого и второго рода при увеличении числа испытаний. $n_2 > n_1$.

Зададимся значениями α и β (удовлетворяющими и поставщика, и потребителя) и оценим то число испытаний n^*, при котором с выбранными рисками можно будет принять либо H_0, либо H_1. Неизвестным при этом является и $x_{кр}$, которое также следует найти. Впрочем, если $\alpha = \beta$, то в силу симметричности графиков плотности распределений, как легко убедиться, $x_{кр} = (\bar{x}_0 + \bar{x}_1)/2$. При $\alpha \neq \beta$ это простое соотношение не выполняется.

Перейдем к стандартному нормальному распределению, то есть центрируем обе плотности относительно их средних и нормируем на $\sigma_{\bar{x}}$. Теперь критические значения $z_{кр,0}$ и $z_{кр,1}$ окажутся различными:

$$z_{кр,0} = \frac{x_{кр} - \bar{x}_0}{\sigma_{\bar{x}}} = \frac{x_{кр} - \bar{x}_0}{\sigma(x)}\sqrt{n}, \tag{9.3}$$

$$z_{кр,1} = \frac{x_{кр} - \bar{x}_1}{\sigma_{\bar{x}}} = \frac{x_{кр} - \bar{x}_1}{\sigma(x)}\sqrt{n}. \tag{9.4}$$

Для ситуации, представленной на рис. 9.2, то есть при $\bar{x}_0 > \bar{x}_1$, значения α и β можно определить как

$$\alpha = \int_{-\infty}^{x_{кр}} f(\bar{x} \mid H_0)dx = \int_{-\infty}^{z_{кр,0}} \varphi(z)dz = \Phi(z_{кр,0}) - \Phi(-\infty) = \frac{1}{2} + \Phi(z_{кр,0}), \tag{9.5}$$

$$\beta = \int_{x_{кр}}^{\infty} f(\bar{x} \mid H_1)dx = \int_{z_{кр,1}}^{\infty} \varphi(z)dz = \Phi(\infty) - \Phi(z_{кр,1}) = \frac{1}{2} - \Phi(z_{кр,1}). \tag{9.6}$$

При известных α и β уравнения (9.5) и (9.6) решают относительно $z_{кр,0}$ и $z_{кр,1}$.

Подставляя эти значения в (9.3), (9.4), получим систему из двух уравнений с двумя неизвестными n^* и $x_{кр}$

$$\begin{cases} z_{кр,0} = \dfrac{x_{кр} - \bar{x}_0}{\sigma(x)}\sqrt{n^*}, \\ z_{кр,1} = \dfrac{x_{кр} - \bar{x}_1}{\sigma(x)}\sqrt{n^*}. \end{cases} \tag{9.7}$$

Выполним n^* измерений x_i. Найдем среднее $\bar{x} = (\sum_{i=1}^{n^*} x_i)/n^*$ и сравним его с $x_{кр}$.

Выбор гипотезы определяется знаком разности $\bar{x}_1 - \bar{x}_0$. Для ситуации, представленной на рис. 9.2, решающее правило имеет вид

$$\bar{x} \geq x_{кр} \Rightarrow H_0 : \bar{x} = \bar{x}_0, \quad \bar{x} < x_{кр} \Rightarrow H_1 : \bar{x} = \bar{x}_1. \tag{9.8}$$

Рассмотрим пример. Среднее многолетнее количество осадков за весенний сезон в засушливом районе составляет $\bar{R}_0 = 70$ мм, $\sigma(R) = 60$ мм. Предполагаемое количество осадков в результате воздействия может достигать $\bar{R}_1 = 110$ мм. Сколько сезонов необходимо проводить эксперименты и каким должно быть при этом среднее значение осадков, чтобы с вероятностями ошибок $\alpha = 0{,}05$ и $\beta = 0{,}10$ сделать заключение об эффективности метода воздействия? Прежде чем ответить на поставленные вопросы, выполним ряд последовательных оценок.

1. Предположим, что после первого же сезона воздействий количество осадков на рабочей площадке составило $R_1 = 120$ мм. Является ли этот результат свидетельством успешности воздействия? Примем в качестве критического предполагаемое значение $\bar{R}_1 = R_{кр} = 110$ мм. Найдем безразмерные критические значения для обеих гипотез.

$$z_{кр,0} = \frac{\bar{R}_1 - \bar{R}_0}{\sigma(R)} = \frac{110 - 70}{60} = 0{,}67, \; z_{кр,1} = \frac{110 - 110}{60} = 0$$

Вычислим α и β: $\beta = \int_{-\infty}^{z_{кр,1}} \varphi(z)dz = \Phi(z_{кр,1}) - \Phi(-\infty) = \Phi(0) + \frac{1}{2} = 0{,}50$

$$\alpha = \int_{z_{кр,0}}^{\infty} \varphi(z)dz = \Phi(\infty) - \Phi(z_{кр,0}) = \frac{1}{2} - \Phi(0{,}67) = 0{,}5 - 0{,}25 = 0{,}25$$

Обе ошибки весьма велики. Они не дают оснований принять гипотезу эффективности воздействия. Конечно значение α может быть уменьшено, если принять в качестве критического измеренное значение R_1. Тогда

$$z_{кр,0} = \frac{120 - 70}{60} = 0{,}83, \text{ а } z_{кр,1} = \frac{120 - 110}{60} = 0{,}16.$$

Значение α окажется меньше.

$$\alpha = 0{,}5 - \Phi(0{,}83) = 0{,}20\text{, но } \beta = \Phi(0{,}16) + 0{,}5 = 0{,}06 + 0{,}50 = 0{,}56.$$

Имеющейся информации недостаточно для выбора гипотезы. Эксперимент должен быть продолжен.

2. Опыты продолжались в течение девяти сезонов. Получен следующий ряд значений R_i.

i	1	2	3	4	5	6	7	8	9
R_i	120	80	180	140	130	80	60	130	160

Среднее значение за эти сезоны составило $\overline{R} = 120$ мм. Неужели эти результаты не являются убедительным доказательством успешности воздействия? Если снова выбрать $R_{\text{кр}} = \overline{R}_1$, то $z_{\text{кр},0} = \dfrac{110-70}{60}\sqrt{9} = 2{,}0$. Отсюда $\alpha = \dfrac{1}{2} - \Phi(2{,}0) = 0{,}023$. Однако по-прежнему $z_{\text{кр},1} = \dfrac{110-110}{60}\sqrt{9} = 0$ и, следовательно, $\beta = 0{,}5$. Оценим каким будет $R_{\text{кр}}$ и β, если $\alpha = 0{,}05$. Из условия $0{,}05 = 0{,}5 - \Phi(z_{\text{кр},0})$ найдем $z_{\text{кр},0} = 1{,}64$. Соответствующее ему критическое значение $R_{\text{кр}}$ получим из уравнения $1{,}64 = \dfrac{R_{\text{кр}} - \overline{R}_0}{\sigma(R)}\sqrt{n} = \dfrac{R_{\text{кр}} - 70}{60}\sqrt{9}$. $R_{\text{кр}} = 102{,}8$.

Определим теперь $z_{\text{кр},1} = \dfrac{102{,}8-110}{60}\sqrt{9} = -0{,}36$ и $\beta = \dfrac{1}{2} + \Phi(-0{,}36) = 0{,}5 - 0{,}14 = 0{,}36$. При заданной ошибке первого рода $\alpha = 0{,}05$ ошибка второго рода остается все еще очень большой. Пока нет оснований принять альтернативную гипотезу об эффективности метода воздействия.

3. Ответим теперь на вопрос, сформулированный при постановке задачи. Если $\alpha = 0{,}05$, то, как уже показано, $z_{\text{кр},0} = 1{,}64$. Аналогично найдем, что при $\beta = 0{,}10$ $z_{\text{кр},1} = -1{,}28$. Таким образом, мы имеем систему из двух уравнений

$$\begin{cases} 1{,}64 = \dfrac{R_{\text{кр}} - 70}{60}\sqrt{n^*}, \\ -1{,}28 = \dfrac{R_{\text{кр}} - 110}{60}\sqrt{n^*}. \end{cases}$$

Решение ее дает $R_{\text{кр}} = 92$ мм, $n^* = 19$. Чтобы при $\alpha = 0{,}05$ и $\beta = 0{,}10$ сделать заключение об эффективности (или неэффективности) метода воздействий следует проводить эксперимент в течение 19 сезонов. Если среднее значение осадков за этот период превысит 92 мм, то гипотезу об увеличении осадков с 70 до 110 мм следует принять. Обратите внимание на то, что $\overline{R}$ при этом может быть существенно меньше $\overline{R}_1$.

9.3. Последовательный анализ

Простым и наглядным примером проверки гипотез с учетом ошибок первого и второго родов является метод последовательного анализа. Число испытаний n^*, необходимое для выбора одной из конкурирующих гипотез при заданных α и β, рассчитывается в предположении минимальных отличий среднего из n^* значений от $x_{кр}$. В реальных условиях исследуемый объект чаще всего «подыгрывает» экспериментатору, проявляя в силу физических закономерностей приближение к той или иной гипотезе. Если эксперимент является трудоемким, дорогостоищим, длительным, то любое сокращение числа испытаний становится желательным и даже необходимым. Концепция последовательного анализа заключается в том, что проверка гипотез осуществляется после каждого нового испытания. Утверждается, что такая стратегия позволяет существенно сократить число испытаний по сравнению с n^*.

Пусть P_0 и P_1 вероятности осуществления соответственно нулевой (H_0) и альтернативной (H_1) гипотез при единичном испытании. Отношение P_1 / P_0 называют *отношением правдоподобия.* С ростом числа испытаний n отношение правдоподобия $(P_1 / P_0)_n$ естественно изменяется. Численное значение $(P_1 / P_0)_n$ является характеристикой выбора H_0 или H_1. Если $P_1 < \beta$, а $P_0 > 1-\alpha$, то неравенство

$$\frac{P_1}{P_0} < \frac{\beta}{1-\alpha} \tag{9.9}$$

однозначно является условием принятия H_0. Аналогично неравенство

$$\frac{1-\beta}{\alpha} < \frac{P_1}{P_0} \tag{9.10}$$

служит основанием принятия H_1.

Условия (9.9), (9.10) распространяют и на отношение $(P_1 / P_0)_n$. Тогда двойное неравенство

$$\frac{\beta}{1-\alpha} \le (\frac{P_1}{P_0})_n \le \frac{1-\beta}{\alpha} \tag{9.11}$$

отражает условия неопределенности при принятии решения и свидетельствует о необходимости продолжения испытаний. Удобно использовать логарифмическое отношение правдоподобия, при котором соотношение неопределенности имеет вид

$$\ln\frac{\beta}{1-\alpha} \le \ln(\frac{P_1}{P_0})_n \le \ln\frac{1-\beta}{\alpha}. \tag{9.12}$$

Если распределение нормальное, то

$$f(x \mid H_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(x)} \cdot \exp\left[-\frac{(x-\bar{x}_0)^2}{2\sigma^2(x)}\right],$$

$$f(x \mid H_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(x)} \cdot \exp\left[-\frac{(x-\bar{x}_0)^2}{2\sigma^2(x)}\right].$$

Вероятности попадания случайной величины в малый интервал δx при условиях осуществления нулевой и альтернативной гипотез при единичном измерении соответственно составляют $P_0 = f(x \mid H_0)\delta x$ и $P_1 = f(x \mid H_1)\delta x$.

Вероятности совместных событий при n испытаниях перемножаются. Тогда

$$P_{1,n} = \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(x)} \cdot \exp\left[-\frac{(x_i-\bar{x}_1)^2}{2\sigma^2(x)}\right]\delta x =$$

$$\left(\frac{\delta x}{\sqrt{2\pi}\sigma(x)}\right)^n \cdot \exp\left[-\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x}_1)^2}{2\sigma^2(x)}\right]. \tag{9.13}$$

Аналогично

$$P_{0,n} = \left(\frac{\delta x}{\sqrt{2\pi}\sigma(x)}\right)^n \cdot \exp\left[-\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x}_0)^2}{2\sigma^2(x)}\right]. \tag{9.14}$$

Перейдем к логарифмическому отношению правдоподобия

$$\ln(\frac{P_1}{P_0})_n = \ln\frac{\exp\left[-\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x}_1)^2}{2\sigma^2(x)}\right]}{\exp\left[-\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x}_0)^2}{2\sigma^2(x)}\right]} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x}_0)^2 - \sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x}_1)^2}{2\sigma^2(x)} =$$

$$= \frac{\sum_{i=1}^{n}x_i^2 - 2\bar{x}_0\sum_{i=1}^{n}x_i + n\bar{x}_0^2 - \sum_{i=1}^{n}x_i^2 + 2\bar{x}_1\sum_{i=1}^{n}x_i - n\bar{x}_1^2}{2\sigma^2(x)} = \tag{9.15}$$

$$= \frac{2(\bar{x}_1-\bar{x}_0)\sum_{i=1}^{n}x_i - n(\bar{x}_1^2-\bar{x}_0^2)}{2\sigma^2(x)} = \frac{\bar{x}_1-\bar{x}_0}{\sigma^2(x)}(\sum_{i=1}^{n}x_i - \frac{n(\bar{x}_1+\bar{x}_0)}{2}).$$

Подставляя результат в (9.12), получим

$$\ln\frac{\beta}{1-\alpha} \le \frac{\bar{x}_1 - \bar{x}_0}{\sigma^2(x)}\left[\sum_{i=1}^{n} x_i - \frac{n(\bar{x}_1 + \bar{x}_0)}{2}\right] \le \ln\frac{1-\beta}{\alpha}. \qquad (9.16)$$

Дальнейшие преобразования определяются знаком разности $(\bar{x}_1 - \bar{x}_0)$. Если $(\bar{x}_1 - \bar{x}_0) > 0$, то условие продолжения экспериментов принимает вид

$$\frac{\sigma^2(x)}{\bar{x}_1 - \bar{x}_0}\ln\frac{\beta}{1-\alpha} + n\frac{\bar{x}_1 + \bar{x}_0}{2} \le \sum_{i=1}^{n} x_i \le \frac{\sigma^2(x)}{\bar{x}_1 - \bar{x}_0}\ln\frac{1-\beta}{\alpha} + n\frac{\bar{x}_1 + \bar{x}_0}{2} \qquad (9.17)$$

или

$$A_0 + bn \le \sum_{i=1}^{n} x_i \le A_1 + bn, \qquad (9.18)$$

где $A_0 = \frac{\sigma^2(x)}{\bar{x}_1 - \bar{x}_0}\ln\frac{\beta}{1-\alpha}$, $A_1 = \frac{\sigma^2(x)}{\bar{x}_1 - \bar{x}_0}\ln\frac{1-\beta}{\alpha}$, $b = \frac{\bar{x}_1 + \bar{x}_0}{2}$. При этом $A_0 < 0$, а $A_1 > 0$. В случае $(\bar{x}_1 - \bar{x}_0) < 0$ левая и правая части неравенства поменяются местами, изменятся и знаки A_0 и A_1.

$$A_1 + bn \le \sum_{i=1}^{n} x_i \le A_0 + bn \qquad (9.19)$$

Крайние члены неравенств (9.18) и (9.19) представляют собой уравнения прямых.

Для наглядности процедура анализа может быть приведена к построению простых графиков, где аргументом является число n, а функцией – сумма результатов измерений $\sum_{i=1}^{n} x_i$ (рис. 9.3). На графике через точки A_0 и A_1 проводятся параллельные прямые с тангенсом угла наклона к оси абсцисс, равным b. Коридор неопределенности между этими прямыми как раз и отражает условие необходимости продолжения испытаний. После каждого опыта на график наносится точка $(n, \sum_{i=1}^{n} x_i)$. Выход очередной точки за пределы коридора неопределенности свидетельствует о возможности принятия той гипотезы, в области осуществления которой оказалась эта точка. Следует помнить, что положение областей принятия H_0 и H_1 на графике зависит от знака разности $(\bar{x}_1 - \bar{x}_0)$. Общее правило сводится к следующему: если линия сумм пересекается с прямой $A_0 + bn$, то принимается H_0, если линия сумм пересекается с прямой $A_1 + bn$, то принимается H_1.

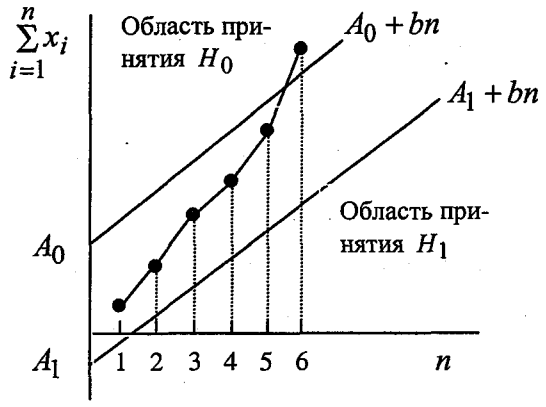


Рис. 9.3. Графическое представление процедуры выбора гипотез.

Для разных комбинаций наиболее распространенных сочетаний α и β значения $\ln\frac{\beta}{1-\alpha}$ и $\ln\frac{1-\beta}{\alpha}$ приведены в табл. 9.2.

Таблица 9.2.

α	β	$\ln\frac{\beta}{1-\alpha}$	$\ln\frac{1-\beta}{\alpha}$
0,05	0,05	-2,94	2,94
0,10	0,10	-2,19	2,19
0,05	0,10	-2,25	2,89
0,10	0,05	-2,89	2,25

Пример-упражнение.

Продолжим рассмотрение результатов экспериментов по увеличению осадков, представленных выше в разделе 9.2. Воспользуемся для оценки эффективности воздействия методом последовательного анализа. Выполним необходимые вычисления. При $\alpha = 0{,}05$, $\beta = 0{,}10$, $\overline{R}_1 - \overline{R}_0 = 40$ мм, $\sigma(R) = 60$ мм,

$A_0 = \frac{60^2}{40}(-2{,}25) = -202$ мм, $A_1 = \frac{60^2}{40}2{,}89 = 260$ мм, $b = (70+110)/2 = 90$ мм.

Последовательные суммы осадков $\sum_{i=1}^{n} R_i$:

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$\sum_{i=1}^{n} R_i$	120	200	380	520	650	730	790	920	1080	–

Далее читателю предлагается осуществить выбор гипотезы, используя графическую процедуру последовательного анализа, и сравнить результат с выводом, сделанным в пункте 9.2.

10. ДИСПЕРСИОННЫЙ АНАЛИЗ. ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПРИ ДИСПЕРСИОННОМ АНАЛИЗЕ

Пусть некоторая случайная величина x является характеристикой (или одной из характеристик) исследуемого сложного физического процесса. Изменчивость результатов отдельных измерений определяется влиянием многочисленных факторов. Действие одних факторов приводит к увеличению рассеяния результатов измерений относительно истинного значения x_0, влияние других носит закономерный характер, связанный с зависимостью x_0 от этих факторов. Выявление последних обычно и является целью эксперимента, особенно на его начальных стадиях. Для решения таких задач используются методы дисперсионного анализа. Суть их заключается в том, что неслучайное, то есть детерминированное влияние фактора Φ ($\Phi = A, B, C ...$) выражается в терминах случайности – дисперсией фактора σ_Φ^2. В известной мере σ_Φ^2 – характеристика искусственная. Введение ее удобно тем, что для оценки влияния факторов может быть далее использован аппарат сравнения дисперсий, рассмотренный в разделе 7.

Гипотезы формулируются следующим образом

$$H_0 : \sigma_\Phi^2 = 0 \text{ и } H_1 : \sigma_\Phi^2 > 0 . \qquad (10.1)$$

Нулевая гипотеза предполагает отсутствие влияния фактора Φ, альтернативная – значимость такого влияния.

10.1. Однофакторный дисперсионный анализ

Ранее (в разделе 7) уже рассматривался однофакторный дисперсионный анализ применительно к проверке гипотез о равенстве нескольких средних. Обсудим здесь более общую задачу.

1. Начнем с простейшей ситуации. Следует оценить влияние фактора A на исследуемую величину x. Пусть фактор A зафиксирован (задан или измерен) на m уровнях. Каждому уровню фактора A_j, $j = \overline{1,m}$, соответствует измеренное значение x_j. Пусть точность измерения x заранее известна, она определяется дисперсией воспроизводимости σ_0^2, с числом степеней свободы $f \to \infty$. Найдем выборочную дисперсию, характеризующую рассеяние значений x_j относительно среднего значения $\bar{x} = \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m} x_j$:

$$S^2 = \frac{1}{m-1}\sum_{j=1}^{m}(x_j - \bar{x})^2 . \qquad (10.2)$$

Дисперсия S^2 включает в себя влияние и случайности, и фактора A.

$$S^2 = \sigma_0^2 + \sigma_A^2 \qquad (10.3)$$

Если нулевая гипотеза выполняется, то $\sigma_A^2 = 0$, а дисперсии S^2 и σ_0^2 должны быть однородны. Для проверки гипотезы об однородности двух дисперсий используем критерий Фишера. Найдем $F = S^2/\sigma_0^2$ и сравним с $F_{1-\alpha,f_1,f_2}$, где $f_1 = f_{S^2} = m-1$, а $f_2 = f_{\sigma_0^2} = \infty$ (по определению). Решающее правило

$$F \le F_{1-\alpha,f_1,f_2} \Rightarrow H_0, \quad F > F_{1-\alpha,f_1,f_2} \Rightarrow H_1. \qquad (10.4)$$

Проиллюстрируем применение метода на простом примере.

Пример

Исследуется зависимость электрического сопротивления электролита R от температуры t.. Поскольку с повышением температуры степень диссоциации молекул соли в электролите увеличивается, ожидалось, что сопротивление будет уменьшаться. Однако результаты измерений оказались следующими.

t °C	10	20	30	40	50	60
R ,Ом	0,16	0,19	0,18	0,20	0,21	0,23

Оценим наличие зависимости $R = R(t)$ при уровне значимости $\alpha = 0{,}05$, если точность метода, выраженная через СКО, составляет $\sigma_0 = 0{,}02$ Ом.

Прежде чем обратиться к расчетам, автор рекомендует по приведенным данным построить для себя график $R = R(t)$. Не правда ли, полученная зависимость кажется вполне убедительной. Теперь отложите от каждой точки вверх и вниз отрезки, равные доверительным границам погрешности результата отдельного измерения $\varepsilon(R) = z_{1-0,05/2}\cdot\sigma_0 = 1{,}96\cdot 0{,}02 \approx 0{,}04$ Ом. Столь ли убедительной представляется вам эта зависимость теперь?

Сделаем необходимые вычисления: $\bar{R} = 0{,}195$ Ом, $m = 6$, $S^2 = 0{,}0006$ (Ом)^2, $f_{S^2} = 5$, $\sigma_0^2 = 0{,}0004$ (Ом)^2, $f_{\sigma_0^2} = \infty$. Отношение Фишера $F = 0{,}0006/0{,}0004 = 1{,}5$. Критическое (табличное) значение $F_{1-0,05;5;\infty} = 2{,}2$. Поскольку $F < F_{1-\alpha,f_1,f_2}$, принимается нулевая гипотеза: влияние температуры на сопротивление электролита незначимо.

Заметьте, что при решении задачи мы никак не использовали приведенные значения температуры. Это не означает, однако, что диапазон изменения температуры не играет

роли. Чем шире интервал изменения фактора, тем больше возможные изменения исследуемой величины и тем больше S^2.

2. Обратимся к более сложной задаче, когда σ_0^2 заранее неизвестна. Для оценки дисперсии воспроизводимости необходимы повторные измерения на одном из уровней фактора A или – для получения более надежных выводов – на всех A_j.. В случае равного числа l повторных измерений на каждом уровне план эксперимента может быть представлен табл. 10.1.

Таблица 10.1

i	Уровни фактора A				Суммы по строкам
	A_1	A_2	..... A_j	A_m	
1	x_{11}	x_{21}	x_{j1}	x_{m1}	X_1'
2	x_{12}	x_{22}	x_{j2}	x_{m2}	X_2'
...					
i	x_{1i}	x_{2i}	x_{ji}	x_{mi}	X_i'
...					
l	x_{1l}	x_{2l}	x_{jl}	x_{ml}	X_l'
Суммы по столбцам	X_1	X_2	X_j	X_m	
Средние по столбцам	$\bar{x}_1$	$\bar{x}_2$	$\bar{x}_j$	$\bar{x}_m$	

Здесь A_j – уровень фактора A, $j=\overline{1,m}$, x_{ji} – результат измерения на j-ом уровне в j-ом опыте, $i=\overline{1,l}$.

Для определения S_0^2 как оценки σ_0^2, найдем сначала рассеяние относительно средних в каждом столбце (на каждом уровне A_j):

$$S_j^2=\frac{1}{l-1}\sum_{i=1}^{l}(x_{ji}-\bar{x}_j)^2, \tag{10.5}$$

а затем осредним их по всем столбцам:

$$S_0^2=\frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m}S_j^2 . \tag{10.6}$$

Используем то обстоятельство, что во всех столбцах число измерений одинаково. Тогда, несколько отступая от методики, принятой ранее в разделе 7, общую дисперсию, включающую в себя влияния случайности и фактора, найдем как

$$S^2 = \frac{1}{m-1}\sum_{j=1}^{m}(\bar{x}_j - \bar{x})^2 . \qquad (10.7)$$

Здесь $\bar{x}_j = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l} x_{ji}$ или, с учетом представленных в табл. 10.1 сумм по столбцам, $\bar{x}_j = X_j / l$, а

$$\bar{x} = \frac{1}{ml}\sum_{j=1}^{m}\sum_{i=1}^{l} x_{ji} = \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m} X_j = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l} X_i' \ . \qquad (10.8)$$

При записи общей дисперсии в виде (10.7) дисперсию воспроизводимости следует отнести к $\bar{x}_j$. Тогда

$$S^2 = S_0^2 / l + \sigma_A^2 \qquad (10.9)$$

или, обозначая $lS^2 = S_A^2$,

$$S_A^2 = S_0^2 + l\sigma_A^2 . \qquad (10.10)$$

Выражение (10.10) аналогично по форме и содержанию выражению (10.3). Если влияние фактора незначимо, то $l\sigma_A^2 = 0$ и следовательно дисперсии S_A^2 и S_0^2 должны быть однородны. Снова найдем отношение Фишера $F = S_A^2 / S_0^2$ и сравним его с $F_{1-\alpha,f_1,f_2}$. Числа степеней свободы $f_1 = f_{S_A^2} = m-1$, $f_2 = f_{S_0^2} = m(l-1)$. Решающее правило (10.4) сохраняется.

В зависимости от принятой гипотезы производится дальнейшее уточнение дисперсий. Если принимается нулевая гипотеза, то дисперсия воспроизводимости рассчитывается по формуле

$$S^{*2}_0 = \frac{1}{ml-1}\sum_{j=1}^{m}\sum_{i=1}^{l}(x_{ji} - \bar{x})^2 . \qquad (10.11)$$

Если принимается альтернативная гипотеза, численное значение дисперсии фактора

$$\sigma_A^2 = \frac{1}{m-1}\sum_{j=1}^{m}(\bar{x}_j - \bar{x})^2 - \frac{S_0^2}{l} \qquad (10.12)$$

можно использовать в качестве меры влияния фактора на исследуемую величину x.

3. Рассмотрим ситуацию, когда число измерений на уровнях фактора (в столбцах табл. 10.1) неодинаково: $l_j \neq const$. Можно показать, что при этом

$$S_A^2 = \frac{1}{m-1}\sum_{j=1}^{m} l_j (x_{ji} - \bar{x}_j)^2. \qquad (10.13)$$

Тогда при принятии альтернативной гипотезы дисперсия фактора определяется формулой

$$\sigma_A^2 = \frac{(m-1)}{n - \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{m} l_j^2}\left(S_A^2 - S_0^2\right), \qquad (10.14)$$

где $n = \sum_{j=1}^{m} l_j$..

Вычисления упрощаются, если воспользоваться следующим набором формул:

$$Q_1 = \sum_{j=1}^{m}\sum_{i=1}^{l_j} X_{ij}\,,\ n = \sum_{j=1}^{m} l_j\,,$$

$$Q_2 = \sum_{j=1}^{m}\left(X_j^2 / l_j\right),\ Q_3 = \frac{1}{n}\left(\sum_{j=1}^{m} X_j\right)^2,$$

$$S_0^2 = \frac{Q_1 - Q_2}{n-m},\ f_{S_0^2} = n-m\,,$$

$$S_A^2 = \frac{Q_2 - Q_3}{m-1},\ f_{S_A^2} = m-1.$$

10.2. Двухфакторный дисперсионный анализ

Обратимся сразу к задаче, когда дисперсия воспроизводимости σ_0^2 неизвестна. Если целью эксперимента является выявление детерминированной зависимости x от двух факторов A и B,, то традиционный подход требует проведения повторных экспериментов при всех возможных сочетаниях уровней факторов. Если фактор A задается на уровне A_j, $j = \overline{1,m}$, а фактор B – на уровнях B_i, $i = \overline{1,l}$ и при каждом сочетании уровней проводится одинаковое число опытов n_{ji}, то общее число опытов $n = m \cdot l \cdot n_{ji}$ оказывается неминуемо очень большим. Напомним, что при однофакторном дисперсионном анализе, чтобы найти S_0^2, на каждом уровне фактора A пришлось проводить повторные измере-

ния. Нельзя ли использовать эти повторные опыты одновременно и для оценки влияния фактора B? Утвердительный ответ на этот вопрос позволяет дать эксперимент, реализующий план, представленный в табл. 10.2.

Покажем как, имея набор значений x_{ji}, содержащихся в табл. 10.2, можно оценить не только дисперсии факторов σ_A^2 и σ_B^2, но и дисперсию воспроизводимости S_0^2. Воспользуемся тем обстоятельством, что влияние фактора B усредняется по столбцам и от столбца к столбцу не изменяется. Отклонения средних по столбцам $\bar{x}_j = (\sum_{i=1}^{l} x_{ji})/l$ от общего среднего $\bar{x} = \frac{1}{ml} \sum_{j=1}^{m} \sum_{i=1}^{l} x_{ji}$ определяются действием случайности и фактора A. Таким образом, если найти

$$S^2 = \frac{1}{m-1} \sum_{j=1}^{m} (\bar{x}_j - \bar{x})^2, \tag{10.15}$$

то, как и в разделе 10.1, можно записать

$$S_A^2 = lS^2 = S_0^2 + l\sigma_A^2. \tag{10.16}$$

Таблица 10.2

Уровни Фактора B	Уровни фактора A				Суммы по строкам	Средние по строкам
	A_1	A_2	A_j	A_m		
B_1	x_{11}	x_{21}	x_{j1}	x_{m1}	X_1'	$\bar{x}_1'$
B_2	x_{12}	x_{22}	x_{j2}	x_{m2}	X_2'	$\bar{x}_2'$
...						
B_i	x_{1i}	x_{2i}	x_{ji}	x_{mi}	X_i'	$\bar{x}_i'$
...						
B_l	x_{1l}	x_{2l}	x_{jl}	x_{ml}	X_l'	$\bar{x}_l'$
Сумма по столбцам	X_1	X_2	X_j	X_m		
Средние по столбцам	$\bar{x}_1$	$\bar{x}_2$	$\bar{x}_j$	$\bar{x}_m$		

Подобным же образом рассеяние средних по строкам определяется влиянием случайности и фактора B. Если $\bar{x}_i = (\sum_{j=1}^{m} x_{ji})/m$, то

$$S'^2 = \frac{1}{l-1}\sum_{i=1}^{l}(\bar{x}_i - \bar{x})^2, \tag{10.17}$$

$$S'^2 = \frac{S_0^2}{m} + \sigma_B^2. \tag{10.18}$$

Вводя обозначение $S_B^2 = mS'^2$, перепишем (10.18)

$$S_B^2 = S_0^2 + m\sigma_B^2. \tag{10.19}$$

Неопределенной в выражениях (10.16), (10.19) остается дисперсия воспроизводимости S_0^2. Для нахождения ее обратимся снова к столбцам табл. 10.2. Вычислим дисперсии

$$S_j^2 = \frac{1}{l-1}\sum_{i=1}^{l}(x_{ji} - \bar{x}_j)^2 \tag{10.20}$$

и определим их по всем столбцам

$$S_{\langle j\rangle}^2 = \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m} S_j^2 = \frac{1}{m(l-1)}\sum_{j=1}^{m}\sum_{i=1}^{l}(x_{ji} - \bar{x}_j)^2. \tag{10.21}$$

Дисперсия $S_{\langle j\rangle}^2$ очевидным образом включает в себя и дисперсию воспроизводимости (случайность значений x_{ji}) и влияние фактора B

$$S_{\langle j\rangle}^2 = S_0^2 + \sigma_B^2. \tag{10.22}$$

Совместное решение (10.18) и (10.22) дает

$$S_0^2\left(1 - \frac{1}{m}\right) = S_{\langle j\rangle}^2 - S'^2 \tag{10.23}$$

или, с учетом (10.17) и (10.21)

$$\begin{aligned} S_0^2 &= \frac{m}{m-1}\left[\frac{1}{m}\cdot\frac{1}{l-1}\sum_{j=1}^{m}\sum_{i=1}^{l}\left(X_{ji} - \bar{X}_j\right)^2 - \frac{1}{l-1}\sum_{i=1}^{l}\left(\bar{X}_i' - \bar{X}\right)^2\right] = \\ &= \frac{1}{(m-1)(l-1)}\left[\sum_{j=1}^{m}\sum_{i=1}^{l}\left(X_{ji} - \bar{X}_j\right)^2 - m\sum_{i=1}^{l}\left(\bar{X}_i' - \bar{X}\right)^2\right]. \end{aligned} \tag{10.24}$$

Из условия выполнения нулевых гипотез $\sigma_A^2 = 0$, $\sigma_B^2 = 0$ следует однородность пар дисперсий S_A^2, S_0^2 и S_B^2, S_0^2. Проверка дисперсий на однородность как и выше осуществляется по критерию Фишера. Отношение $F_A = S_A^2 / S_0^2$ сравнивается с критическим значением $F_{1-\alpha, f_{S_A^2}, f_{S_0^2}}$, а отношение $F_B = S_B^2 / S_0^2$ с $F_{1-\alpha, f_{S_B^2}, f_{S_0^2}}$, где $f_{S_A^2} = m-1$, $f_{S_B^2} = l-1$. Если принимаются обе нулевые гипотезы $\sigma_A^2 = 0$, $\sigma_B^2 = 0$, то общая дисперсия воспроизводимости S^{*2}_0 рассчитывается, как и ранее, по формуле (10.11). Если принимаются альтернативные гипотезы, то σ_A^2 и σ_B^2 можно оценить по формулам, вытекающим из (10.16) и (10.19).

$$\sigma_A^2 = \frac{S_A^2 - S_0^2}{l}, \tag{10.25}$$

$$\sigma_B^2 = \frac{S_B^2 - S_0^2}{m}. \tag{10.26}$$

Сравнивая между собой значения σ_A^2 и σ_B^2, можно оценить силу влияния каждого из факторов.

Примечание

Часто изменение исследуемой величины определяется не только, а может быть и не столько влиянием факторов, сколько их взаимодействием. Оно выражается дисперсией взаимодействия σ_{AB}^2. План эксперимента, представленный табл. 10.2, не позволяет определить σ_{AB}^2. Для этого необходимы повторные опыты при разных сочетаниях A_j и B_i.

Приведем в заключение сводку рабочих формул для двухфакторного дисперсионного анализа.

$$Q_1 = \sum_{j=1}^{m}\sum_{i=1}^{l} x_{ji}, \; Q_2 = \frac{1}{l}\sum_{j=1}^{m} X_j^2, \; Q_3 = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{l} X_i'^2, \; Q_4 = \frac{1}{ml}\left(\sum_{j=1}^{m} X_j\right)^2 = \frac{1}{ml}\left(\sum_{i=1}^{l} X_i'\right)^2,$$

$$S_A^2 = \frac{Q_2 - Q_4}{m-1}, \; S_B^2 = \frac{Q_3 - Q_4}{l-1}, \; S_0^2 = \frac{Q_1 + Q_4 - Q_2 - Q_3}{(m-1)(l-1)}.$$

Знаменатели в выражениях для S_A^2, S_B^2 и S_0^2 отражают число степеней свободы этих дисперсий.

10.3. Многофакторный дисперсионный анализ

Концепция многофакторного дисперсионного анализа заключается в том, что при исследовании влияния различных факторов на физическую величину x одновременно (и согласованно) изменяются уровни всех факторов. Это обстоятельство позволяет резко сократить число опытов (измерений), не жертвуя надежностью выводов. Задача заключается лишь в том, чтобы правильно составить план соответствующего эксперимента.

Ограничимся здесь только иллюстрацией принципа, возможностей и достоинств многофакторного эксперимента при дисперсионном анализе.

Пусть факторы A и B задаются на четырех уровнях каждый: $A_j, j=\overline{1,m}$, $B_i, i=\overline{1,l}$, $m=l=4$. Тогда план полного двухфакторного эксперимента $n=m\cdot l=m^2$, приведенный в табл. 10. 3, представляет собой частный случай табл. 10.2.

Таблица 10.3.

	A_1	A_2	A_3	A_4
B_1	x_{11}	x_{21}	x_{31}	x_{41}
B_2	x_{12}	x_{22}	x_{32}	x_{42}
B_3	x_{13}	x_{23}	x_{33}	x_{43}
B_4	x_{14}	x_{24}	x_{34}	x_{44}

Как было показано выше (раздел 10.2), при реализации такого плана можно рассчитать дисперсии S_A^2, S_B^2, S_0^2. Однако возможности плана этим не исчерпываются.

10.3.1. Латинские квадраты

Оказывается не увеличивая числа опытов можно исследовать влияние еще одного фактора C, задаваемого также на уровнях C_ν, $\nu=\overline{1,4}$. Обозначим их латинскими буквами $C_1=a,\ C_2=b,\ C_3=c,\ C_4=d$.

Задача заключается в том, чтобы уровни фактора C распределить равномерно по всему плану. Это условие выполняется, если один и тот же уровень фактора C встречается только один раз в каждой строке и каждом столбце табл. 10.3. Опуская обозначения уровней A и B, представим план в виде квадрата. Такие квадраты получили название *латинских (или квадраты первого порядка)*.

Латинский квадрат4х4

a	b	c	d
b	a	d	c
c	d	a	b
d	c	b	a

Здесь на пересечении уровней факторов A_j и B_i указаны уровни фактора C_ν.. Сами значения $x_{ji\nu}$, полученные при заданном сочетании уровней факторов не показаны. Используя их, можно найти S_A^2, S_B^2 S_C^2 и S_0^2. Далее по критерию Фишера проверяется значимость влияния трех факторов.

Введем четвертый фактор D с уровнями D_μ, $\mu = \overline{1,4}$ и обозначим буквами греческого алфавита: $D_1 = \alpha$, $D_2 = \beta$, $D_3 = \gamma$, $D_4 = \delta$. Разместим уровни фактора D таким образом, чтобы, как и в предыдущем (латинском) квадрате, они не повторялись в строках и столбцах, но потребуем дополнительно, чтобы одинаковые сочетания уровней C и D не встречались во всем квадрате более одного раза. Последнее требование определяет условие ортогональности квадратов. Наложив такие квадраты друг на друга, получим греко-латинский квадрат (*квадрат второго порядка*)

Греко-латинский квадрат 4х4

$a\alpha$	$b\beta$	$c\gamma$	$d\delta$
$b\gamma$	$a\delta$	$d\alpha$	$c\beta$
$c\delta$	$d\gamma$	$a\beta$	$b\alpha$
$d\beta$	$c\alpha$	$b\delta$	$a\gamma$

Показано, что, реализуя такой план, можно найти $S_A^2, S_B^2, S_C^2, S_D^2$ и S_0^2 и проверить значимость влияния четырех факторов. Проведение опытов по схеме однофакторного эксперимента потребовало бы выполнения $n = m^k = 4^4 = 256$ экспериментов (k-число факторов).

Введем еще один фактор F с уровнями: 1, 2, 3, 4 и построим еще один латинский квадрат, ортогональный двум предыдущим. Совместив его с греко-латинским, получим *гипер-греко-латинский квадрат (квадрат третьего порядка)*

Гипер-греко-латинский квадрат 4х4.

$a\alpha 1$	$b\beta 4$	$c\gamma 3$	$d\delta 2$
$b\gamma 2$	$a\delta 3$	$d\alpha 4$	$c\beta 1$
$c\delta 4$	$d\gamma 1$	$a\beta 2$	$b\alpha 3$
$d\beta 3$	$c\alpha 2$	$b\delta 1$	$a\gamma 4$

Реализация плана в виде гипер-греко-латинского квадрата позволяет найти $S_A^2, S_B^2, S_C^2, S_D^2$ и S_F^2, но оценить значимость влияния пяти факторов уже не удается, поскольку число степеней свободы дисперсии воспроизводимости $f_{S_0^2} = 0$. Правда дисперсии факторов можно сравнить между собой, ранжируя роли каждого из факторов.

Общее представление об изменении числа степеней свободы при увеличении количества факторов дает следующая таблица

Число факторов k	Число степеней свободы дисперсий	
	Фактора $f_{S_\Phi^2}$	Воспроизводимости $f_{S_0^2}$
1	$m-1$	$m(m-1)$
2	$m-1$	$(m-1)(m-1)$
3	$m-1$	$(m-2)(m-1)$
4	$m-1$	$(m-3)(m-1)$
...	...	...
k	$m-1$	$(m+1-k)(m-1)$

Максимальное число факторов, влияние которых можно оценить, реализуя план $n = m^2$, равно числу уровней $k = m$. С увеличением числа факторов следует увеличивать m. Составление ортогональных квадратов различной размерности может быть весьма сложным делом. В литературе приводятся таблицы квадратов.

Типичным примером неразрешимой задачи построения греко-латинского квадрата 6×6 является популярная когда-то головоломка, известная под названием задачи Эйлера (предложите ее вашим знакомым).

Задача Эйлера

Построить в каре 6х6 36 офицеров – по шесть офицеров разного звания из шести разных полков таким образом, чтобы в каждом ряду было только по одному офицеру из каждого полка и только по одному офицеру одинакового звания.

Если число факторов $k,$, то $k-1$ ортогональных латинских квадратов образуют полную систему. Когда $m=p$ или $m=p^2$, где p – простое число, то полную систему квадратов можно построить на основании полей вычетов Галуа по модулю m. Например, для $m=5$ таблицы сложения и умножения имеют вид

Сложение	Умножение
0 1 2 3 4	1 2 3 4
1 2 3 4 0	2 4 1 3
2 3 4 0 1	3 1 4 2
3 4 0 1 2	4 3 2 1
4 0 1 2 3	

Таблица сложения является первым квадратом. Чтобы получить другие, ортогональные ему квадраты, следует умножить элементы первого столбца последовательно на 2, 3, 4 (до $m-1$). Столбец – результат каждого умножения складывают с элементами первой строки.

2 квадрат		3 квадрат		4 квадрат	
$0\cdot2=0$	0 1 2 3 4	$0\cdot3=0$	0 1 2 3 4	$0\cdot4=0$	0 1 2 3 4
$1\cdot2=2$	2 3 4 0 1	$1\cdot3=3$	3 4 0 1 2	$1\cdot4=4$	4 0 1 2 3
$2\cdot2=4$	4 0 1 2 3	$2\cdot3=1$	1 2 3 4 0	$2\cdot4=3$	3 4 0 1 2
$3\cdot2=1$	1 2 3 4 0	$3\cdot3=4$	4 0 1 2 3	$3\cdot4=2$	2 3 4 0 1
$4\cdot2=3$	3 4 0 1 2	$4\cdot3=2$	2 3 4 0 1	$4\cdot4=1$	1 2 3 4 0

Легко убедиться, что все четыре квадрата взаимно ортогональны. Их наложение дает квадрат четвертого порядка.

Задача. Постройте гипер-греко-латинский квадрат 7x7.

10.3.2. Латинские кубы

В латинских квадратах два фактора являются основными (в нашем рассмотрении факторы A и B), остальные составляют так называемые элиминирующие группировки.

Они накладываются на план полного факторного эксперимента (ПФЭ) $n=m^2$ для двух факторов. Общая формула для ПФЭ $n=m^k$.

Если построить ПФЭ для $k=3,\quad n=m^3$, то такой план графически будет представлять собой куб, разрезанный плоскостями, параллельными осям-факторам таким образом, что на каждой плоскости содержится m^2 узлов-сочетаний трех основных факторов. Подобно латинским квадратам в этих узлах размещают уровни дополнительных элиминирующих факторов. Два ортогональных латинских куба дают греко-латинский куб, три – гипер-греко-латинский и т.д. Максимальное число исследуемых факторов определяется числом $k=m^2+m-2$.

Кубические планы особенно эффективны на начальной стадии исследования для отбора наиболее значимых факторов.

11. КОРРЕЛЯЦИЯ МЕЖДУ СЛУЧАЙНЫМИ ВЕЛИЧИНАМИ

Будем исследовать связь между некоторой физической величиной y и одной или несколькими влияющими величинами (факторами) x_j, $j=\overline{1,k}$. Различают два вида таких связей. Если зависимость $y=y(x_j,\ j=\overline{1,k})$ является однозначной, то есть если любому значению x (при $k=1$) или любому набору значений x_j $(k>1)$ соответствуют вполне определенные значения y, то такая связь называется *функциональной.* Связь может быть функциональной и в том случае, когда y не зависит от x_j, но и y, и x_j зависят от одних и тех же факторов z_ν, $\nu=\overline{1,l}$. Функциональные зависимости являются обычно предметом теоретического изучения. При экспериментальных исследованиях, вследствие неизбежных погрешностей измерения y, неточности задания значений x_j и влияния большого числа неконтролируемых факторов чаще встречается другой вид связи. Ее называют *стохастической*, то есть *вероятностной* (иногда просто *статистической*), включая в это название тот смысл, что с изменением влияющих факторов изменяется функция распределения величины y.

Изменение функции распределения может быть выражено через изменение ее параметров: $\bar{y}_u, S(y_u)$ и др. Здесь $\bar{y}_u$, $u=\overline{1,m}$ – значения $\bar{y}$, полученные при разных уровнях фактора $\bar{x}_{ju}$. Стохастическая связь между $\bar{y}_u$ и $\bar{x}_{ju}$ называется *корреляционной.* Мерой силы или тесноты такой связи служит *коэффициент корреляции.*

11.1. Корреляция между двумя величинами

11.1.1. Парный коэффициент корреляции

Ограничимся сначала рассмотрением зависимости y от единственного фактора x. Пусть при каждом значении x_i, $i=\overline{1,n}$, найдено соответствующее ему значение y_i. Таким образом мы имеем n пар значений x и y. В качестве наиболее распространенной характеристики совместного распределения двух случайных величин используют корреляционный (ковариационный) момент, который для генеральной совокупности представляется в виде

$$R_{0,yx} = M\{(x - x_0)(y - y_0)\}, \tag{11.1}$$

где M – знак математического ожидания. При ограниченной выборке ($n \neq \infty$) вычисляют выборочный корреляционный момент.

$$R_{yx} = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) \tag{11.2}$$

Недостатки выражений (11.1), (11.2) связаны с тем обстоятельством, что величины $R_{0,yx}$ и R_{yx} оказываются размерными, а их численные значения изменяются от $-\infty$ до $+\infty$. Более удобными для практических целей являются нормированные безразмерные величины – коэффициенты корреляции генеральной совокупности

$$\rho_{yx} = \frac{M\{(x - x_0)(y - y_0)\}}{\sigma(x)\sigma(y)} \tag{11.3}$$

и выборочный

$$r_{yx} = \frac{\dfrac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{S(x)S(y)}. \tag{11.4}$$

При использовании вычислительной техники формулу (11.4) удобнее преобразовать в виде

$$r_{yx} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \dfrac{\sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i}{n}}{\sqrt{\left[\sum_{i=1}^{n} y_i^2 - \dfrac{\left(\sum_{i=1}^{n} y_i\right)^2}{n}\right]\left[\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \dfrac{\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}{n}\right]}}. \tag{11.4а}$$

Упражнение: Выполните переход от (11.4) к (11.4а).

Расчет по формулам (11.4) и (11.4а) не вызывает серьезных затруднений. Впрочем полезно запомнить следующее правило. *Коэффициент корреляции не изменится, если каждое значение x_i и/или y_i уменьшить (увеличить) и/или умножить (разделить) на произвольные числа, переходя к преобразованным переменным $\tilde{x}_i$ и $\tilde{y}_i$.* Например, $\tilde{x}_i = (x_i - a)/c$ и $\tilde{y}_i = (y_i - b)d$.

Значения r_{yx} (и, разумеется, ρ_{yx}) изменяются от –1 до +1. При крайних значениях $r_{yx} = -1,+1$ y и x связаны линейной функциональной зависимостью. Если $r_{yx} = 0$, то связь между переменными отсутствует. Когда $0 < |r_{yx}| < 1$, связь между y и x является стохастической. Такая связь включает в себя функциональную составляющую, которая в большей или меньшей мере замаскирована влиянием случайных факторов. Соотношение между функциональной и случайной составляющими как раз и отражает коэффициент корреляции.

Выборочный коэффициент корреляции в силу ограниченности и случайности рядов измерений представляет собой случайную величину. Важнейшим этапом анализа корреляции является проверка выборочного коэффициента на значимость. Гипотезы формулируются следующим образом:

$$H_0 : \rho_{yx} = 0, \quad H_1 : \rho_{yx} \neq 0. \tag{11.5}$$

Каким бы ни было значение выборочного коэффициента r_{yx}, в случае принятия H_0 следует считать $r_{yx} = 0$. Если принимается H_1, то значение выборочного коэффициента считается оценкой генерального коэффициента корреляции: $r_{yx} = \hat{\rho}_{yx}$.

Плотность вероятности распределения $f(r)$ зависит от объема выборки и значения ρ (индексы при r и ρ опускаем) довольно сложным образом – рис. 11.1а. Утверждается однако, что для сравнительно длинных рядов измерений при $n \geq 100$ $f(r)$ приближается к нормальному распределению. Тогда доверительные границы для истинного значения ρ можно выразить обычным способом.

$$P\{r - \varepsilon_r \leq \rho \leq r + \varepsilon_r\} = 1 - \alpha \tag{11.6}$$

Здесь ε_r – доверительные границы для ρ, которые определяются как

$$\varepsilon_r = z_{1-\alpha/2}\sigma(r), \tag{11.7}$$

где $z_{1-\alpha/2}$ – квантиль нормального распределения и

$$\sigma(r) = \frac{1-\rho^2}{\sqrt{n}}. \tag{11.8}$$

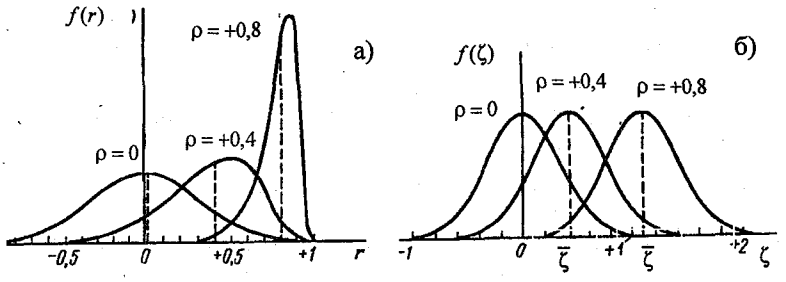


Рис. 11.1. Плотности распределений выборочного коэффициента корреляции (а) и параметра ζ (б).

Выражения (11.6), (11.7) и (11.8) позволяют решить две различные задачи: оценить значимость коэффициента корреляции r и в случае принятия H_1 определить доверительный интервал для истинного значения ρ. В технической литературе обычно приводятся путаные решения обеих задач сразу. Рассмотрим их по отдельности. Чтобы оценить значимость выборочного коэффициента корреляции, достаточно проверить попадает ли r в область допустимых значений для нулевой гипотезы. Для этого следует определить критическое значение $r_{кр}$ перехода от H_0 и H_1. При $\rho = 0$ получим $r_{кр} = \varepsilon_r = z_{1-\alpha/2}/\sqrt{n}$.

Обозначим $r_{кр} = r_{1-\alpha/2,f}$, где f – число степеней свободы, $f = n-2$. Теперь неравенство в левой части (11.6) легко трансформируется в решающее правило

$$|r| \le r_{1-\alpha/2,f} \Rightarrow H_0,\ |r| > r_{1-\alpha/2,f} \Rightarrow H_1. \tag{11.9}$$

Для решения второй задачи в формуле (11.8) вместо неизвестного значения ρ подставим его выборочную оценку r. При этом

$$\varepsilon_r = z_{1-\alpha/2}\left(1-r^2\right)/\sqrt{n} \tag{11.10}$$

и вместо (11.6) получим

$$P\left\{r - z_{1-\alpha/2}\left(1-r^2\right)/\sqrt{n} \le \rho \le r + z_{1-\alpha/2}\left(1-r^2\right)/\sqrt{n}\right\} = 1-\alpha. \tag{11.11}$$

В случае малых выборок задача становится сложнее. При этом применяется один из следующих вариантов решения.

1. Преобразование переменной. Используется преобразование Фишера для перехода от коэффициента корреляции r к новой переменной ζ в виде

$$r = th\zeta = \frac{e^{2\zeta} - 1}{e^{2\zeta} + 1}. \tag{11.12}$$

Решая (11.12) относительно ζ, получим

$$\zeta = \frac{1}{2}\ln\frac{1+r}{1-r}. \tag{11.13}$$

Фишер показал, что случайная величина ζ имеет почти нормальное распределение (рис. 11.1б), СКО такого распределения $\sigma(\zeta) = 1/\sqrt{n-3}$. Доверительные границы для истинного значения ζ_0 определяются соотношениями, подобными (11.6) и (11.7)

$$P\{\zeta - \varepsilon_\zeta \le \zeta_0 \le \zeta + \varepsilon_\zeta\} = 1 - \alpha, \tag{11.14а}$$

$$\varepsilon_\zeta = z_{1-\alpha/2}/\sqrt{n-3}. \tag{11.14б}$$

Выражения (11.14) снова можно использовать как при оценке значимости выборочных коэффициентов корреляции, так и при нахождении доверительных интервалов для ρ.

Для оценки значимости выборочного коэффициента корреляции полагаем $\rho = 0$, и тогда $\zeta_0 = \frac{1}{2}\ln\frac{1+\rho}{1-\rho} = 0$. Решающее правило проверки гипотез приобретает вид:

$$|\zeta| \le z_{1-\alpha/2}/\sqrt{n-3} \Rightarrow H_0, \tag{11.15а}$$

$$|\zeta| > z_{1-\alpha/2}/\sqrt{n-3} \Rightarrow H_1. \tag{11.15б}$$

Критическое значение $\zeta_{кр} = z_{1-\alpha/2}/\sqrt{n-3}$ определим как условие перехода от H_0 к H_1. Подставив его в выражение (11.12), получим критическое значение $r_{кр} \equiv r_{1-\alpha/2,n}$.

$$r_{1-\alpha/2,n} = \frac{\exp\left(\dfrac{2z_{1-\alpha/2}}{\sqrt{n-3}}\right) - 1}{\exp\left(\dfrac{2z_{1-\alpha/2}}{\sqrt{n-3}}\right) + 1} \tag{11.16}$$

Далее снова используем решающее правило (11.9).

Чтобы найти доверительные границы для истинного значения ρ, нужно по выборочному r вычислить $\overline{\zeta}$ и определить нижнюю и верхнюю границы доверительного интервала для ζ_0 (здесь $\zeta_0 \ne 0$) как $\zeta_н = \overline{\zeta} - z_{1-\alpha/2}/\sqrt{n-3}$ и $\zeta_в = \overline{\zeta} + z_{1-\alpha/2}/\sqrt{n-3}$. Затем, подставляя $\zeta_н$ и $\zeta_в$ в выражение (11.12), найдем границы доверительного интервала для ρ.

2. Использование t-распределения. Распределение коэффициента корреляции $f(r)$ при $\rho = 0$ трансформируется в распределение Стьюдента $f(t)$ введением переменной t

$$t = |r|\sqrt{n-2}\,/\sqrt{1-r^2}. \tag{11.17}$$

Процедура проверки гипотез сводится к сравнению выборочного значения t с критическим – квантильным значением $t_{1-\alpha/2,f}$, где число степеней свободы $f = n-2$.

$$t \le t_{1-\alpha/2,f} \Rightarrow H_0, \tag{11.18а}$$

$$t > t_{1-\alpha/2,f} \Rightarrow H_1. \tag{11.18б}$$

Подставляя в (11.17) вместо t критическое значение $t_{1-\alpha/2,f}$ и присваивая r смысл критического $r_{1-\alpha/2,f}$, найдем последнее

$$r_{1-\alpha/2,f} = \left(\frac{n-2}{t^2_{1-\alpha/2,f}}+1\right)^{-\frac{1}{2}}. \tag{11.19}$$

В этом случае опять сохраняется решающее правило (11.9).

Пример

По результатам $n = 13$ измерений x и y рассчитан выборочный коэффициент корреляции $r = -0{,}62$. Требуется оценить его значимость при $\alpha = 0{,}05$. Найдем значение $r_{кр}$ двумя способами.

1) Используем вариант преобразования переменных. Напомним, что $z_{1-0,05/2} = 1{,}96$

$$r^{(1)}_{кр} = r^{(1)}_{1-\alpha/2,n} = \frac{\exp\left(2\frac{z_{1-\alpha/2}}{\sqrt{n-3}}\right)-1}{\exp\left(2\frac{z_{1-\alpha/2}}{\sqrt{n-3}}\right)+1} = \frac{\exp\left(2\cdot\frac{1{,}96}{3{,}16}\right)-1}{\exp\left(2\cdot\frac{1{,}96}{3{,}16}\right)+1} = 0{,}55.$$

$|r| > r^{(1)}_{1-0,05/2;13} \Rightarrow H_1$ – коэффициент значим.

2) Проделаем то же, используя t-критерий. Найдем $t_{1-0,05/2;12} = 2{,}20$.

Вычислим критическое значение $r^{(2)}$: $r^{(2)}_{кр} = r^{(2)}_{1-\alpha/2,f} = \left(\frac{n-2}{t^2_{1-0,05/2;f}}+1\right)^{-\frac{1}{2}} = \left(\frac{11}{2{,}2^2}+1\right)^{-\frac{1}{2}} = 0{,}55.$

Значения $r^{(1)}_{1-\alpha/2,n}$ и $r^{(2)}_{1-\alpha/2,f}$ в этом примере оказались одинаковыми. Расчеты критических значений по формулам (11.16) и (11.18) не вызывают сколько-нибудь серьезных затруднений. Тем не менее, существуют таблицы $r_{1-\alpha/2,f}$ для различных α. Фрагмент такой таблицы был приведен ранее в разделе 6.

Возвращаясь к обсуждению парного коэффициента корреляции, следует отметить, что r_{yx} отражает только линейную зависимость между переменными. Незначимый коэффициент корреляции одинаково характеризует и большую долю случайности, и сущест-

венную нелинейность связи между y и x. При функциональной, но нелинейной связи коэффициент корреляции может оказаться не только не равным единице, но и незначимым. Чтобы облегчить анализ и исключить возможные ошибки, рекомендуют на начальной стадии построить поле корреляции – график связи между y и x. Уже беглого взгляда на такой график бывает достаточно, чтобы оценить справедливость предположения о линейности изучаемой зависимости. Впрочем, тесноту нелинейной связи можно оценить, рассчитав корреляционное отношение.

11.1.2. Корреляционное отношение

Разобьем все поле корреляции $y(x)$, то есть всю выборку y_i, x_i, $i=\overline{1,n}$ по x на m интервалов. Сосчитаем число точек n_u, $u=\overline{1,m}$, попадающих в u-тый интервал и найдем $\bar{x}_u=\frac{1}{n_u}\sum_{i=1}^{n_u}x_{ui}$, $\bar{y}_u=\frac{1}{n_u}\sum_{i=1}^{n_u}y_{ui}$. Вычислим также $\bar{y}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}y_i$ – среднее значение по всей выборке. Рассчитаем общую дисперсию

$$S^2(y)=\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})^2. \qquad (11.20)$$

Найдем дисперсию воспроизводимости $S_0^2(y)\equiv S_0^2$ как средневзвешенную характеристику рассеяния y_{ui} относительно $\bar{y}_u$

$$S_0^2=\frac{1}{n-m}\sum_{u=1}^{m}(n_u-1)S_u^2=\frac{1}{n-m}\sum_{u=1}^{m}\sum_{i=1}^{n_u}(y_{ui}-\bar{y}_u)^2 \qquad (11.21)$$

и межгрупповую (межинтервальную) дисперсию

$$S_{\text{м}}^2=\frac{1}{n-1}\sum_{u=1}^{m}n_u(\bar{y}_u-\bar{y})^2. \qquad (11.22)$$

При $n\to\infty$ генеральные дисперсии складываются

$$\sigma^2(y)=\sigma_0^2+\sigma_{\text{м}}^2. \qquad (11.23а)$$

Для ограниченной выборки справедливо приближенное равенство

$$S^2(y)\approx S_0^2+S_{\text{м}}^2. \qquad (11.23б)$$

Отношение

$$\eta = +\sqrt{\frac{S_{\text{м}}^2}{S^2(y)}} \tag{11.24}$$

отражает долю корреляционной связи $\bar{y}_u(\bar{x}_u)$ в общем рассеянии $S^2(y)$. Величину η называют *корреляционным отношением*. Оно служит мерой тесноты связи между y и x.

Перечислим основные свойства η:

1. $0 \le \eta \le 1$. Корреляционное отношение по определению (11.24) не может быть отрицательным;
2. При $\eta = 1$ связь между переменными функциональная, при $S^2(y) = S_{\text{м}}^2$ дисперсия воспроизводимости $S_0^2 = 0$;
3. При $\eta = 0$ корреляционная связь отсутствует. Это условие может выполняться только при $S_{\text{м}}^2 = 0$, а значит все $\bar{y}_u = \bar{y}$;
4. Корреляционное отношение $\eta \ge r$. Выполнение условия $\eta = r$ свидетельствует о линейности связи между переменными.

Корреляционное отношение широко используется для оценки качества уравнения нелинейной регрессии (см. следующий раздел). При анализе эмпирических связей эта характеристика используется реже, чем она того заслуживает. Некоторым оправданием такого невнимания является отсутствие надежных рекомендаций по проверке значимости η. В качестве выхода из трудного положения часто предлагают сравнивать η с $r_{1-\alpha/2,f}$ (см. 11.1.1). Однако к полученным при этом заключениям следует относиться с большой осторожностью.

11.1.3. Частный коэффициент корреляции

Если исследуемая величина изменяется под действием нескольких (более одного) факторов, то парный коэффициент корреляции r_{yx_j} не всегда отражает действительную силу связи между y и x_j. Влияние других факторов на y может привести не только к изменению численного значения коэффициента корреляции, но и к смене его знака даже в случае линейной корреляции. Мерой тесноты корреляционной связи между y и x_j при условии, что влияние всех остальных факторов исключено, является *частный коэффициент корреляции.*

Проведение экспериментов по исследованию связи между y и x_j, в которых исключается влияние всех других факторов, оказывается трудоемким, а зачастую и просто невозможным. Более эффективным является переход от парных коэффициентов корреляции к искомым частным.

Рассчитаем парные коэффициенты корреляции между y и всеми контролируемыми факторами r_{yx_j}, а также попарно между всеми факторами $r_{x_jx_u}$, $j,u=\overline{1,k}$. Составим матрицу коэффициентов парной корреляции

$$\begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13}\ldots r_{1k} & r_{y1} \\ r_{21} & r_{22} & r_{23}\ldots r_{2k} & r_{y2} \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots & & & \\ r_{k1} & r_{k2} & r_{k3}\ldots r_{kk} & r_{yk} \\ r_{y1} & r_{y2} & r_{y3}\ldots r_{yk} & r_{yy} \end{bmatrix}. \qquad (11.25)$$

Здесь для упрощения записи использованы обозначения $r_{x_jx_u} \equiv r_{ju}$ и $r_{yx_j} \equiv r_{yj}$. Заметим также, что $r_{jj} = r_{yy} = 1$. Матрица (11.25) – симметрична, поскольку $r_{ju} = r_{uj}$. Если определитель матрицы (11.25) обозначить через D, то в общем случае частный коэффициент корреляции между y и x_j

$$r_{yj(1,2,\ldots j-1,j+1\ldots k)} = \frac{-D_{jy}}{\sqrt{D_{jj}D_{yy}}}. \qquad (11.26)$$

Здесь, в скобках в индексе при r, перечислены факторы, влияние которых исключается. D_{jy} – адъюнкта матрицы (11.25), полученная путем вычеркивания из нее j-той строки (то есть строки r_{ju}) и столбца y (столбца r_{ju}). D_{jj} и D_{yy} соответственно миноры, полученные вычеркиванием j-тых и y-вых строк и столбцов. Например в частном случае зависимости y от двух факторов x_1 и x_2 матрица коэффициентов парной корреляции имеет вид

$$\begin{bmatrix} 1 & r_{12} & r_{y1} \\ r_{21} & 1 & r_{y2} \\ r_{y1} & r_{y2} & 1 \end{bmatrix}. \qquad (11.27)$$

Частные коэффициенты корреляции

$$r_{y1(2)} = \frac{-(-1)^{1+3}\begin{vmatrix} r_{21} & 1 \\ r_{y1} & r_{y2} \end{vmatrix}}{\sqrt{\begin{vmatrix} 1 & r_{y2} \\ r_{y2} & 1 \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} 1 & r_{12} \\ r_{21} & 1 \end{vmatrix}}} = \frac{r_{y1} - r_{y2}r_{21}}{\sqrt{\left(1-r_{y2}^2\right)\left(1-r_{12}^2\right)}}, \tag{11.28}$$

$$r_{y2(1)} = \frac{-(-1)^{2+3}\begin{vmatrix} 1 & r_{12} \\ r_{y1} & r_{y2} \end{vmatrix}}{\sqrt{\begin{vmatrix} 1 & r_{y1} \\ r_{y1} & 1 \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} 1 & r_{12} \\ r_{21} & 1 \end{vmatrix}}} = \frac{r_{y2} - r_{y1}r_{12}}{\sqrt{\left(1-r_{y1}^2\right)\left(1-r_{12}^2\right)}}. \tag{11.29}$$

В более сложном случае трехфакторного эксперимента для расчетов частных коэффициентов корреляции можно использовать формулы типа

$$r_{y1(23)} = \frac{r_{y1(3)} - r_{y2(3)} \cdot r_{12(3)}}{\sqrt{\left(1-r_{y2(3)}^2\right)\left(1-r_{12(3)}^2\right)}}. \tag{11.30}$$

Как и парные, частные коэффициенты корреляции изменяются в пределах от –1 до +1. Для оценки их значимости используются те же критерии, что и для парных коэффициентов. Отличие состоит только в том, что при увеличении числа факторов уменьшается число степеней свободы $f = n - (k+1)$.

Примечание

Расчет частных коэффициентов корреляции и проверка их значимости производится с использованием полной матрицы (11.25). Следуя естественному желанию исключить из (11.25) все незначимые коэффициенты можно получить ошибочные, даже нелепые результаты. Все коэффициенты связаны между собой, и исключение любого из них непредсказуемым образом может отразиться на вычислении частных корреляций.

11.1.4. Множественный коэффициент корреляции

Подобно тому, как мерой тесноты парной линейной связи является коэффициент корреляции, мерой тесноты множественной линейной связи является *коэффициент множественной корреляции*

$$R = \sqrt{1 - \frac{D}{D_{yy}}}, \tag{11.31}$$

где, как уже отмечалось, D – определитель матрицы коэффициентов корреляции (11.25), а D_{yy} – минор, полученный исключением из матрицы строки и столбца с коэффициентами r_{yj}. Коэффициент множественной корреляции изменяется от 0 до 1.

11.2. Корреляция между нечисловыми случайными величинами

Часто в практических задачах приходится иметь дело с величинами, которые характеризуются качественными признаками. Эти признаки могут быть выражены в некоторой цифровой шкале (балл облачности, сорт продукта, экзаменационная оценка и т.п.), тем не менее качественный характер этих признаков остается. Это обстоятельство необходимо учитывать, в частности, при анализе корреляционных связей.

11.2.1. Ранговые коэффициенты корреляции

Ранговой коэффициент корреляции Спирмена. Пусть имеется некоторое число (ряд) однородных объектов (явлений, изделий, лиц и т.п.). Каждый элемент ряда характеризуется двумя качественными признаками A и B. Задача заключается в том, чтобы оценить тесноту корреляционных связей между этими признаками (например, можно оценить связь между ростом (признак A) и массой (признак B) игроков баскетбольной команды 5"Д" класса). Расположим все элементы в виде ряда, упорядоченного по признаку A (построим игроков по росту). Пронумеруем все элементы по $i=\overline{1,n}$, n – длина ряда. Эти номера будем считать рангами по признаку A, обозначим их a_i. Очевидно, что $a_i = i$. Построим теперь из тех же элементов ряд по признаку B (построим наших игроков в порядке убывания их массы). Проранжируем элементы этого ряда от 1 до n, присвоив им ранги b_i. Здесь b означает место элемента в ряду по признаку B, а индекс i – порядковый номер элемента в ряду A. В общем случае $b_i \neq i$, хотя отдельные значения могут и совпадать (необязательно, что самый высокий ученик окажется и самым тяжелым, а самый маленький – самым легким, хотя возможно и такое). Для наглядности впишем ранги a_i и b_i в строки следующей таблицы.

i	1	2	3	...	n
a_i	a_1	a_2	a_3		a_n
b_i	b_1	b_2	b_3		b_n
d_i	a_1-b_1	a_2-b_2	a_3-b_3		a_n-b_n

Здесь же выписан ряд разностей рангов $d_i = a_i - b_i$. Его мы используем позднее. Теперь можно рассчитать коэффициент корреляции

$$r_{ab} = \frac{\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(a_i - \bar{a})(b_i - \bar{b})}{S(a)S(b)}. \qquad (11.32)$$

Поскольку и a_i, и b_i заключены в пределах от 1 до n, процедуру расчета можно существенно сократить. Выпишем несколько соотношений для рядов a_i и b_i :

$$\bar{a} = \bar{b} = (n+1)/2, \qquad (11.33)$$

$$\sum_{i=1}^{n} a_i = \sum_{i=1}^{n} b_i = n(n+1)/2, \qquad (11.34)$$

$$\sum_{i=1}^{n} a_i^2 = \sum_{i=1}^{n} b_i^2 = n(n+1)(2n+1)/6, \qquad (11.35)$$

$$\sum_{i=1}^{n}(a_i - \bar{a})^2 = \sum_{i=1}^{n}(b_i - \bar{b})^2 = n(n^2-1)/12. \qquad (11.36)$$

Как уже отмечалось ранее, коэффициент корреляции не изменится, если перейти к центрированным переменным $\tilde{a}_i = a_i - \bar{a}$ и $\tilde{b}_i = b_i - \bar{b}$. Тогда имея в виду, что $\bar{\tilde{a}} = \bar{\tilde{b}} = 0$,

$$r_{ab} = r_{\tilde{a}\tilde{b}} = \frac{\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\tilde{a}_i\tilde{b}_i}{S(\tilde{a})S(\tilde{b})}. \qquad (11.37)$$

Необходимо найти $S(\tilde{a})$, $S(\tilde{b})$ и $\sum_{i=1}^{n}\tilde{a}_i\tilde{b}_i$.

$$S^2(\tilde{a}) = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(\tilde{a}_i - \bar{\tilde{a}})^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(a_i - \bar{a})^2 = \frac{n}{n-1}\cdot\frac{n^2-1}{12} \qquad (11.38)$$

Очевидно, что $S^2(\tilde{b}) = S^2(\tilde{a})$. Чтобы найти $\sum_{i=1}^{n}\tilde{a}_i\tilde{b}_i$, выполним следующие преобразования

$$\sum_{i=1}^{n} d_i^2 = \sum_{i=1}^{n}(a_i - b_i)^2 = \sum_{i=1}^{n}(\tilde{a}_i - \tilde{b}_i)^2 = \sum_{i=1}^{n}\tilde{a}_i^2 - 2\sum_{i=1}^{n}\tilde{a}_i\tilde{b}_i +$$

$$+ \sum_{i=1}^{n}\tilde{b}_i^2 = 2n\cdot\frac{n^2-1}{12} - 2\sum_{i=1}^{n}\tilde{a}_i\tilde{b}_i.$$

Отсюда

$$\sum_{i=1}^{n}\tilde{a}_i\tilde{b}_i = n(n^2-1)/12 - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} d_i^2. \qquad (11.39)$$

Подставляя (11.38) и (11.39) в (11.37), получим окончательную *формулу рангового коэффициента корреляции Спирмена*

$$r^{(C)} = 1 - \frac{6\sum_{i=1}^{n} d_i^2}{n(n^2-1)}. \qquad (11.40)$$

Значимость рангового коэффициента Спирмена проверяется сравнением с критическими значениями, рассчитываемыми по приведенным выше формулам, например,

$$r_{1-\alpha/2;f} = \left(\frac{n-2}{t^2_{1-\alpha/2;f}} + 1 \right)^{-\frac{1}{2}}.$$

Формула (11.40) получена в предположении, что все значения элементов ряда по признакам A и B не равны друг другу. В этом случае ранги a_i и b_i выражаются целыми числами из последовательности 1, 2, ..., n. Если встречаются два или более элементов с равными значениями признаков A и B, то им присваивают одинаковые средние ранги (их называют *связными*). В этом случае нарушаются соотношения (11.35) и (11.36) и формула (11.40) становится некорректной. Ниже мы приведем ее уточненную форму.

Ранговый коэффициент корреляции Кендалла. Это другой вариант оценки тесноты связи между качественными признаками. Он построен на основе комбинаторных подсчетов вероятности случайного распределения рангов. При отсутствии связных рангов коэффициент Кендалла рассчитывается по формуле

$$r^{(K)} = \frac{4K}{n(n-1)} - 1. \qquad (11.41)$$

Величина K представляет собой сумму «порядков» в ряду b_i, $i = \overline{1,n}$. Порядком в комбинаторике называют появление в ряду элемента с большим рангом b_u после (правее) элемента с рангом b_i, $b_u > b_i$, $u = \overline{i+1,n}$ (противоположная ситуация называется беспорядком или инверсией).

Обозначим сумму порядков для любого b_i через h_i, тогда сумма h_i есть K. Например для ряда 2, 4, 1, 3, 5 ранг $b_1 = 2$, а $h_1 = 1+1+1$ (ранги 4, 3 и 5 больше 2), ранг $b_2 = 4$ и $h_2 = 1$, далее имеем $b_3 = 1$ и $h_3 = 2$; $b_4 = 3$ и $h_4 = 1$, для $b_5 = 5$, естественно, $h_5 = 0$, поскольку это последний элемент ряда. Таким образом, $K = 3+1+2+1 = 7$. Формально это можно записать в виде $K = \sum_{i=1}^{n-1} h_i = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{u=i+1}^{n} \theta\{b_u - b_i\}$, где $\theta\{b_u - b_i\}$ – функция Хэвисайда: $\theta\{b_u - b_i\} = \begin{cases} 1, & b_u - b_i > 0, \\ 0, & b_u - b_i < 0. \end{cases}$

В общем случае коэффициенты Спирмена и Кендалла неравны друг другу. При их значениях, не достигающих –1 и +1, и при больших n, выполняется приближенное соотношение $r^{(C)} \approx (3/2)\cdot r^{(K)}$. Показано, что критическое значение

$$r^{(K)}_{1-\alpha/2,n} = z_{1-\alpha/2}\sqrt{\frac{2(2n+5)}{9n(n-1)}}. \qquad (11.42)$$

Для проверки гипотезы о значимости $r^{(C)}$ и $r^{(K)}$ используется решающее правило (11.9).

Формулы (11.40) и (11.41) построены при условии отсутствия связных (одинаковых) рангов в рядах a_i и b_i. Если это условие не выполняется, процедура расчета коэффициентов строится по другому. Разобьем интервалы изменения признаков A и B соответственно на m и l групп, то есть уровней признаков (m, $l < n$). Рассчитаем число элементов выборки n_{ij}, отвечающих сочетанию уровней A_j и B_i, $j = \overline{1,m}$, $i = \overline{1,l}$. Составим матрицу сопряженности для n_{ij} – табл. 11.1. Для удобства дальнейших вычислений дополним ее строкой и столбцом нулевых значений.

Таблица 11.1

Матрица сопряженности

Уровни признака B	Уровни признака A					Суммы по строкам, n_{i*}
	A_0	A_1	A_2	A_j	A_m	
B_0	0	0	0	0	0	0
B_1	0	n_{11}	n_{12}	n_{1j}	n_{1m}	n_{1*}
B_2	0	n_{21}	n_{22}	n_{2j}	n_{2m}	n_{2*}
B_i	0	n_{i1}	n_{i2}	n_{ij}	n_{im}	n_{i*}
B_l	0	n_{l1}	n_{l2}	n_{lj}	n_{lm}	n_{l*}
Суммы по столбцам, n_{*j}	0	n_{*1}	n_{*2}	n_{*j}	n_{*m}	n

Очевидно, что $\sum_{i=1}^{l} n_{i*} = \sum_{j=1}^{m} n_{*j} = n$. Рассчитаем следующие вспомогательные комбинации величин

$$U=\sum_{i=1}^{l}\sum_{j=1}^{m}n_{ij}\Big(\sum_{\mu=i+1}^{l}\sum_{\nu=j+1}^{m}n_{\mu\nu}\Big),\ V=\sum_{i=1}^{l}\sum_{j=1}^{m}n_{ij}\Big(\sum_{\mu=i+1}^{l}\sum_{\nu=j-1}^{0}n_{\mu\nu}\Big),$$

$$T_1=\sum_{i=1}^{l}n_{i*}(n_{i*}-1),\ T_2=\sum_{j=1}^{m}n_{*j}(n_{*j}-1),$$

$$T_3=\sum_{i=1}^{l}n_{i*}(n_{i*}^2-1),\ T_4=\sum_{j=1}^{m}n_{*j}(n_{*j}^2-1).$$

Здесь $n_{\mu\nu}$ – элементы матрицы, определяемые пределами суммирования при замене i на μ и j на ν. При этом $n_{0j},n_{i0},n_{00}\equiv 0$. С учетом этих вспомогательных соотношений формулы для ранговых коэффициентов Спирмена и Кендалла принимают вид

$$r^{(C)}=\frac{12\sum_{i=1}^{l}\sum_{j=1}^{m}n_{ij}\left(\sum_{\mu=i-1}^{0}n_{\mu*}+n_{i*}/2-n/2\right)\left(\sum_{\nu=j-1}^{0}n_{*\nu}+n_{*j}/2-n/2\right)}{\left[\left(n(n^2-1)-T_3\right)\left(n(n^2-1)-T_4\right)\right]^{1/2}},\qquad(11.43)$$

$$r^{(K)}=\frac{2(U-V)}{\left[\left(n(n-1)-T_1\right)\left(n(n-1)-T_2\right)\right]^{1/2}}.\qquad(11.44)$$

Выражения (11.43) и (11.44) оказались довольно громоздкими, а реализация вычислений по ним требует большого внимания. В этом смысле вычисление коэффициента Спирмена по формуле (11.43) ничуть не проще, чем по исходной формуле парного коэффициента корреляции между рангами (11.32). Результаты расчетов по этим двум формулам естественно оказываются одинаковыми.

Рассмотрим несколько примеров.

1. Рассчитаем сначала ранговые коэффициенты корреляции между двумя признаками объектов при отсутствии связных рангов.

Десять инженеров-программистов с различным стажем работы T_i затратили на решение тестовой задачи время τ_i, $i=\overline{1,10}$. Следует оценить на уровне значимости $\alpha=0{,}05$ справедливость гипотезы о наличии корреляционной связи между T и τ. Результаты теста и их ранжирование:

T_i, мес.	48	29	28	23	21	20	18	17	12	6
a_i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
τ_i, мин.	12	10	9	15	11	20	21	16	23	24
b_i	4	2	1	5	3	7	8	6	9	10

а) Рассчитаем $r^{(C)}$. Найдем $\sum_{i=1}^{10} d_i^2 = 3^2 + 0^2 + 2^2 + 1^2 + 2^2 + 1^2 + 1^2 + 2^2 + 0^2 + 0^2 = 24$.

Тогда $r^{(C)} = 1 - \dfrac{6 \cdot 24}{10(10^2 - 1)} = 0{,}86$. Значение $t_{1-0{,}05/2;8} = 2{,}31$; $r_{1-0{,}05/2;8} = 0{,}63$;

$r^{(C)} > r_{1-0{,}05/2;8}$, следовательно корреляционная связь между T и τ значима.

б) Рассчитаем $r^{(K)}$. Найдем в ряду b_i сумму порядков $K = \sum_{i=1}^{n-1} h_i = 6 + 7 + 7 + 5 + 5 + 3 + 2 + 2 + 1 = 38$. По формуле (11.41) вычислим коэффициент корреляции Кендалла $r^{(K)} = 0{,}69$. Критическое значение $r^{(K)}_{1-0{,}05/2;10} = 0{,}49$. $r^{(K)} > r_{1-0{,}05/2;10}$ – гипотеза о значимости корреляционной связи между T и τ подтверждается.

2. Рассмотрим ряды со связными рангами. Пусть качественные признаки A и B элементов выборки подразделяются только на три категории, обозначаемые как +1, 0, –1. Результаты наблюдений представлены рядами

i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
A_i	+1	+1	+1	0	0	0	0	0	–1	–1	–1
B_i	+1	0	+1	0	+1	0	–1	0	–1	0	–1

Составим таблицу сопряженности

	A_0	A_1	A_2	A_3	n_{i*}
B_0	0	0	0	0	0
B_1	0	2	1	0	3
B_2	0	1	3	1	5
B_3	0	0	1	2	3
n_{*j}	0	3	5	3	11

Выполним сначала вспомогательные расчеты

$$U = 2 \cdot (3 + 1 + 1 + 2) + 1 \cdot (1 + 2) + 0 + 1 \cdot (1 + 2) + 3 \cdot 2 = 26,$$

$$V = 2 \cdot 0 + 1 \cdot 1 + 0 + 1 \cdot 0 + 3 \cdot 0 + 1 \cdot 1 = 2,$$

$$T_1 = 3 \cdot 2 + 5 \cdot 4 + 3 \cdot 2 = 32, \quad T_2 = T_1 = 32,$$

$$T_3 = 3 \cdot (3^2 - 1) + 5 \cdot (5^2 - 1) + 3 \cdot (3^2 - 1) = 168, \quad T_4 = T_3 = 168.$$

Рассчитаем коэффициенты:

$$r^{(C)} = 12\cdot(2\cdot(0+3/2-11/2)(0+3/2-11/2)+1\cdot(0+3/2-11/2)(3+5/2-11/2))+0$$
$$+1\cdot(3+5/2-11/2)(0+3/2-11/2)+3\cdot(3+5/2-11/2)(3+5/2-11/2)+$$
$$+1\cdot(3+5/2-11/2)(8+3/2-11/2)+0+2\cdot(8+3/2-11/2)(8+3/2-11/2))\cdot$$
$$\cdot(11\cdot(11^2-1)-168)^{-1} = 12\cdot 64/1152 = 0{,}67.$$

$$r^{(K)} = \frac{2(26-2)}{11\cdot 10-32} = \frac{48}{78} = 0{,}62.$$

Повторяя вычисления критических значений коэффициентов корреляции при $n = 11$, получим $r_{1-0,05;9} = 0{,}60$ и $r^{(K)}_{1-0,05/2;11} = 0{,}46$. Таким образом, оба коэффициента корреляции значимы. Читателю предлагается убедиться, что расчеты по формулам (11.32) и (11.43) дают одинаковые результаты.

Задача

Студенты, специализирующиеся по кафедре экспериментальной физики атмосферы, сдавали в сессию экзамены по дисциплинам «Теория эксперимента» доценту Потатчику (П) и «Техника эксперимента» доценту Строгаеву (С). Экзаменационные оценки были следующие:

№№ по списку	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
Оценки П	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	4	4	4
Оценки С	4	4	5	5	4	3	4	4	5	2	3	2	2	3

Рассчитайте ранговые коэффициенты Спирмена и Кендалла и оцените значимость корреляционной связи между успехами студентов в теории и технике эксперимента (или согласованность мнений экзаменаторов относительно этих успехов). $\alpha = 0{,}05$.

11.2.2. Коэффициент конкордации

До сих пор речь шла о корреляции между двумя качественными признаками. В практике экспериментальных исследований часто возникает задача сопоставления нескольких рядов ранговых оценок. Важным этапом планирования эксперимента является выбор факторов, оказывающих влияние на исследуемый процесс и отсеивание незначимых факторов. Априорное экспертное ранжирование факторов по степени их предполагаемого влияния позволяет сократить время и затраты на проведение экспериментов. Подобные задачи решаются при планировании первоочередных мероприятий для повышения эффективности технологического процесса или охраны окружающей среды. При обработке неравноточных измерений экспертное ранжирование используется для задания весов различным выборкам. Экспертное ранжирование может быть полезным только в том слу-

чае, когда оценки экспертов, будучи независимыми друг от друга, в то же время являются достаточно согласованными. Мерой взаимного сходства ранжированных рядов служит коэффициент конкордации (согласия).

Предположим, что из перечня факторов Φ_j, $j=\overline{1,n}$, n – длина перечня, для проведения начальной стадии эксперимента следует выбрать наиболее важные. Чтобы уменьшить вероятность ошибки (последствия которой могут оказаться разорительными), проводится экспертное ранжирование факторов. Каждый из m экспертов ранжирует весь ряд факторов, присваивая им например, номера от 1 до n – ранги r_{ij}. Если эксперт считает какие-то факторы равными по значимости, он присваивает им одинаковые средние ранги. Таким образом, результаты ранжирования можно представить в виде табл. 11.2.

Таблица 11.2.

Матрица рангов

Эксперты	Факторы				T_i
	Φ_1	Φ_2	Φ_j	Φ_n	
$Э_1$	r_{11}	r_{12}	r_{1j}	r_{1n}	T_1
$Э_2$	r_{21}	r_{22}	r_{2j}	r_{2n}	T_2
$Э_i$	r_{i1}	r_{i2}	r_{ij}	r_{in}	T_i
$Э_m$	r_{m1}	r_{m2}	r_{mj}	r_{mn}	T_m
R	R_1	R_2	R_j	R_n	

Просуммируем ранги, присвоенные экспертами j-тому фактору: $R_j=\sum_{i=1}^{m} r_{ij}$. Среднее значение величины R очевидно составляет $\overline{R}=m(n+1)/2$. Найдем квадраты разностей $d_j^2=(R_j-\overline{R})^2$, просуммируем их и нормируем (разделим) на максимальную сумму квадратов отклонений, которая возможна при полном единодушии всех экспертов. Получим коэффициент конкордации

$$W=\frac{12\sum_{j=1}^{n} d_j^2}{m^2 n(n^2-1)}. \qquad (11.45)$$

При наличии связных рангов формула несколько усложняется:

$$W=\frac{12\sum_{j=1}^{n} d_j^2}{m^2 n(n^2-1)-m\sum_{i=1}^{m} T_i}, \qquad (11.46)$$

$$T_i=\sum_{\nu=1}^{N_i} n_{i\nu}(n_{i\nu}^2-1). \qquad (11.47)$$

Здесь N_i – число групп одинаковых рангов в строке (в оценках i-того эксперта), $n_{i\nu}$ – число одинаковых рангов в ν-той группе, $\nu = \overline{1, N_i}$.

Например, в строке: 1 3 3 3 5 6,5 6,5 8 содержится две группы связных рангов ($N_i = 2$). В первой из них три одинаковых ранга ($n_{i1} = 3$), во второй – два ($n_{i2} = 2$). Таким образом, $T_i = 3 \cdot (3^2 - 1) + 2 \cdot (2^2 - 1) = 30$.

Коэффициент конкордации изменяется от 0 до 1. Значение $W = 0$ свидетельствует о полном отсутствии согласованности в мнениях экспертов, $W = 1$ соответствует их идеальному согласию. Если $0 < W < 1$, то проверяется значимость коэффициента W. Доказывается, что при достаточно больших n ($n > 7$) величина $\chi^2 = m(n-1)W$ имеет распределение, близкое к известному χ^2-распределению с числом степеней свободы $f = n - 1$. Процедура проверки гипотезы о значимости коэффициента конкордации при заданном α осуществляется в соответствии с решающим правилом

$$\chi^2 \le \chi^2_{1-\alpha, f} \Rightarrow H_0, \quad \chi^2 > \chi^2_{1-\alpha, f} \Rightarrow H_1. \tag{11.48}$$

Если коэффициент конкордации значим, принимается гипотеза о согласованности экспертных оценок. Далее производится отсеивание факторов с большими R_j. Для наглядности отбора можно построить графики связи между суммами рангов (лучше инвертированными, то есть умноженными на –1) и местом фактора в «общем строю».

11.2.3. Бисериальный коэффициент корреляции.

Бисериальный коэффициент корреляции используется для оценки связи между случайными числовой и дихотомической величинами. *Дихотомической* называется величина, принимающая только два исключающих друг друга значения: «да» и «нет», плюс и минус, явление наблюдалось, и явление не наблюдалось. При вычислениях удобно использовать 0 и 1.

Пусть некоторая метеорологическая величина x характеризует условие отсутствия или появления какого-либо явления погоды y (без грозы – гроза, гололеда нет – гололед и др.) Имеется некоторый ряд значений этой величины x_i, $i = \overline{1, n}$. Каждому x_i соответствует значение y_i, $y_i = 0$ или 1. Разобьем всю выборку по x на m интервалов со средними значениями $\bar{x}_u$, $u = \overline{1, m}$. В каждом интервале заключено n_u значений x_i, при этом число значений с отсутствием явления обозначим n_{0u}, а с явлением – n_{1u}.

Найдем $n_u = n_{0u} + n_{1u}$, $n_0 = \sum_{u=1}^{m} n_{0u}$, $n_1 = \sum_{u=1}^{m} n_{1u}$, $p = n_0 / n$ и $q = n_1 / n$, где p и q – эмпирические частоты отсутствия и наличия явления. Вычислим далее $\bar{x}_0 = \frac{1}{n_0} \sum_{u=1}^{m} n_{0u} \bar{x}_u$ и $\bar{x}_1 = \frac{1}{n_1} \sum_{u=1}^{m} n_{1u} \bar{x}_u$ – средние значения величины x при $y_i = 0$ и $y_i = 1$. Общее среднее значение x по всей выборке $\bar{x} = \frac{n_0 \bar{x}_u + n_1 \bar{x}_u}{n_0 + n_1}$, а СКО $S(x) = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{u=1}^{m} n_u (\bar{x}_u - \bar{x})^2}$.

Бисериальный коэффициент корреляции вычисляется по формуле

$$r^{(б)} = \frac{\bar{x}_1 - \bar{x}_0}{S(x)} \cdot \frac{pq}{\varphi(z_p)}. \qquad (11.49)$$

Здесь z_p – квантильное значение параметра нормального распределения, соответствующего вероятности p (значение z делит всю площадь под кривой нормального распределения в пропорции $p:q$), $\varphi(z_p)$ – плотность вероятности нормального распределения при $z = z_p$.

$$\varphi(z_p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z_p^2}{2}\right), \qquad (11.50)$$

z_p определяют из соотношения

$$p = \frac{1}{2} + \Phi(z_p). \qquad (11.51)$$

Значения z_p и $\varphi(z_p)$ можно найти также по таблицам функции и плотности нормального распределения. Знак бисериального коэффициента корреляции определяется знаком разности средних $\bar{x}_1 - \bar{x}_0$: если с возрастанием x повторяемость явления увеличивается ($\bar{x}_1 - \bar{x}_0 > 0$), то $r^{(б)} > 0$, в противоположном случае $r^{(б)} < 0$.

Для оценки значимости коэффициента бисериальной корреляции рекомендуют использовать те же соотношения, что и для парного коэффициента корреляции. Эта рекомендация не бесспорна.

Проиллюстрируем расчет бисериального коэффициента корреляции на простом примере. Исследуется связь между появлением тумана в утренние часы с температурой точки росы τ в двадцать один час предшествующих суток. Результаты представлены в следующей таблице

Интервал Температур °C	Число случаев		
	без тумана	с туманом	Всего
–3...–1	1	2	3
–1...+1	4	4	8
1...3	6	5	11
3...5	10	2	11
5...7	8	1	9
7...8	3	1	4
8...10	2	0	2
10...12	1	0	1
Всего	35	15	50

Вычислим необходимые для расчета коэффициента корреляции значения: $\bar{\tau}_{\text{без тумана}} = \bar{\tau}_0 = 4{,}4\ ^\circ C$, $\bar{\tau}_1 = 1{,}9\ ^\circ C$, $S(\tau) = 2{,}9\ ^\circ C$, $q = 0{,}3$, $z_{0{,}7} = 0{,}52$, $\varphi(z_{0{,}7}) = 0{,}35$.

Тогда $r^{(б)} \dfrac{1{,}9 - 4{,}4}{2{,}9} \cdot \dfrac{0{,}7 \cdot 0{,}3}{0{,}35} = -0{,}51$.

Проверим значимость коэффициента корреляции при уровне значимости $\alpha = 0{,}05$. Найдем

$$r_{1-\alpha/2;f} = \left(\frac{n-2}{t^2_{1-\alpha/2;f}} + 1 \right)^{-0{,}5} = \left(\frac{48}{2{,}0^2} + 1 \right)^{-0{,}5} = 0{,}28.$$

Поскольку $|r^{б}| > r_{1-\alpha/2;f}$, корреляционная связь между вечерней температурой точки росы и утренним появлением тумана значима.

Задача

Имеются следующие данные, характеризующие связь между радиолокационной отражаемостью конвективных облаков (РЛО) и возможностью выпадения из них града (любого размера) и крупного града. Для оценки тесноты этой связи рассчитайте бисериальный коэффициент корреляции и оцените его значимость при $\alpha = 0{,}05$.

РЛО на уровне нулевой изотермы, $l_\alpha Z$	Число случаев		
	без града	град любого	Крупный
2,5	29	0	0
3,0	113	1	1
3,5	332	5	2
4,0	218	13	5
4,5	332	3	3
5,0	217	14	5
5,5	264	17	7
6,0	146	15	8
6,5	50	4	3
7,0	9	2	2

11.3. Коэффициент автокорреляции. Корреляционная функция

Коэффициент корреляции используется для выражения связей не только между двумя (или более) рядами одноименных (или разноименных) величин, но и внутри одного временного (или пространственного) ряда. Такие ряды обычно рассматриваются как выборочные реализации случайных процессов. Понятие «случайный процесс» является более общим по сравнению с понятием «случайная величина». Дадим сначала формальное определение. Если некоторая физическая величина является функцией времени – $x(t)$, $-\infty < t < \infty$, – и в любой момент времени сохраняет свойства случайной величины, то такая функция называется *случайным процессом*.

Проиллюстрируем различие на простых примерах. Пусть многократно измеряется физическая величина, истинное значение которой остается неизменным. Вследствие неизбежных погрешностей результаты отдельных измерений отличаются друг от друга. При этом связь между отдельными значениями отсутствует. Расположение элементов в ряду не играет роли. Не изменяя свойств выборки, ее можно преобразовать, например, в вариационный ряд. Именно так ранее мы определяли понятие случайной величины.

Часто предметом изучения является изменчивость истинного значения физической величины во времени. Возьмем, например, ленту самописца с записью скорости ветра (температуры, давления, радиолокационной отражаемости и т.п.). Легко убедиться, что последовательные значения скорости не являются совершенно независимыми. Большие изменения скорости ветра – от порыва до затишья – происходят не мгновенно, а постепенно. Можно заметить пульсирующие колебания, отражающие вихревой, турбулентный характер воздушного потока. Правда, эти колебания нерегулярны, они отличаются по частоте и по амплитуде. Зависимость такого рода и называют случайным процессом. Очевидно, что во временном ряду, отражающем случайный процесс, место каждого отдельного результата «в общем строю» играет большую роль. Произвольная перестановка элементов становится недопустимой.

Случайные процессы разнообразны и сложны. Если среднее значение $\bar{x}$ и дисперсия $S^2(x)$ остаются постоянными во времени, то такой процесс называют *стационарным*. Далее мы будем рассматривать именно такие процессы. Крайним проявлением случайного процесса является «белый шум» (или испытание с независимыми исходами), когда связь между последовательными значениями отсутствует. В этом случае понятия случайный процесс и случайная величина сближаются.

Другой крайней формой случайного процесса является периодический процесс, когда через интервал времени Δt функция полностью повторяется: $x(t + \Delta t) = x(t)$.

Итак, обратимся к временному ряду физической величины. Временной ряд может быть непрерывным – $x(t)$ на интервале T – или дискретным – x_i, $i=\overline{1,n}$, n – длина ряда. При цифровой обработке на ПК любой непрерывный ряд преобразуют в дискретный с шагом дискретизации по времени, то есть интервалом между соседними отсчетами $\Delta = t_{i+1} - t_i$, $\Delta = const$. Будем искать связь между элементами ряда, сдвинутыми (смещенными) на временной интервал τ. Его называют также временем запаздывания. Для дискретного ряда удобнее задавать s – сдвиг порядкового номера, при этом $\tau = \Delta s$. В качестве меры тесноты линейной связи между элементами ряда x_i и x_{i+s} используют *коэффициент парной корреляции* $r_{x_i x_{i+s}} \equiv r_s$. Величину r_s называют *коэффициентом автокорреляции*. Следуя общей формуле (11.4) для коэффициента парной корреляции, мы должны были бы написать

$$r_s = \frac{\frac{1}{n-s-1}\sum_{i=1}^{n-s}\left(x_i - \bar{x}_{\langle 1,n-s\rangle}\right)\left(x_{i+s} - \bar{x}_{\langle s+1,n\rangle}\right)}{S\left(x_{\langle 1,n-s\rangle}\right)S\left(x_{\langle s+1,n\rangle}\right)}. \qquad (11.52)$$

Здесь средние значения и СКО находятся по элементам, относящимся к каждому из коррелируемых рядов (осреднение осуществляется по интервалам, указанным в угловых скобках). Формула (11.52) часто приводится в технической литературе. Однако применение ее создает иллюзию точности. Поскольку при анализе постулируется стационарность процесса ($\bar{x} = const$ и $S^2(x) = const$), то более логичным является выражение

$$r_s = \left[\frac{1}{n-s-1}\sum_{i=1}^{n-s}\left(x_i - \bar{x}\right)\left(x_{i+s} - \bar{x}\right)\right] / S^2(x), \qquad (11.53)$$

где $\bar{x}$ и $S^2(x)$ вычисляются по всей выборке n.

Утверждается, что оценка коэффициента автокорреляции, полученная по этой формуле, оказывается несмещенной, но несостоятельной: погрешность r_s растет по мере увеличения запаздывания. Другим вариантом формулы для r_s является

$$r_s' = \left[\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n-s}\left(x_i - \bar{x}\right)\left(x_{i+s} - \bar{x}\right)\right] / S^2(x). \qquad (11.54)$$

Погрешность нахождения r_s' не зависит от соотношения между n и S, но эта оценка оказывается смещенной.

Практические рекомендации сводятся к тому, что при расчетах коэффициента автокорреляции следует ограничиваться значениями $S < n/3$. В этом случае различия между формулами (11.53) и (11.54) становятся несущественными.

Корреляционная функция. При анализе временных рядов интерес представляют не отдельные значения r_s, а зависимость их от τ (или s). Такая зависимость *называется корреляционной функцией,* обозначим ее $R(\tau)$ или $R(s)$. Корреляционная функция – это новый временной ряд, но более короткий и обычно более упорядоченный. При анализе для наглядности полезно построить график $R(s)$ (или $R(\tau)$). Графики корреляционных функций могут быть весьма разнообразными. Общим является только то, что $R(s)$ изменяется от –1 до +1 и что при $s = 0$, как легко убедиться, $R(0) = 1$. Рассмотрим несколько характерных форм кривой $R(s)$ при различных видах функции $x(t)$.

Если исходный ряд задается гармонической функцией вида $x(t) = A\sin(2\pi\nu t)$, где ν – частота, то гармонической будет и корреляционная функция: $R(\tau) = \cos(2\pi\nu\tau)$. Если исходный ряд является суммой синусоид, то $R(\tau)$ будет выражаться суммой косинусоид. На рис. 11.2 кривая 1 отражает корреляционную функцию для случайного процесса, близкого к *«белому шуму»* (строго, для белого шума $R(s) = 0$ при $s > 0$). Кривая 2 является отражением так называемого *«красного шума»*, то есть преобладания длинноволновых колебаний или тренда.

Если исходный ряд содержит нерегулярные колебания с наложенным на них белым шумом, то $R(s)$ имеет вид осциллирующей затухающей кривой (кривая 3 на рис. 11.2). Такой вид корреляционной функции ($|R(s)| \to 0$) характерен для рядов метеорологических величин, не содержащих явных и скрытых детерминированных периодических колебаний.

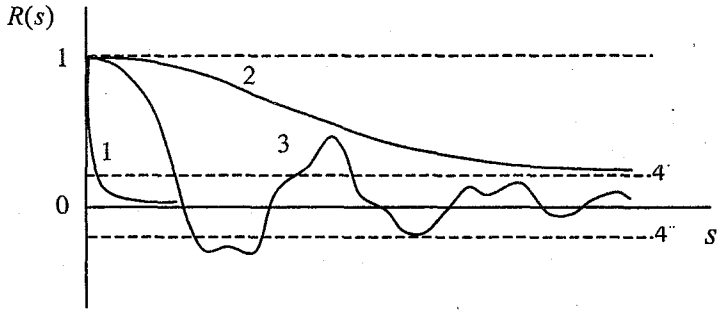


Рис. 11.2. Различные виды корреляционной функции

1 – взаимная корреляция между элементами ряда практически отсутствует (близко к белому шуму), 2 – процесс характеризуется низкочастотной изменчивостью (красный шум), либо трендом, 3 – процесс представляет собой сумму белого шума и нерегулярных колебаний, 4′, 4″ – критические значения $\pm r_{1-\alpha/2;f}$.

Сложнее обстоит дело с оценкой значимости корреляционной функции. Логичным выглядит предложение сравнивать $r(s)$ с критическими значениями для коэффициента парной корреляции. Неопределенность этой рекомендации проявляется в тех случаях, когда корреляционная функция оказывается знакопеременной, поскольку при этом она не-

избежно принимает нулевые и близкие к нулю значения. Если использовать в качестве критических $r_{1-\alpha/2;f}$, определяемые формулами (11.16) и (11.19), то близкие к нулю $R(\tau)$ очевидно окажутся незначимыми. В качестве компромисса рекомендуется сравнивать $R(\tau)$ с критическими значениями в локальных экстремумах. Корреляционная функция считается значимой до тех пор, пока ее экстремальные значения $R(s)_{Extr}$ превышают критические: $|R(s)_{Extr}| > r_{1-\alpha/2;f}$, $f = n - s - 2$. Заметим, что с увеличением s число степеней свободы f уменьшается, а значит $r_{1-\alpha/2;f}$ растет.

Наряду с временной корреляционной функцией $R(\tau)$ также используют пространственную корреляционную функцию $R(l)$, сопоставляя между собой синхронные ряды измерений, выполненных на различных удалениях друг от друга – по горизонтали или вертикали.

Спектральная функция. Визуальный анализ корреляционной функции является довольно трудным, так как не позволяет получить какие-либо количественные оценки вклада колебаний различной частоты в изменчивость случайного процесса. Чтобы получить такие оценки, случайный процесс переводят из временной области в частотную, то есть вместо временной изменчивости рассматривают частотный спектр процесса. Теоретически любой временной ряд конечной длины можно представить в виде суммы (суперпозиции) гармонических колебаний. Такой переход осуществляется с помощью разложения Фурье. Распределение амплитуд гармоник по частотам называют *спектральной функцией или спектром.* Более эффективным средством оценки спектра оказывается Фурье-преобразование корреляционной функции. В этом случае рассчитывается сразу спектр мощности. Соответствующее выражение в комплексной форме имеет вид

$$P(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} R(\tau) \exp(-j2\pi\nu\tau) d\tau, \qquad (11.55)$$

где $P(\nu)$ – спектральная плотность мощности случайного процесса, ν – частота, $-\infty < \nu < \infty$, $j = \sqrt{-1}$ – мнимая единица.

Физический смысл спектра мощности заключается в следующем: $P(\nu)$ представляет собой долю дисперсии, вносимую в процесс колебаниями с частотой ν и отнесенную к единичному интервалу частоты. Размерность $[P(\nu)] = \text{Гц}^{-1} = \text{с}$. При этом выполняется условие нормировки $\int_{-\infty}^{\infty} P(\nu) d\nu = 1$.

Формула (11.55) справедлива для непрерывной функции $R(\tau)$ при $-\infty < \tau < \infty$. На практике мы имеем дело с дискретными и ограниченными рядами. Преобразование Фурье дискретной функции $R(s)$ дает дискретную функцию $P(\nu_k)$, где ν_k – набор частот,

$k=\overline{0,L/2}$, L – точка отсечения корреляционной функции, то есть длина ряда $R(s)$, используемая при расчетах спектра. Выбор L является операцией сложной и ответственной (см. ниже). Если L определена, то находят основную частоту $\nu_1 = 1/L\cdot\Delta$ (только одна гармоника этой частоты укладывается на период $T = L\cdot\Delta$). В качестве максимальной частоты обычно задается частота Найквиста, связанная с шагом дискретизации корреляционной функции по времени: $\nu_H = 1/(2\cdot\Delta)$ или $\nu_H = \frac{L}{2}\nu_1$. Это означает, что на период частоты ν_H должно приходиться (по крайней мере) два отсчета в ряду x_i. Шаг по частоте принимают равным ν_1.

Перепишем (11.55) для дискретного преобразования. Перейдем сразу от комплексной формы к действительной. При этом учтем, что $R(\tau) = R(-\tau) = R(s)$, $\tau = \Delta s$, $d\tau = \Delta$.

$$P(\nu_k) = 2\Delta\sum_{s=0}^{L} R(s)\cos(2\pi ks/L), \tag{11.56}$$

где $\nu_k \equiv k\nu_1 = k\frac{1}{L\Delta}$, $k=\overline{0,L/2}$. Величина $P(\nu_k)$, как и $P(\nu)$, отражает долю дисперсии, отнесенную к единичной частоте.

Чтобы получить дисперсию, приходящуюся на интервал частот $[\nu_k,\nu_{k+1}]$, следует $P(\nu_k)$ умножить на ширину частотного интервала. При этом $\frac{1}{L\Delta}\sum_{k=0}^{(L/2)-1} P(\nu_k) = 1$. В силу случайности исходной выборки случайными оказываются и функции $R(s)$ и $P(\nu_k)$. Чтобы уменьшить случайные выбросы на кривой $P(\nu_k)$, эту функцию предлагают сглаживать, умножая $R(s)$ на корреляционное окно $w(s)$. В этом случае выражение (11.56) принимает вид

$$\overline{P}(\nu_k) = 2\Delta\sum_{s=0}^{L/2} w(s)R(s)\cos(2\pi ks/L). \tag{11.57}$$

Используют различные формы окон. На практике чаще всего применяют окна Тьюки $w_T(s) = \frac{1}{2}\left(1+\cos\left(\frac{\pi s}{L}\right)\right)$ и Бартлетта $w_B(s) = \left(1-\frac{s}{L}\right)$ для $s=\overline{0,L}$.

Вернемся снова к вопросу о выборе L. Точка отсечения, как легко видеть, определяет не только набор частот, но и ширину корреляционного окна. От значения L зависит качество спектральной функции. Напомним, что с увеличением s увеличивается погрешность вычисления элементов корреляционной функции, а $|R(s)|$ обычно уменьшается.

Корреляционная функция становится незначимой. Подставляя эти ненадежные значения в формулу (11.57), получим ложные максимумы и минимумы на кривой $P(\nu_k)$. Занижая значения L, то есть отсекая значимую часть $R(s)$, получим сильно сглаженную

спектральную функцию. Четких рекомендаций по выбору точки отсечения нет. Радикальный путь заключается в том, чтобы рассчитывать спектр при разных значениях L и, сравнивая результаты, выбрать оптимальный вариант. Менее трудоемким, но и менее надежным является вариант отсечения незначимой части $R(s)$ при сравнении ее с критическими значениями $r_{1-\alpha/2,f}$. Можно, например, найти сдвиг, соответствующий последнему значимому максимуму корреляционной функции $s_{\text{п.з.м.}}$ и задать точку отсечения как $L = c \cdot s_{\text{п.з.м.}}$, полагая $c \approx 1{,}5...2$.

12. АППРОКСИМАЦИЯ ЗАВИСИМОСТИ МЕЖДУ СЛУЧАЙНЫМИ ВЕЛИЧИНАМИ (РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ)

Следующей ступенью анализа экспериментальных данных является представление в виде аналитического выражения зависимости исследуемой величины y от управляющих факторов x_j, $j=\overline{1,k^*}$, k^* – число факторов. Сложность аппроксимации связана с тем, что измерения исследуемой величины y и факторов x_j выполняются с неизбежными погрешностями. Функциональная связь $y = y(x_j, j=\overline{1,k^*})$ кроме упомянутых погрешностей, искажена также влиянием многочисленных неконтролируемых факторов. Вследствие этого бессмысленно, а часто и просто невозможно, искать зависимость, в точности отражающую все экспериментальные данные.

Задача заключается в том, чтобы выделить и описать функциональную составляющую общей стохастической связи между переменными. При ограниченных рядах измерений такие зависимости носят лишь приближенный оценочный характер. Их называют *уравнениями регрессии* и обозначают $\hat{y} = \hat{y}(x_j, j=\overline{1,k^*})$.

Решение разбивается на два этапа. Прежде всего, следует выбрать вид функции, то есть класс уравнений связи между анализируемыми переменными. Наличие априорной информации о предполагаемой зависимости облегчает такой выбор. При отсутствии сколько-нибудь надежных представлений о виде предполагаемой связи или при появлении трудностей вычислительного характера рекомендуется в качестве аппроксимирующей функции использовать полиномы вида

$$\hat{y} = a_0 + \sum_{j=1}^{k^*} a_j x_j + \sum_{j=1}^{k^*} a_{jj} x_j^2 + \ldots + \sum_{j=1}^{k^*}\sum_{\substack{u=1 \\ j\neq u}}^{k^*} a_{ju} x_j x_u + \ldots \qquad (12.1)$$

Такие полиномы включают в себя слагаемые, пропорциональные x_j в первой, второй и более высоких степенях, а также взаимодействия – парные, тройные, и т.д. Повышая степень полинома и учитывая взаимодействия, можно достаточно точно описать любую функцию.

Следующий этап состоит в том, чтобы для выбранной функции найти параметры, при которых она наилучшим образом аппроксимирует результаты эксперимента. Например, для полинома (12.1) следует подобрать наилучшие коэффициенты a_j, a_{jj}, a_{ju} и т.д. Решение осуществляется методом наименьших квадратов (МНК).

12.1. Метод наименьших квадратов

Ограничимся сначала для простоты и наглядности изложения зависимостью исследуемой величины y от единичного фактора x, так что уравнение регрессии y на x представляется в общем виде выражением

$$\hat{y} = \hat{y}(x, a_j, j = \overline{0,k}), \tag{12.2}$$

где a_j – неизвестные параметры, в случае полиномов вида (12.1) это коэффициенты, общее число которых обозначим теперь как $k+1$.

Если рассматривать $\hat{y}$ как действительное значение исследуемой величины, то в случае нормального распределения плотность вероятности определяется выражением

$$f(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(y)} \cdot \exp\left[-\frac{(y-\hat{y})^2}{2\sigma^2(y)} \right]. \tag{12.3}$$

Функция правдоподобия для всех y_i, $i = \overline{1,n}$ (n – число испытаний) вычисляется (см. разделы 3, 9) как

$$g = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(y)} \right)^n \exp\left[-\frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2}{2\sigma^2(y)} \right]. \tag{12.4}$$

Легко убедиться, что g достигает максимума при минимальном значении показателя экспоненты или при условии

$$Q = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2 = \min, \tag{12.5}$$

то есть при наименьшем значении суммы квадратов отклонений $(y_i - \hat{y})$, отсюда и название – *метод наименьших квадратов*. Чтобы найти минимум многопараметрической функции, нужно приравнять нулю все частные производные этой функции по неизвестным параметрам a_j. Таким образом, из условия (12.5) найдем

$$\frac{\partial Q}{\partial a_j} = -2\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y})\frac{\partial \hat{y}}{\partial a_j} = 0$$

или

$$\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y})\frac{\partial \hat{y}}{\partial a_j} = 0. \tag{12.6}$$

Выполняя операцию (12.6) $k+1$ раз (по числу неизвестных коэффициентов), получим систему из $k+1$ уравнений, которую называют *системой нормальных уравнений.*

Продемонстрируем далее реализацию этого общего подхода в частных случаях. Начнем с простейшего.

12. 2. Линейное уравнение регрессии

Построим поле корреляции между y и x. Предположим, что анализ графика в первом приближении позволяет представить зависимость в виде уравнения прямой линии

$$\hat{y} = a_0 + a_1 x . \tag{12.7}$$

Необходимо найти коэффициенты a_0 и a_1. Выпишем частные производные

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial a_0} = 1, \quad \frac{\partial \hat{y}}{\partial a_1} = x . \tag{12.8}$$

В соответствии с (12.6) получим систему нормальных уравнений

$$\begin{cases} \sum\limits_{i=1}^{n}(y_i - a_0 - a_1 x_i) = 0 \\ \sum\limits_{i=1}^{n}(y_i - a_0 - a_1 x_i)x_i = 0 \end{cases} \text{ или } \begin{cases} a_0 n + a_1 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i = \sum\limits_{i=1}^{n} y_i, \\ a_0 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i + a_1 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 = \sum\limits_{i=1}^{n} x_i y_i . \end{cases} \tag{12.9}$$

Решая ее методом определителей, найдем

$$a_0 = \frac{\sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} y_i - \sum\limits_{i=1}^{n} x_i y_i \sum\limits_{i=1}^{n} x_i}{n\sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 - (\sum\limits_{i=1}^{n} x_i)^2}, \tag{12.10}$$

$$a_1 = \frac{n\sum\limits_{i=1}^{n} x_i y_i - \sum\limits_{i=1}^{n} x_i \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} y_i}{n\sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 - (\sum\limits_{i=1}^{n} x_i)^2}. \tag{12.11}$$

Имея в виду, что $(\sum\limits_{i=1}^{n} x_i)/n = \bar{x}$, а $(\sum\limits_{i=1}^{n} y_i)/n = \bar{y}$, значение a_0 проще найти из первого уравнения в системе (12.9).

$$a_0 = \bar{y} - a_1 \bar{x} \tag{12.12}$$

С учетом (12.12) другой формой записи уравнения регрессии (12.7) является

$$\hat{y} - \bar{y} = a_1 (x - \bar{x}). \tag{12.13}$$

Из уравнения (12.13) вытекает, что линия регрессии проходит через точку $(\bar{x}, \bar{y})$.

Обратимся снова к выражению (12.11) и выполним ряд простых преобразований.

$$a_1 = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i}{n}}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\bar{x}^2} = \frac{\frac{1}{n-1}\left(\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i}{n} \right)}{\frac{1}{n-1}(\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\bar{x}^2)} =$$

$$= \frac{\frac{1}{n-1}\left(\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i}{n} \right)}{S^2(x)} \cdot \frac{S(y)}{S(y)} = \frac{\frac{1}{n-1}\left(\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i}{n} \right)}{S(x)S(y)} \cdot \frac{S(y)}{S(x)} = r_{xy} \cdot \frac{S(y)}{S(x)}$$

Подставляя результат в (12.13), получим еще одну форму записи уравнения регрессии

$$\hat{y} - \bar{y} = r_{xy} \cdot \frac{S(y)}{S(x)}(x - \bar{x}). \tag{12.14}$$

Таким образом, выражения (12.7), (12.13) и (12.14) представляют собой три формы записи линейного уравнения регрессии y на x.

Следует помнить, что в отличие от функциональных связей, стохастическое уравнение регрессии, полученное например как y на x, не может быть преобразовано алгебраически к виду x на y. Так, простое алгебраическое преобразование выражения (12.14) к виду

$$(\hat{x} - \bar{x})_{\text{a}} = \frac{1}{r_{xy}} \cdot \frac{S(x)}{S(y)}(y - \bar{y}) \tag{12.15}$$

является некорректным. Покажем это. Найдем уравнение регрессии x на y.

$$\hat{x} = b_0 + b_1 y \tag{12.16}$$

Тогда, повторив все выкладки, вместо (12.15) получим

$$\hat{x} - \bar{x} = r_{xy} \frac{S(x)}{S(y)}(y - \bar{y}). \tag{12.17}$$

Сравнивая (12.15) с (12.17), легко убедиться, что алгебраическое обратное преобразование возможно только при $r_{xy} = \pm 1$, то есть при строго функциональной зависимости. При $|r_{xy}| < 1$ расхождения между $(\hat{x} - \bar{x})_{\text{a}}$ и $(\hat{x} - \bar{x})$ могут оказаться значительными.

Обычно при градуировке средств измерений измеряемая величина x задается на нескольких уровнях, на каждом уровне x фиксируются показания N выходного прибора и строится уравнение связи N на t. При измерениях по показаниям измерительного прибора находят значение t. При $|r_{Nt}| \neq 1$ в результате измерений вносятся дополнительные, иногда очень существенные погрешности.

Мерой тесноты связи между y и x служит коэффициент корреляции r_{xy}. При этом коэффициент корреляции считается значимым, если выполняется условие $r_{xy} > r_{\text{кр}} \equiv r_{1-\alpha/2,f}$, $f = n-2$ (см. раздел 11).

12.2.1. Адекватность уравнения регрессии

Качество уравнения регрессии, степень соответствия его экспериментальным данным, характеризует *дисперсия адекватности.*

$$S^2_{\text{ад}} = \frac{1}{n-l}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y})^2 \tag{12.18}$$

Здесь l – число связей, равное числу коэффициентов в уравнении регрессии. Для линейного уравнения $l = 2$. Гипотеза адекватности уравнения регрессии принимается, если $S^2_{\text{ад}}$ не превышает значимо дисперсию воспроизводимости $\sigma^2_0(y)$. Когда $\sigma^2_0(y)$ априори неизвестна, по результатам повторных измерений вычисляют выборочную дисперсию воспроизводимости S^2_0. Сравнение дисперсий проводится по критерию Фишера. Отношение $F = S^2_{\text{ад}} / S^2_0$ сравнивается с критическим (табличным) значением $F_{1-\alpha,f_{S^2_{\text{ад}}},f_{S^2_0}}$. Решающее правило имеет вид

$$F \le F_{1-\alpha,f_{S^2_{\text{ад}}},f_{S^2_0}} \Rightarrow H_0,\ F > F_{1-\alpha,f_{S^2_{\text{ад}}},f_{S^2_0}} \Rightarrow H_1. \tag{12.19}$$

При выполнении условия $S^2_{\text{ад}} < S^2_0$ принимается гипотеза адекватности. Принятие H_1 означает, что линейное уравнение регрессии не отражает реальную связь между переменными. Его следует изменить, переходя к полиному более высокой степени. Если повторные измерения не проводились, и нет возможности найти S^2_0, то для оценки качества уравнения регрессии можно сравнить дисперсию адекватности с общей дисперсией

$$S^2(y) = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2 .$$

В этом случае адекватность уравнения регрессии определяется простым неравенством $S^2_{\text{ад}} < S^2(y)$: рассеяние относительно уравнения регрессии меньше, чем относительно среднего.

Значимость неравенства определяется значимостью коэффициента корреляции r_{xy}, поскольку дисперсии $S^2_{\text{ад}}$ и $S^2(y)$ связаны между собой соотношением

$$S^2_{\text{ад}} = S^2(y)(1 - r^2_{xy}). \tag{12.20}$$

12.2.2. Доверительные границы линейного уравнения регрессии

Если гипотеза адекватности принимается, то переходят к заключительной стадии анализа и представления уравнения регрессии – вычислению его доверительных границ. Найденные по ограниченному числу измерений коэффициенты a_0 и a_1 являются в свою очередь только оценками их истинных значений. Погрешность a_0 перемещает линии регрессии вдоль оси y, а погрешность a_1 изменяет ее наклон. Общая дисперсия уравнения регрессии определяется выражением

$$S^2_{\hat{y}} = S^2_{\text{ад}}\left[\frac{1}{n} + \frac{(x-\bar{x})^2}{(n-1)S^2(x)}\right] \tag{12.21}$$

В соответствии со стандартной процедурой, доверительные границы уравнения регрессии можно рассчитать как

$$\varepsilon_{\hat{y}} = t_{1-\alpha/2,f} \cdot S_{\hat{y}} = t_{1-\alpha/2,f} \cdot S_{\text{ад}}\left[\frac{1}{n} + \frac{(x-\bar{x})^2}{(n-1)S^2(x)}\right]^{1/2}$$

Число степеней свободы для $S^2_{\hat{y}}$ составляет $f = n - l$.

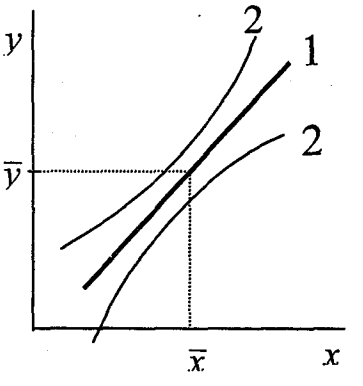


Рис. 12.1. Прямая (1) и доверительные границы (2) линейного уравнения регрессии.

Вычисляя $\varepsilon_{\hat{y}}$ в интервале значений x (от минимального до максимального) и откладывая $\pm\varepsilon_{\hat{y}}$ от соответствующих значений $\hat{y}$, строят «доверительный коридор» уравнения регрессии (или несколько коридоров – при разных уровнях значимости) – рис. 12.1.

Графическое изображение доверительных границ уравнения дает наглядное представление о возможных погрешностях при использовании его на практике.

12.2.3. Графический метод нахождения линейного уравнения регрессии

При анализе связи между двумя переменными часто проводят сглаживающую линию, осредняя результаты измерений «на глаз». Существуют многочисленные, но нестро-

гие рекомендации такого осреднения, оставляющие широкий простор для субъективных решений. Рассмотрим здесь метод, четко регламентирующий процедуру построения линейной зависимости между y и x. При этом получим зависимость, удовлетворяющую условию наименьших квадратов.

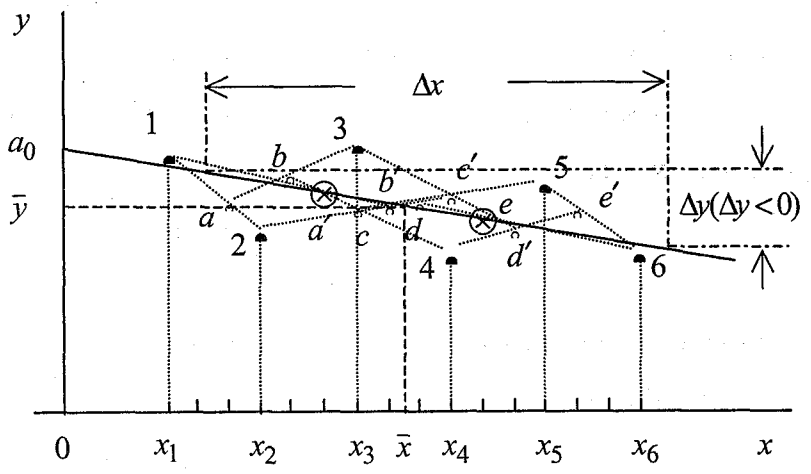


Рис. 12.2. Графический метод построения линии регрессии, удовлетворяющий МНК (Метод Асковица)

Метод применим, когда уровни фактора x_i, $i=\overline{1,n}$ равно отстоят друг от друга ($x_{i+1}-x_i=h=const$) и когда каждому значению x_i соответствует одно y_i или одинаковое число значений переменной y. В последнем случае на график можно нанести только $\bar{y}_i$. Процедура заключается в следующем.

Разделим каждый из интервалов по оси x на три части, равные $\frac{1}{3}h$. Пронумеруем все точки на графике – рис. 12.2. Соединим мысленно или легкой линией точки 1 и 2.

От точки 1 в направлении к точке 2 пройдем путь, проекция которого на ось x составит $\frac{2}{3}h$. Поставим здесь точку a. Теперь из точки a в направлении к точке 3 пройдем путь, соответствующий $\frac{2}{3}h$ вдоль оси x. Поставим точку b. Из точки b в направлении к точке 4 пройдем снова $\frac{2}{3}h$ вдоль оси x, получим точку c.

Аналогично получим далее точки d и e. Выделим последнюю точку e особо. Она в дальнейшем будет реперной точкой для построения линии регрессии. Выполним теперь те же операции, начав с точки 6: от точки 6 в направлении к точке 5 пройдем путь, соответствующий $\frac{2}{3}h$, поставим точку e'. Из точки e' в направлении к точке 4 пройдем тот же путь и поставим точку d'. Подобным образом получим точки c', b' и, наконец, a'.

Выделим точку a', это вторая реперная точка. Проведем теперь прямую через a' и e. Она и является линией регрессии.

- Для контроля правильности построения нанесите на график точку $(\bar{x},\bar{y})$. Эта точка должна лежать на прямой регрессии. На пересечении этой прямой с осью ординат (при $x=0$) отсчитаем значение a_0.. Значение a_1 представляет собой тангенс угла наклона полученной прямой к оси абсцисс. Однако не спешите вооружаться транспортиром. Значение коэффициента найдем как $a_1 = \Delta y / \Delta x$.

12.3. Полиномиальное нелинейное уравнение регрессии (Параболическая регрессия)

Если линейное уравнение регрессии оказывается неадекватным (или если анализ поля корреляции свидетельствует об определенно нелинейной связи между исследуемыми случайными величинами), то следует выбрать более сложное выражение, например полином более высокой степени. Обычно рекомендуют использовать метод последовательных уточнений, вводя в уравнение параболические слагаемые, содержащие x^2, x^3 и т. д.

Добавим к линейному уравнению слагаемое, пропорциональное x^2

$$\hat{y}_2 = b_0 + b_1 x + b_2 x^2. \tag{12.22}$$

Теперь из условия $\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_2)\frac{\partial \hat{y}_2}{\partial b_j} = 0$ при $\frac{\partial \hat{y}_2}{\partial b_0} = 1$, $\frac{\partial \hat{y}_2}{\partial b_1} = x$, $\frac{\partial \hat{y}_2}{\partial b_2} = x^2$ получим систему нормальных уравнений с тремя неизвестными

$$\begin{cases} b_0 n + b_1 \sum_{i=1}^{n} x_i + b_2 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 = \sum_{i=1}^{n} y_i, \\ b_0 \sum_{i=1}^{n} x_i + b_1 \sum_{i=1}^{n} x_1^2 + b_2 \sum_{i=1}^{n} x_i^3 = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i, \\ b_0 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^3 + b_2 \sum_{i=1}^{n} x_i^4 = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 y_i. \end{cases} \tag{12.23}$$

Замена обозначений неизвестных коэффициентов a_j на b_j произведена здесь с целью подчеркнуть то обстоятельство, что численные значения коэффициентов в параболическом уравнении будут другими ($b_0 \neq a_0, b_1 \neq a_1$).

Для вычисления коэффициентов b_0, b_1, b_2 по выборкам необходимо рассчитать $\sum_{i=1}^{n} x_i, \sum_{i=1}^{n} x_i^2, \sum_{i=1}^{n} x_i^3, \sum_{i=1}^{n} x_i^4, \sum_{i=1}^{n} y_i, \sum_{i=1}^{n} x_i y_i, \sum_{i=1}^{n} x_i^2 y_i$. Полученное уравнение для $\hat{y}_2$ следует проверить на адекватность. Дисперсия адекватности $S^2_{\text{ад},2} = \frac{1}{n-3}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_2)^2$ снова сравнивается с дисперсией воспроизводимости $S_0^2(y)$ по критерию Фишера.

Примечание

При отсутствии сведений о $S_0^2(y)$ можно сравнить $S^2_{\text{ад},2}$ с $S^2_{\text{ад},1}$ – дисперсией адекватности линейного уравнения. Целесообразность включения квадратического слагаемого определяется тем, значимо ли уменьшается дисперсия адекватности при усложнении уравнения. По критерию Фишера проверяется однородность дисперсий $F = \dfrac{S^2_{\text{ад},1}}{S^2_{\text{ад},2}} \lessgtr F_{1-\alpha, f_{S^2_{\text{ад},1}}, f_{S^2_{\text{ад},2}}}$. Если $S^2_{\text{ад},1} > S^2_{\text{ад},2}$ (значимо больше), то новое уравнение лучше отражает связь между x и y. При $S^2_{\text{ад},1} \le S^2_{\text{ад},2}$ введение нового слагаемого не повышает качества уравнения регрессии, целесообразно остановиться на предыдущем (линейном) варианте зависимости.

Если квадратическое уравнение неадекватно, то добавляют кубическое слагаемое, задавая уравнение регрессии полиномом

$$\hat{y}_3 = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + c_3 x^3 .. \tag{12.24}$$

Система нормальных уравнений теперь имеет вид

$$\begin{cases} c_0 n + c_1 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i + c_2 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 + c_3 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^3 = \sum\limits_{i=1}^{n} y_i, \\ c_0 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i + c_1 \sum\limits_{i=1}^{n} x_1^2 + c_2 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^3 + c_3 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^4 = \sum\limits_{i=1}^{n} x_i y_i, \\ c_0 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 + c_1 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^3 + c_2 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^4 + c_3 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^5 = \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 y_i, \\ c_0 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^3 + c_1 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^4 + c_2 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^5 + c_3 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^6 = \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^3 y_i. \end{cases} \tag{12.25}$$

Вычислив коэффициенты c_j,, проверяют $\hat{y}_3$ на адекватность одним из указанных ранее методов. В зависимости от принятой гипотезы либо продолжают усложнять уравнение, либо возвращаются к предыдущему, принимая последнее в качестве окончательного.

Следует подчеркнуть, что повышение степени полинома совсем необязательно ведет к улучшению качества уравнения регрессии. При ограниченном объеме выборки n дисперсия адекватности ведет себя неоднозначно – рис. 12.3.

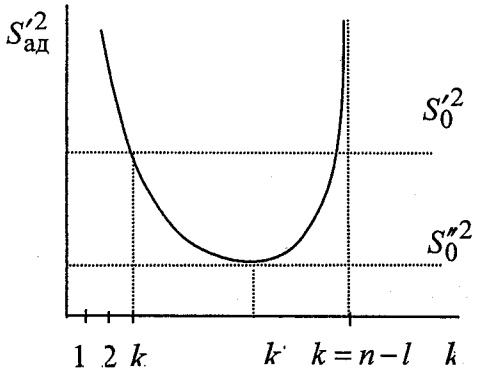


Рис. 12.3. Изменение дисперсии адекватности при увеличении степени полинома k.

С увеличением степени полинома числитель в формуле дисперсии адекватности обычно убывает, но с увеличением l уменьшается число степеней свободы в знаменателе.

Выбор k определяется соотношением между $S^2_{\text{ад}}$ и S^2_0. Если значение S^2_0 велико (S'^2_0), то можно ограничиться небольшой степенью полинома k'. При малом S''^2_0 степень полинома может быть повышена до k''. При $k = n-1$ знаменатель в формуле дисперсии адекватности равен нулю и $S^2_{\text{ад}} \to \infty$ при любом (не нулевом) значении суммы квадратов отклонений.

Для выбранного уравнения регрессии оценивается теснота функциональной связи. С этой целью (по аналогии с коэффициентом корреляции для линейной связи) вычисляют корреляционное отношение θ, которое теперь, в отличие от раздела 11, находят как

$$\theta_{xy} = \sqrt{1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2}} \qquad (12.26)$$

Чем ближе 0 к единице, тем больше вклад функциональной составляющей связи $y = y(x)$. Подробнее свойства корреляционного отношения рассмотрены в разделе 11.

Программы реализации систем линейных уравнений на ПК можно найти в пакетах прикладных программ (например, "SURFER" или "STATISTICA").

Упражнение Докажите, что для линейного уравнения регрессии $\theta_{xy} = \sqrt{r^2_{xy}}$.

12.3.1. «Подводные камни» регрессионного анализа

До недавнего времени необходимость вычисления заново всех коэффициентов полинома при повышении его степени казалась серьезным недостатком метода последовательных усложнений. С появлением доступной вычислительной техники проблема громоздкости расчетов перестала быть актуальной. Однако остается еще ряд обстоятельств, которые следует иметь ввиду при нахождении и использовании уравнений регрессии.

Одно из них связано с возможностью встречи с *плохо обусловленной* системой нормальных уравнений. *Плохо обусловленной* называют систему уравнений, в которой небольшие изменения свободных членов или множителей при неизвестных приводят к резкому изменению корней системы. Проиллюстрируем это на простом примере системы из двух линейных уравнений с двумя неизвестными. Запишем и решим ее в двух вариантах с минимальными различиями:

Вариант 1	вариант 2
$b_0 + 10b_1 = 11$	$b'_0 + 10b'_1 = 11{,}1$
$10b_0 + 101b_1 = 111$	$10b'_0 + 101b'_1 = 111$
$b_0 = 1,\ b_1 = 1$	$b'_0 = 11{,}1;\ b'_1 = 0$

Как видно, изменение одного числа в системе меньше, чем на один процент, привело к серьезному изменению коэффициентов b_0 и b_1. Очевидно, что в силу случайности результатов измерений и/или возможных ошибок при вычислениях или округлении, численные значения сумм в системе нормальных уравнений могут существенно изменяться. В теории разработаны приемы исследования систем уравнений на плохообусловленность, однако широкого практического применения они еще не нашли.

Другой «подводный камень» заключен в уравнениях регрессии, содержащих полиномы высоких степеней. Такие уравнения могут довольно точно соответствовать результатам измерений, то есть характеризоваться малыми дисперсиями адекватности, однако в интервалах между экспериментальными точками кривые регрессии могут давать локальные максимумы и минимумы, не вытекающие из физической природы явления.

12.3.2. Некоторые упрощения

В ряде случаев процедура вычислений может быть существенно упрощена. Например, если значения x являются равноотстоящими ($x_{i+1} - x_i = h = const$) и если при каждом x_i выполнено одинаковое число измерений ($n_i = const$), то, центрируя x_i, то есть, переходя к $\widetilde{x}_i = x_i - \bar{x}$, получим, что все суммы нечетных степеней $\sum_{i=1}^{n} \widetilde{x}_i, \sum_{i=1}^{n} \widetilde{x}_i^3, \sum_{i=1}^{n} \widetilde{x}_i^5 \ldots = 0$. Тогда (опуская далее значок [~] при $\widetilde{x}$) для квадратического уравнения регрессии вместо (12.23) получим

$$\begin{cases} b_0 n + b_2 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 = \sum_{i=1}^{n} y_i, \\ b_1 \sum_{i=1}^{n} x_1^2 = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i, \\ b_0 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b_2 \sum_{i=1}^{n} x_i^4 = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 y_i. \end{cases} \tag{12.27}$$

Таким образом, решение (12.27) сводится к решению системы из двух уравнений (первое и третье), коэффициент b_1 находится независимо от других. Для кубического уравнения регрессии система из четырех нормальных уравнений фактически превращается в две системы из двух линейных уравнений каждая.

$$\begin{cases} c_0 n + c_2 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + = \sum_{i=1}^{n} y_i, \\ c_0 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + c_2 \sum_{i=1}^{n} x_i^4 = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 y_i. \end{cases} \quad \begin{cases} c_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + c_3 \sum_{i=1}^{n} x_i^4 = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i, \\ c_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^4 + c_3 \sum_{i=1}^{n} x_i^6 = \sum_{i=1}^{n} x_i^3 y_i. \end{cases} \tag{12.28}$$

12.4. Полиномы Чебышева

Метод последовательного усложнения уравнения регрессии путем повышения степени полинома оказывается весьма эффективным, если воспользоваться ортогональными полиномами Чебышева. В вычислительном плане достоинства этой процедуры проявляются в том, что с повышением степени полинома значения коэффициентов, найденные на предыдущих стадиях сохраняются. Метод реализуется следующим образом. Равноотстоящие значения x_i приводятся к безразмерной последовательности натуральных чисел $\tilde{x}_i = 1;2;3;...n$ путем преобразования $\tilde{x} = \frac{x_i - x_1}{h} + 1, \quad h = x_{i+1} - x_i$ (далее снова символ при $\tilde{x}$ опустим). Уравнение регрессии записывается в виде

$$\hat{y} = b_0 P_0(x) + b_1 P_1(x) + ... + b_k P_k(x) \tag{12.29}$$

или сокращенно

$$\hat{y} = \sum_{j=0}^{k} b_j P_j(x). \tag{12.30}$$

Здесь P_j, $j = \overline{0,k}$ в свою очередь являются полиномами, ортогональными друг другу, то есть удовлетворяющими условию $\sum_{i=1}^{n} P_j(x_i) \cdot P_u(x_i) = 0, \quad u \neq j.$

Полиномы P_j вычисляются по формулам

$$P_0(x) = 1, \tag{12.31а}$$

$$P_1(x) = x - \frac{n+1}{2}, \tag{12.31б}$$

$$P_2(x) = x^2 - (n+1)x + \frac{(n+1)(n+2)}{6}, \tag{12.31в}$$

$$P_3(x) = x^3 - \frac{3(n+1)}{2}x^2 + \frac{6n^2 + 15n + 11}{10}x - \frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{20}. \tag{12.31г}$$

В общем случае полином степени $k+1$ вычисляется по рекуррентной формуле

$$P_{k+1}(x) = P_k(x)P_1(x) - \frac{k^2(n^2 - k^2)}{4(4k^2 - 1)} P_{k-1}(x). \tag{12.31}$$

Коэффициенты b_j находятся независимо друг от друга по формуле

$$b_j = \sum_{i=1}^{n} y_i P_j(x_i) / \sum_{i=1}^{n} P_j^2(x_i). \tag{12.32}$$

В частности, поскольку $P_0(x) \equiv 1$, а $\sum_{i=1}^{n} P_0^2(x) = n$, $b_0 = (\sum_{i=1}^{n} y_i)/n$, свободный член уравнения регрессии равен среднему значению $\bar{y}$. Подставив в (12.29) вычисленные значения b_j и выражение полиномов в виде (12.31), можно объединить слагаемые с одинаковыми степенями переменной и привести (12.29) к каноническому виду параболической

регрессиию $\hat{y} = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + ... + a_k x^k$. Естественно, что процедура усложнения уравнения регрессии должна сопровождаться проверкой его на адекватность, как это было показано ранее.

Значения сумм $\sum_{i=1}^{n} P_j^2(x_i)$ определяется только длиной ряда n. Поэтому их можно рассчитать заранее. Общая формула имеет вид

$$\sum_{i=1}^{n} P_j^2(x_i) = \frac{(k!)^2 \cdot n \cdot \prod_{\nu=1}^{k}(n^2 - \nu^2)}{2^{2k}(2k+1)[(2k-1)!!]^2}. \qquad (12.33)$$

В частности,

$$\sum_{i=1}^{n} P_1^2(x) = \frac{n(n-1)^2}{12}. \qquad (12.33а)$$

$$\sum_{i=1}^{n} P_2^2(x_i) = \frac{n(n^2-1)(n^2-4)}{180}, \qquad (12.33б)$$

$$\sum_{i=1}^{n} P_3^2(x_i) = \frac{n(n^2-1)(n^2-4)(n^2-9)}{2800}, \qquad (12.33в)$$

$$\sum_{i=1}^{n} P_4^2(x_i) = \frac{n(n^2-1)(n^2-4)(n^2-9)(n^2-16)}{44100}. \qquad (12.33г)$$

Запись выражений (12.31) и процедуру вычислений можно несколько упростить, если еще раз преобразовать переменную x. Перейдем к центрированной переменной $\tilde{x}_i = x_i - \bar{x}$. Поскольку x_i принимает значения 1,2,...n, $\bar{x} = (n+1)/2$, то $\tilde{x}_i = x_i - (n+1)/2$, $\tilde{x}_i \in [-(n-1)/2, (n-1)/2]$. Если n нечетное число, то имеем последовательность ...-3,-2,-1,0,1,2,3,... При четном n – последовательность ...-3,5;-2,5;-1,5;-0,5;0,5;1,5;2,5;...Теперь выражения (12.31) принимают вид

$$P_0(\tilde{x}) = 1, \qquad (12.34а)$$

$$P_1(\tilde{x}) = \tilde{x}, \qquad (12.34б)$$

$$P_2(\tilde{x}) = \tilde{x}^2 - \overline{\tilde{x}^2}, \qquad (12.34в)$$

$$P_3(\tilde{x}) = \tilde{x}^3 - \frac{\tilde{x}}{5}(9\overline{\tilde{x}^2} - 1). \qquad (12.34г)$$

При этом общая рекуррентная формула сохраняется.

$$P_{k+1}(\tilde{x}) = P_1(\tilde{x})P_k(\tilde{x}) - \frac{k^2(n^2-k^2)}{4(4k^2-1)}P_{k-1}(\tilde{x}) \qquad (12.34)$$

Значение $\overline{\tilde{x}^2}$ находится из простого соотношения $\overline{\tilde{x}^2} = (n^2-1)/12$. Поскольку преобразование переменной не изменяет численные значения полиномов $P_j(x) = P_j(\tilde{x})$, то формулы (12.32) и (12.33) также сохраняются.

12.5. Трансцендентная регрессия

Ранее было показано, что с повышением степени полинома уменьшается число степеней свободы дисперсии адекватности. В то же время, анализ поля корреляции или теоретические предпосылки часто позволяют представить изучаемую зависимость аналитическими выражениями, содержащими меньше неизвестных коэффициентов – экспоненциальными, дробно-степенными, логарифмическими и т.п. Например,

$$\hat{y} = a_0 \cdot e^{a_1 x}, \quad \hat{y} = a_0 x^{a_1}, \quad \hat{y} = a_0 x^{a_1} \cdot e^{-a_2 x}. \tag{12.35}$$

Однако при непосредственной подстановке выражений (12.35) и производных по a_j в условие $\sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}) \frac{\partial \hat{y}}{\partial a_j} = 0$ приходят к системам *трансцендентных нормальных уравнений.* Аналитическое решение их оказывается невозможным. Для достижения цели используется следующий прием.

Рассмотрим, например, второе из выражений (12.35). Прологарифмируем его

$$\ln \hat{y} = \ln a_0 + a_1 \ln x. \tag{12.36}$$

Введем следующие обозначения: $\hat{z} = \ln \hat{y}$, $b_0 = \ln a_0$, $b_1 = a_1$, $u = \ln x$. Тогда вместо (12.36) можно записать уравнение в привычном виде

$$\hat{z} = b_0 + b_1 u. \tag{12.37}$$

Соответственно получим систему нормальных уравнений, аналогичную (12.23)

$$\begin{cases} n b_0 + b_1 \sum_{i=1}^{n} u_i = \sum_{i=1}^{n} z_i, \\ b_0 \sum_{i=1}^{n} u_i + b_1 \sum_{i=1}^{n} u_i^2 = \sum_{i=1}^{n} u_i z_i. \end{cases} \tag{12.38}$$

Здесь все суммы вычисляются с учетом того, что $u_i = \ln x_i$, $z_i = \ln y_i$. Решая (12.38), находим b_0 и b_1. Далее обратным преобразованием получим $a_0 = e^{b_0}$, в этом конкретном случае $a_1 = b_1$.

Проверка уравнения на адекватность осуществляется обычным способом (рассмотренным выше). Следует иметь в виду важное обстоятельство. Наименьшая сумма квадратов отклонений обеспечивается здесь не для регрессии y на x, а для регрессии z на u, то есть для разности логарифмов y_i и $\hat{y}$. В силу нелинейности связи между y и $\ln y$ дисперсия адекватности оказывается не минимальной.

12.6. Множественная регрессия

Вернемся снова к более общей задаче отыскания зависимости исследуемой величины y от нескольких факторов x_j, $j = \overline{1, k^*}$. Зависимость y от двух факторов представ-

ляет собой поверхность в трехмерном пространстве, зависимость y от трех и более факторов – гиперповерхность в многомерном пространстве. Их называют *поверхностями отклика,* а соответствующее уравнение регрессии называют *функциями отклика.* Чаще всего в качестве аппроксимирующих функций используют полиномы. При этом для упрощения выкладок переменные преобразуют так, чтобы полиномы сводились к линейной форме

$$\hat{y} = a_0 + \sum_{j=1}^{k} a_j x_j. \tag{12.39}$$

Здесь через x_j, $j=\overline{1,k}$ обозначены действительные физические факторы в произвольных степенях и произвольных комбинациях. Например, $x_1 = A$, $x_2 = B$, $x_3 = C$, $x_4 = AB^{-1}$, $x_5 = B\sqrt{C}$ и т. д. Выбор факторов и их комбинаций определяется априорной информацией и задачами исследования.

Разумеется, рассматриваемые далее суммы представляют собой соответственно $\sum_{i=1}^{n} x_{1i} = \sum_{i=1}^{n} A_i$, $\sum_{i=1}^{n} x_{2i} = \sum_{i=1}^{n} B_i$, ..., $\sum_{i=1}^{n} x_{4i} = \sum_{i=1}^{n} A_i B_i^{-1}$ и т.д. Эти суммы должны быть заранее рассчитаны. Удобство уравнения (12.39) состоит в простоте вычисления производных: $\frac{\partial \hat{y}}{\partial a_0} = 1$ и $\frac{\partial \hat{y}}{\partial a_j} = x_j$. Элементарно получается и система нормальных уравнений

$$\begin{cases} a_0 n + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_{1i} + a_2 \sum_{i=1}^{n} x_{2i} + \ldots + a_k \sum_{i=1}^{n} x_{ki} = \sum_{i=1}^{n} y_i, \\ a_0 \sum_{i=1}^{n} x_{1i} + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_{1i}^2 + a_2 \sum_{i=1}^{n} x_{1i} x_{2i} + \ldots + a_k \sum_{i=1}^{n} x_{1i} x_{ki} = \sum_{i=1}^{n} x_{1i} y_i, \\ a_0 \sum_{i=1}^{n} x_{ji} + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_{ji} x_{1i} + a_2 \sum_{i=1}^{n} x_{ji} x_{2i} + \ldots + a_k \sum_{i=1}^{n} x_{ji} x_{ki} = \sum_{i=1}^{n} x_{ji} y_i, \\ a_0 \sum_{i=1}^{n} x_{ki} + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_{ki} x_{1i} + a_2 \sum_{i=1}^{n} x_{ki} x_{2i} + \ldots + a_k \sum_{i=1}^{n} x_{ki}^2 = \sum_{i=1}^{n} x_{ki} y_i. \end{cases} \tag{12.40}$$

Система (12.40) решается обычными методами. Значения коэффициентов a_j подставляются в (12.39), а от закодированных x_j можно перейти к исходным факторам и их взаимодействиям.

С целью унификации и формализации процедуры вычислений систему (12.40) часто преобразуют. Введем новые безразмерные переменные: $\tilde{x}_{ji} = \frac{x_{ji} - \bar{x}_j}{S(x_j)}$, $\tilde{y}_i = \frac{y_i - \bar{y}}{S(y)}$,

$i=\overline{1,n}$, $j=\overline{1,k}$ где $S^2(x_j) = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_{ji} - \bar{x}_j)^2}{n-1}$, $S^2(y) = \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2}{n-1}$.

Для преобразованных переменных справедливы соотношения $\sum_{i=1}^{n} \tilde{x}_{ji} = 0$ и $\sum_{i=1}^{n} \tilde{y}_i = 0$.

Следовательно, первое уравнение из системы (12.40) исключается. Разделим левые и правые части остальных уравнений на $(n-1)$. Тогда, имея ввиду, что $\frac{\sum_{i=1}^{n} \tilde{x}_{ji}^2}{n-1} = S^2(\tilde{x}_j) = 1$, $\frac{\sum_{i=1}^{n} \tilde{y}_i^2}{n-1} = S^2(\tilde{y}) = 1$, $\frac{\sum_{i=1}^{n} \tilde{x}_{ji}\tilde{x}_{ui}}{n-1} = r_{x_j x_u} \equiv r_{ju}$, $\frac{\sum_{i=1}^{n} \tilde{x}_{ji} y_i}{n-1} = r_{x_j y} \equiv r_{jy}$, где r_{ju} и r_{jy} – коэффициенты корреляции между x_j и x_u и x_j и y, получим следующую систему

$$\begin{cases} b_1 r_{11} + b_2 r_{12} + b_3 r_{13} + \ldots + b_k r_{1k} = r_{1y}, \\ b_1 r_{21} + b_2 r_{22} + b_3 r_{23} + \ldots + b_k r_{2k} = r_{2y}, \\ b_1 r_{j1} + b_2 r_{j2} + b_3 r_{j3} + \ldots + b_k r_{jk} = r_{jy}, \\ b_1 r_{k1} + b_2 r_{k2} + b_3 r_{k3} + \ldots + b_k r_{kk} = r_{ky}. \end{cases} \tag{12.41}$$

Для решения системы (12.41) следует рассчитать все парные коэффициенты корреляции r_{ju}, r_{jy}. Заметим, что $r_{ju} = r_{uj}$, а $r_{jj} = 1$. Приведем решение системы (12.41) с помощью определителей. Выпишем снова, как и в разделе 11, матрицу коэффициентов корреляции

$$\begin{bmatrix} 1 & r_{12} & r_{13} \ldots r_{1n} & r_{1y} \\ r_{21} & 1 & r_{23} \ldots r_{2n} & r_{2y} \\ r_{k1} & r_{k2} & r_{k3} \ldots 1 & r_{ky} \\ r_{1y} & r_{2y} & r_{3y} \ldots r_{ny} & 1 \end{bmatrix}. \tag{12.42}$$

Искомые коэффициенты b_j находятся как

$$b_j = \frac{D_{jy}}{D_{yy}}, \tag{12.43}$$

где D_{jy} – адъюнкта определителя матрицы (12.42), полученная исключением из нее j-той строки и последнего столбца, а D_{yy} – минор, получаемый исключением последней строки и последнего столбца.

Обратный переход к a_j осуществляется по соотношениям

$$a_j = b_j \frac{S(y)}{S(x_j)}, \; j = \overline{1,k}, \; a_0 = \bar{y} - \sum_{j=1}^{k} b_j \bar{x}_j.$$

Полученная функция отклика проверяется на адекватность.

Коэффициент множественной корреляции R можно вычислить теперь по формуле

$$R = \sqrt{\sum_{j=1}^{k} b_j r_{jy}} \,. \tag{12.44}$$

Напомним, что значение R заключено в интервале $0 \le R \le 1$. При малых n значения R, вычисленные по формуле (12.44), оказываются смещенными (завышенными). Для получения скорректированного значения R^* рекомендуют использовать формулу

$$R^* = \sqrt{1-(1-R^2)\frac{n-1}{n-k-1}} \,. \tag{12.45}$$

Разумеется, при близких к нулю или отрицательных значениях подкоренного выражения в (12.45) коэффициент множественной корреляции становится незначимым.

Дополнения к 12.6

Часто поля метеорологических величин представляют значениями этих величин, интерполированными в узлах регулярной сетки – двумерной или трехмерной. В этих случаях функцию отклика удобно находить с помощью полиномов Чебышева. Рассмотрим этот подход сразу на примере прямоугольной трехмерной сетки отклика. Обозначим координатные оси x_1, x_2, x_3 как x_l, $l = \overline{1,3}$. Перейдем к безразмерным и центрированным координатам $\tilde{x}_l$, как это предложено выше в 12.3.4, $\tilde{x}_{li} = x_{li} - \bar{x}_l$. Частные полинома Чебышева по каждой из переменных обозначим $P_\mu(\tilde{x}_1)$, $P_\nu(\tilde{x}_2)$ и $P_\pi(\tilde{x}_3)$, здесь μ, ν и π означают степень полиномов, $\mu = \overline{0,k_1}$, $\nu = \overline{0,k_2}$, $\pi = \overline{0,k_3}$. В самом общем варианте возможно, что $k_1 \ne k_2 \ne k_3$.

Функция отклика должна содержать $k = (k_1+1)(k_2+1)(k_3+1)$ слагаемых, включая частные полиномы по каждому фактору (координате), их парные и тройные взаимодействия (произведения). В общем виде

$$\hat{y} = b_{1\mu 2\nu 3\pi} \sum_{\mu=0}^{k_1} \sum_{\nu=0}^{k_2} \sum_{\pi=0}^{k_3} P_\mu(\tilde{x}_1) P_\nu(\tilde{x}_2) P_\pi(\tilde{x}_3). \tag{12.46}$$

В такой форме полиномы по любой координате и парные взаимодействия представлены как частные случаи тройных взаимодействий.

Например, $P_\mu(x_1) = P_\mu(\tilde{x}_1) \cdot P_0(\tilde{x}_2) \cdot P_0(\tilde{x}_3)$ или $P_\nu(\tilde{x}_2) \cdot P_\pi(\tilde{x}_3) = P_\nu(\tilde{x}_2) \cdot P_\pi(\tilde{x}_3) \cdot P_0(x_1)$ (поскольку $P_0(x_1) = P_0(x_2) = P_0(x_3) = 1$). Соответственно, любая пара индексов 1μ, 2ν, 3π при коэффициентах b исключается, если μ, ν или π равны нулю.

Если рассматривать любую комбинацию $P_j = P_\mu(\tilde{x}_1) P_\nu(\tilde{x}_2) P_\pi(\tilde{x}_3)$, $j = \overline{1,k}$ как новый полином, то при регулярной сетке и центрированных переменных все P_j оказываются взаимно ортогональными. Это позволяет для b_j воспользоваться формулой, аналогичной (12.32),

$$b_{1\mu 2\nu 3\pi} = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i \cdot P_\mu(x_{1i}) \cdot P_\nu(x_{2i}) \cdot P_\pi(x_{3i})}{\sum_{i=1}^{n} \left[P_\mu(x_{1i}) \cdot P_\nu(x_{2i}) \cdot P_\pi(x_{3i})\right]^2}. \tag{12.47}$$

При $\mu = \nu = \pi = 0$ получим, как и следовало ожидать, $b_0 = \left(\sum_{i=1}^{n} y_i\right) / n$. При переходе к двумерной сетке в выражениях (12.46), (12.47) достаточно положить $P_\pi(x_3) = 1$.

12.7. Интерполяция

Если анализируются результаты измерений, выполненных с высокой точностью, либо результаты численного интегрирования дифференциальных уравнений, то аппроксимация данных аналитическими выражениями сводится к интерполяции – получению функции, позволяющей найти значение исследуемой величины в любой точке факторного пространства. Ограничимся здесь только рассмотрением однофакторных зависимостей.

Пусть на различных уровнях фактора x, организованных таким образом, что $x_i < x_{i+1}$, $i = \overline{1,n}$, имеются значения исследуемой величины y_i. Задача заключается в том, чтобы найти такую аппроксимирующую функцию $y(x)$, для которой выполнялось бы условие $y(x_i) = y_i$, то есть функция проходила бы через все точки (x_i, y_i). Радикальный подход состоит в использовании полиномов вида

$$y(x) = \sum_{j=0}^{k} a_j x^j. \tag{12.48}$$

Чтобы найти неизвестные коэффициенты a_j, уравнение (12.48) следует записать n раз, то есть для каждой пары значений x_i, y_i

$$y_i = \sum_{j=0}^{k} a_j x_i^j, \quad i = \overline{1,n}, \quad j = \overline{0,k}. \tag{12.49}$$

Если $k+1 < n$, то система (12.49) решается методом наименьших квадратов (см. выше). При $k+1 = n$ решение осуществляется алгебраическими методами. Однако, когда n велико, решение системы (12.49) оказывается довольно громоздким. На практике чаще используют специальные методы полиномиальной интерполяции.

12.7.1. Интерполяционный полином Лагранжа

Полином Лагранжа степени $k = n-1$ или $L_k(x) = y(x)$ можно представить в виде

$$y(x) = \sum_{j=1}^{n} y_j P_j(x), \tag{12.50}$$

$$P_j(x) = \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{n} \frac{(x - x_i)}{(x_j - x_i)}. \tag{12.51}$$

Здесь для компактности записи одновременно используются индексы i и j, $i, j = \overline{1,n}$. Результат измерения в узле x_j обозначим через y_j, x_i – остальные узлы разбиения. При условии $i = j$ в (12.51) из произведения должен быть исключен весь сомножитель $(x - x_i)/(x_j - x_i)$, формула (12.50) справедлива для всего отрезка $[x_1, x_n]$. Если в выраже-

ния (12.50), (12.51) подставить все значения y_j и x_j и выполнить все алгебраические преобразования, то в итоге можно получить формулу вида (12.48).

Когда $n = 2$ выражения (12.50), (12.51) легко преобразуются в формулу линейной интерполяции

$$y(x) = y_1 \frac{x_2 - x}{x_2 - x_1} + y_2 \frac{x - x_1}{x_2 - x_1}. \qquad (12.52)$$

Выражение (12.52) можно записать в более привычной форме

$$y(x) = y_1 + \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1}(x - x_1). \qquad (12.52а)$$

В общей случае, заменяя в (12.52) y_1, x_1 на y_i, x_i, а y_2, x_2 на y_{i+1}, получим формулу так называемой *кусочно-линейной* интерполяции.

$$y(x) = y_i \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_1} + y_{i+1} \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}, \quad x_i \le x \le x_{i+1} \qquad (12.53)$$

Полиномы вида (12.48), (12.50) и другие, подобные им, обладают тем серьезным недостатком, что при больших n в интервалах между точками $[x_i, x_{i+1}]$ могут появляться локальные экстремумы, не соответствующие реальному изменению физической величины.

12.7 2. Интерполяционные сплайны

Интерполяционный полином Лагранжа (как и уравнение регрессии) распространяется на диапазон значений фактора от x_1 до x_n. Говорят, он имеет одинаковую гладкость на всем отрезке $[x_1, x_n]$. Однако реальная зависимость y от x не обязательно обладает этим свойством. В таких случаях более точной является так называемая *кусочная* интерполяция, то есть подбор интерполяционных функций для различных интервалов. При этом, правда, возникает проблема склейки этих функций, чтобы исключить появление разрывов самой функции и ее производных. Такие функции называют *сплайнами*. Широкое распространение получили *кусочно-кубические сплайны*. Процедура построения кубического сплайна состоит в следующем.

Пусть снова имеется сетка с узлами x_i, $i = \overline{1,n}$ такая, что $x_1 < x_2 < \ldots < x_n$. Положим далее, что в каждом узле имеется значение y_i. Построим для каждого интервала $[x_{i-1}, x_i]$, $i = \overline{2,n}$ кубические полиномы вида

$$y_{i-1}(x) = a_{0i} + a_{1i-1}(x - x_{i-1}) + a_{2i-1}(x - x_{i-1})^2 + a_{3i-1}(x - x_{i-1})^3, \; x_{i-1} \le x \le x_i. \qquad (12.54)$$

Потребуем, чтобы функция $y(x)$ удовлетворяла следующим условиям

$$y(x_i) = y_i,\ i = \overline{1,n}, \tag{12.55}$$

$$y'_{i-1}(x_i) = y'_i(x_i),\ i = \overline{2,n-1}, \tag{12.56}$$

$$y''_{i-1}(x_i) = y''_i(x_i),\ i = \overline{2,n-1}. \tag{12.57}$$

Условие (12.5.5) определяет равенство реальных и интерполируемых значений функции во всех узлах сетки. Условия (12.56) и (12.57) определяют непрерывность первых и вторых производных в точках перехода от одного интервала к другому.

Для того чтобы решить задачу «в лоб», следует составить систему из $4(n-1)$ уравнений с таким же числом неизвестных коэффициентов $a_{k,i}$, $k = \overline{0,3}$. Очевидно, что это очень громоздкий путь. Обычно поступают иначе. Вторая производная от $y(x)$ на любом интервале, как легко показать, является линейной функцией x. Действительно,

$$y''_{i-1}(x) = \frac{d^2}{dx^2}\left[a_{0i-1} + a_{1i-1}(x - x_{i-1}) + a_{2i-1}(x - x_{i-1})^2 + a_{3i-1}(x - x_{i-1})^3\right] = 6a_{3i-1}x.$$

Обозначим неизвестные пока значения вторых производных в узлах сетки $y''_i(x_i) = m_i$. Тогда для интерполяции $y''(x)$ в пределах любого интервала $h_{i-1} = x_i - x_{i-1}$, в соответствии с выражением (12.53), имеем

$$y''(x) = m_{i-1}\frac{(x_i - x)}{h_{i-1}} + m_i\frac{(x - x_{i-1})}{h_{i-1}}. \tag{12.58}$$

Дважды проинтегрировав выражение (12.58), получим

$$y(x) = m_{i-1}\frac{(x_i - x)^3}{6h_{i-1}} + m_i\frac{(x - x_{i-1})^3}{6h_{i-1}} + A\frac{x_i - x}{h_{i-1}} + B\frac{x - x_{i-1}}{h_{i-1}}. \tag{12.59}$$

Постоянные интегрирования A и B легко найти, используя граничные условия: $y(x) = y_{i-1}$ при $x = x_{i-1}$ и $y(x) = y_i$ при $x = x_i$

$$A = y_{i-1} - m_{i-1}\frac{h_{i-1}^2}{6}, \tag{12.60}$$

$$B = y_i - m_i\frac{h_{i-1}^2}{6}. \tag{12.61}$$

Подставляя (12.60), (12.61) в (12.59), окончательно получим

$$y(x) = m_{i-1}\frac{(x_i - x)^3}{6h_{i-1}} + m_i\frac{(x - x_{i-1})^3}{6h_{i-1}} + \left(y_{i-1} - \frac{m_{i-1}\cdot h_i^2}{6}\right)\cdot\frac{(x_i - x)}{h_{i-1}} + \left(y_i - \frac{m_i\cdot h_{i-1}^2}{6}\right)\cdot\frac{(x - x_{i-1})}{h_{i-1}}, \quad x_{i-1} \le x \le x_i,\ \ i = \overline{2,n}. \tag{12.62}$$

Пока что в этом уравнении неизвестными остаются все m_i, $i = \overline{1,n}$.. Продифференцируем теперь выражение (12.62) по x

$$y'(x) = -m_{i-1}\frac{(x_i - x)^2}{2h_{i-1}} + m_i\frac{(x - x_{i-1})^2}{2h_{i-1}} + \frac{y_i - y_{i-1}}{h_{i-1}} - \frac{m_i - m_{i-1}}{6}h_{i-1}. \qquad (12.63)$$

Вычислим $y_{i-1}(x_i)$ – первую производную при $x = x_i$ для $(i-1)$-го интервала. Получим

$$y'_{i-1}(x_i) = \frac{h_i}{6}m_{i-1} + \frac{h_{i-1}}{3}m_i + \frac{y_i - y_{i-1}}{h_{i-1}}. \qquad (12.64)$$

Запишем уравнение (12.63) для i-го интервала $[x_i, x_{i+1}]$ и вычислим $y'_i(x_i)$ при том же $x = x_i$.

$$y'_i(x_i) = -\frac{h_i}{3}m_i - \frac{h_i}{6}m_{i+1} + \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i}. \qquad (12.65)$$

В соответствии с требованием (12.56) правые части выражений (12.64) и (12.65) должны быть равны. Таким образом

$$\frac{h_{i-1}}{6}m_{i-1} + \frac{h_{i-1} + h_i}{3}m_i + \frac{h_i}{6}m_{i+1} = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_{i-1}}, \quad i = \overline{2, n-1}. \qquad (12.66)$$

Поскольку имеется $n-1$ интервалов $[x_i, x_{i+1}]$, можно составить $n-2$ пар: $y'_i(x_i)$ и $y'_i(x_i)$ и, соответственно, записать уравнение (12.66) $(n-2)$ раз. Мы получили систему из $(n-2)$ уравнений с n неизвестными m_i, $i = \overline{1, n}$. Чтобы ее замкнуть, обычно задают значения m_i в двух точках: x_1 и x_n. При отсутствии дополнительной информации о функции $y(x)$ принимают так называемые естественные граничные условия: $m_1 = m_n = 0$. Теперь система линейных уравнений (12.66) может быть решена методом последовательного исключения неизвестных.

Кусочно-кубические сплайны вида (12.62) называют *глобальными*, отражая в этом названии то обстоятельство, что все m_i находятся из решения полной системы уравнений(12.66). Более простым вариантом являются *локальные* кубические сплайны. В этом случае сохраняется непрерывность только первой производной $y'(x_i)$. Приведем здесь сразу выражение для локального сплайна без вывода

$$y_{\text{л}}(x) = \frac{(x_i - x)^2[2(x - x_{i-1}) + h_{i-1}]}{h_{i-1}^3}y_{i-1} + \frac{(x - x_{i-1})^2[2(x_i - x) + h_{i-1}]}{h_{i-1}^3}y_{i+1} + \\ + \frac{(x_i - x)^2(x - x_{i-1})}{h_{i-1}^2}\mu_{i-1} - \frac{(x - x_{i-1})^2(x - x_i)}{h_{i-1}^2}\mu_{i+1}. \qquad (12.67)$$

Здесь $\mu_i = y'(x_i)$ – первые производные в узлах сетки, $x_{i-1} \le x \le x_i$, $i = \overline{2,n}$, ширина интервала h предполагается одинаковой во всем диапазоне. Их значения рассчитываются методом численного дифференцирования по трем точкам. В частности, при $h_{i-1} = h_i = h$ для $i = \overline{2,n}$, первые производные рассчитываются как $\mu_i = (y_{i+1} - y_{i-1})/2$.

В узлах x_1 и x_n рекомендуют использовать выражения $\mu_1 = (4y_2 - 3y_1 - y_3)/2h$ и $\mu_n = (3y_n + y_{n-2} - 4y_{n-1})/2h$.

Теория сплайнов быстро развивается. Разработаны модели *сглаживающих сплайнов*, сочетающих свойства функций, полученных методом наименьших квадратов, и кубических сплайнов. Для интерполяции двумерных полей физических величин применяются *бикубические* сплайны. Практическая реализация их осуществляется на ЭВМ.

13. ПЛАНИРОВАНИЕ АКТИВНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА ДЛЯ НАХОЖДЕНИЯ ФУНКЦИИ ОТКЛИКА

Громоздкость процедуры вычисления коэффициентов уравнения множественной регрессии и опасность встречи с плохо обусловленной системой уравнений преодолеваются при реализации специальных планов активного эксперимента. Понятие *активный эксперимент* означает, что уровни факторов и их сочетание задаются исследователем. Использование планов активного эксперимента при изучении атмосферных процессов носит ограниченный характер. Однако такие планы очень эффективны при выполнении лабораторных экспериментов и в производственных условиях при совершенствовании технологических процессов. Они также находят широкое применение при обобщении результатов численного моделирования, например мезометеорологических процессов (градовое облако, гроза и др.).

Независимо от вида конкретной задачи и условий проведения эксперимента в таких планах реализуется концепция многофакторности – одновременного изменения уровней всех контролируемых факторов, что позволяет резко сократить число испытаний. Одинаковыми являются и процедуры планирования, формализованные в рамках общей модели («черный ящик») – см. рис. 13.1.

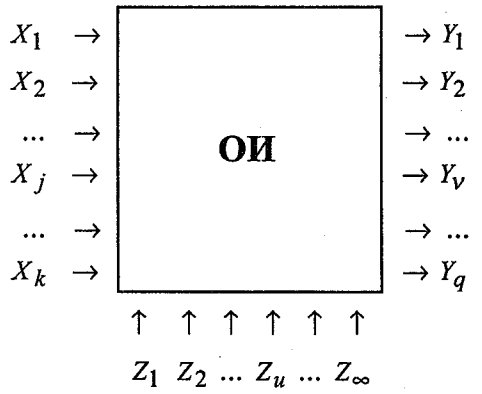


Рис. 13.1.Формализованная модель активного эксперимента

ОИ – объект исследования, X_j, $j=\overline{1,k}$ – управляющие факторы (физичские величины, влияние которых исследуется); Y_ν, $\nu=\overline{1,q}$ –отклики (исследуемые величины), зависящие от X_j и Z_u; Z_u, $u=\overline{1,\infty}$ – неконтролируемые, известные и неизвестные влияющие величины, определяющие случайный характер изменения Y_ν (шумы).

13.1. Этапы планирования активного эксперимента

1. *Выбор факторов.* Естественное желание исследовать влияние возможно большего числа факторов k связано с необходимостью увеличения объема испытаний. Если число уровней для каждого из факторов m_j выбирается одинаковым $m_j = m$, то в

планах полного факторного эксперимента (ПФЭ) число опытов $n = m^k$. При больших k значение n стремительно возрастает. В связи с этим число факторов приходится ограничивать, тщательно отбирая их. При этом каждый фактор должен удовлетворять целому ряду требований: значимость, контролируемость, возможность фиксирования его на заданном уровне в ходе эксперимента, однозначность, взаимная некоррелированность.

Значимость некоторых факторов заранее может быть неизвестна. Для отбора их требуется анализ априорной информации. Одним из эффективных путей выбора факторов является экспертное оценивание. Эксперты ранжируют все предлагаемые к обсуждению факторы, например распределяют их по местам, в зависимости от предполагаемой значимости. Далее вычисляют средние ранги $\overline{R}_j$, которые сравниваются между собой. Один из способов сравнения представлен на рис. 13.2. Степень согласованности экспертизы характеризует коэффициент конкордации (см. раздел 11).

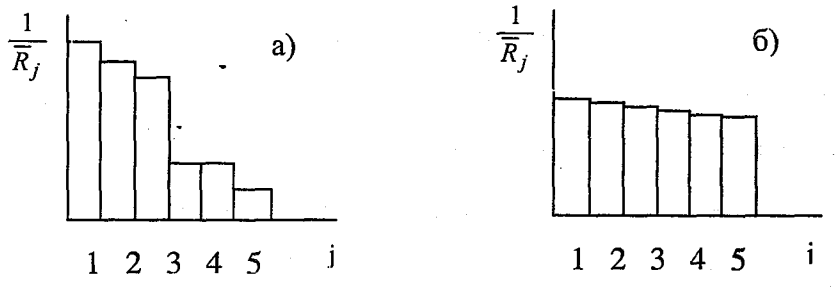


Рис. 13.2. Выбор значимых факторов по их экспертным рангам.

а) Влияние факторов X_1, X_2, X_3 оценивается высоко (их суммарные ранги малы, а значения $1/\overline{R}_j$ – велики). Остальные факторы играют второстепенную роль. Их можно отнести в разряд неконтролируемых факторов Z_u. б) Предполагаемое влияние всех обсуждаемых факторов примерно одинаково, что свидетельствует либо о необходимости включения всех их в план эксперимента, либо о неквалифицированной (слишком осторожной) экспертизе.

2. *Выбор факторного пространства.* Следует определить необходимые и возможные диапазоны изменения каждого фактора $x_j \in \left[x_{j,\text{мин}}, x_{j,\text{макс}}\right]$. При этом сочетания уровней различных факторов необходимо проверить на совместимость (физическая невозможность, взрывоопасность, пожароопасность и т.п.).

3. *Кодирование факторов.* От обычных размерных величин, изменяющихся в произвольных пределах x_{ji}, переходят к нормированным и центрированным величинам $\tilde{x}_{ji}$ по формуле

$$\tilde{x}_{ji} = \frac{2x_{ji} - (x_{j,\text{мин}} + x_{j,\text{макс}})}{x_{j,\text{макс}} - x_{j,\text{мин}}}. \qquad (13.1)$$

Таким образом $\tilde{x}_j \in [-1,+1]$.

4. *Выбор числа уровней факторов.* Обычно число уровней для всех факторов задается одинаковым. При исследовании сложных систем с большим числом k начинают с $m = 2,$, то есть $\tilde{x}_j = +1, -1$, или $m = 3$, тогда $\tilde{x}_j = +1, 0, -1$.

5. *Выбор отклика.* Из всего многообразия физических величин, характеризующих сложную систему (объект исследования) выбирают интересующие исследователя Y_ν, $\nu = \overline{1,q}$. Отклик должен быть величиной измеряемой, значения его должны выражаться в цифровой шкале.

6. *Выбор модели.* Для каждого из откликов задается вид математического выражения, описывающего связь $\hat{y} = \hat{y}(x_j, j = \overline{1,k})$. В качестве основной формы модели чаще всего используют полиномы вида

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{j=1}^{k} b_j x_j , \tag{13.2}$$

где в качестве x_j могут выступать непосредственно значения физических величин в различных степенях и взаимодействия между ними (парные, тройные и т.д.). Уравнение (13.2) есть сокращенная форма записи общего выражения

$$\begin{aligned} \hat{y} = {} & b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \ldots + b_k x_k + b_{11} x_1^2 + b_{22} x_2^2 + b_{kk} x_k^2 + \\ & + b_{111} x_1^3 + \ldots + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + b_{23} x_2 x_3 + \ldots + b_{123} x_1 x_2 x_3 + \ldots . \end{aligned} \tag{13.3}$$

Если в выражение (13.2) ввести виртуальную переменную $x_0 = 1$, то его можно записать еще короче

$$\hat{y} = \sum_{j=0}^{k} b_j x_j . \tag{13.4}$$

Искомыми величинами являются b_j, $j = \overline{0,k}$.

13.2. Планы полного факторного эксперимента (ПФЭ)

Итак, если $\tilde{x}_{ji}$ – значение j-ого фактора, а y_j – значение отклика в i-том опыте, то результаты n испытаний можно представить матрицей (символ $\tilde{x}$ далее опускаем)

$$\begin{array}{ccccccc} x_{01} & x_{11} & x_{21} & x_{j1} & x_{k1} & & y_1 \\ x_{02} & x_{12} & x_{22} & x_{j2} & x_{k2} & & y_2 \\ & & & & & & \\ x_{0i} & x_{1i} & x_{2i} & x_{ji} & x_{ki} & & y_i \\ x_{0n} & x_{1n} & x_{2n} & x_{jn} & x_{kn} & & y_n \end{array}$$

Введем векторные обозначения:

$$X=\begin{bmatrix} x_{01} & x_{11} & x_{21} & x_{j1} & x_{k1} \\ x_{02} & x_{12} & x_{22} & x_{j2} & x_{k2} \\ x_{0i} & x_{1i} & x_{2i} & x_{ji} & x_{ki} \\ x_{0n} & x_{1n} & x_{2n} & x_{jn} & x_{kn} \end{bmatrix}, \quad Y=\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_i \\ y_n \end{bmatrix}, \quad B=\begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_j \\ b_k \end{bmatrix}.$$

$$[(k+1)\times n] \qquad [n] \qquad [k+1]$$

Матрица-столбец B неизвестных коэффициентов b_j является множителем между векторами X и Y. Векторное уравнение можно записать в виде

$$XB = Y. \tag{13.5}$$

Чтобы решить уравнение (13.5), выполним следующие операции. Умножим слева левую и правую части выражения (13.5) на транспонированную матрицу X^t.

$$X^t XB = X^t Y. \tag{13.6}$$

Введем обозначение $X^t X = C$. Умножим теперь обе части уравнения (13.6), снова слева, на матрицу, обратную C.

$$C^{-1}CB = C^{-1}X^t Y \tag{13.7}$$

Имея в виду, что $C^{-1}C = I$, (I единичная матрица и, следовательно, $IB = B$) получим

$$B = C^{-1}X^t Y. \tag{13.8}$$

Выражение (13.8) является общим решением уравнения (13.5). Раскроем его

$$X^t X = \begin{bmatrix} x_{01} & x_{02} & x_{03} & x_{0i} & x_{0n} \\ x_{11} & x_{12} & x_{13} & x_{1i} & x_{1n} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} & x_{2i} & x_{2n} \\ x_{j1} & x_{j2} & x_{j3} & x_{ji} & x_{jn} \\ x_{k1} & x_{k2} & x_{k3} & x_{ki} & x_{kn} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_{01} & x_{11} & x_{21} & x_{j1} & x_{k1} \\ x_{02} & x_{12} & x_{22} & x_{j2} & x_{k2} \\ x_{03} & x_{13} & x_{23} & x_{j3} & x_{k3} \\ x_{0i} & x_{1i} & x_{2i} & x_{ji} & x_{ki} \\ x_{0n} & x_{1n} & x_{2n} & x_{jn} & x_{kn} \end{bmatrix} =$$

$$[n\times(k+1)] \qquad [(k+1)\times n]$$

$$= \begin{bmatrix} \Sigma x_{0i}^2 & \Sigma x_{0i}x_{1i} & \Sigma x_{0i}x_{2i} & \Sigma x_{0i}x_{ji} & \Sigma x_{0i}x_{ki} \\ \Sigma x_{1i}x_{01} & \Sigma x_{1i}^2 & \Sigma x_{1i}x_{2i} & \Sigma x_{1i}x_{ji} & \Sigma x_{1i}x_{ki} \\ \Sigma x_{2i}x_{0i} & \Sigma x_{2i}x_{1i} & \Sigma x_{2i}^2 & \Sigma x_{2i}x_{ji} & \Sigma x_{2i}x_{ki} \\ \Sigma x_{ji}x_{0i} & \Sigma x_{ji}x_{1i} & \Sigma x_{ji}x_{2i} & \Sigma x_{ji}^2 & \Sigma x_{ji}x_{ki} \\ \Sigma x_{ki}x_{0i} & \Sigma x_{ki}x_{1i} & \Sigma x_{ki}x_{2i} & \Sigma x_{ki}x_{ji} & \Sigma x_{k}^2. \end{bmatrix}. \tag{13.9}$$

$$[n\times n]$$

Здесь всюду суммирование осуществляется по i от 1 до n. Потребуем, чтобы матрица C была диагональной

$$C = \begin{bmatrix} c_{00} & & & & \\ & c_{11} & 0 & & \\ & & c_{22} & & \\ & 0 & & c_{jj} & \\ & & & & c_{kk} \end{bmatrix}, \tag{13.10}$$

где $c_{jj} = \sum_{i=1}^{n} x_{ji}^2$. Этого можно достичь, если исходная матрица-вектор X удовлетворяет двум условиям:

центральности:
$$\sum_{i=1}^{n} x_{ji} = 0 \tag{13.11а}$$

и ортогональности:
$$\sum_{i=1}^{n} x_{ji} x_{ui} = 0, \quad j,u = \overline{1,k}, \quad j \neq u. \tag{13.11б}$$

Из матрицы (13.10) вытекает

$$C^{-1} = \begin{bmatrix} 1/c_{00} & & & & \\ & 1/c_{11} & 0 & & \\ & & 1/c_{22} & & \\ & 0 & & 1/c_{jj} & \\ & & & & 1/c_{kk} \end{bmatrix}. \tag{13.12}$$

Подставляя в (13.8) C^{-1}, X^t и переходя от вектора B к его элементам, получим

$$\begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_j \\ b_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/c_{00} & & & & \\ & 1/c_{11} & 0 & & \\ & & 1/c_{22} & & \\ & 0 & & 1/c_{jj} & \\ & & & & 1/c_{kk} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_{01} & x_{02} & x_{03} & x_{0i} & x_{0n} \\ x_{11} & x_{12} & x_{13} & x_{1i} & x_{1n} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} & x_{2i} & x_{2n} \\ x_{j1} & x_{j2} & x_{j3} & x_{ji} & x_{jn} \\ x_{k1} & x_{k2} & x_{k3} & x_{ki} & x_{kn} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_i \\ y_n \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} 1/c_{00} & & & & \\ & 1/c_{11} & 0 & & \\ & & 1/c_{22} & & \\ & 0 & & 1/c_{jj} & \\ & & & & 1/c_{kk} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \sum x_{0i} y_i \\ \sum x_{1i} y_i \\ \sum x_{2i} y_i \\ \sum x_{ji} y_i \\ \sum x_{ki} y_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum x_{0i} y_i / c_{00} \\ \sum x_{1i} y_i / c_{11} \\ \sum x_{2i} y_i / c_{22} \\ \sum x_{ji} y_i / c_{jj} \\ \sum x_{ki} y_i / c_{kk} \end{bmatrix}. \tag{13.13}$$

Если матрицы-столбцы равны, то равны и их соответствующие элементы. Окончательно

$$b_j = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_{ji} y_i}{\sum_{i=1}^{n} x_{ji}^2}. \qquad (13.14)$$

Если план эксперимента (матрица факторов некоррелированно) удовлетворяет условиям (13.11), то коэффициенты функции отклика определяются независимо друг от друга (некоррелированно) с помощью формулы (13.14).

13.3. Планы полного факторного эксперимента на двух уровнях

Формула плана ПФЭ на двух уровнях имеет вид $n = m^k = 2^k$. В этом случае любое x_j принимает только два значения –1 и +1. Напомним, что $x_0 = 1 = const$.

1. Составим план эксперимента для двух варьируемых факторов x_1 и x_2 ($k = 2$). Тогда $n = 2^2 = 4$. Следовательно, план эксперимента будет состоять из четырех опытов (испытаний). Начнем с произвольного сочетания уровней x_1 и x_2. Пример плана представлен табл. 13.1.

Таблица 13.1

i	x_0	x_1	x_2	$x_3 = x_1 x_2$
1	+1	+1	+1	+1
2	+1	+1	+1	+1
3	+1	–1	–1	+1
4	+1	–1	–1	+1
Суммы		0	0	4

Как легко увидеть, этот план удовлетворяет условию центральности (суммы по столбцам для x_1 и x_2 равны нулю), но не удовлетворяет условию ортогональности (сумма по столбцу $x_3 = x_1 x_2$ не равна нулю). Однако небольшие изменения плана, отраженные в табл. 13.2, исправляют ситуацию.

Теперь для столбцов x_1, x_2, x_3 и непоказанных в табл. 13.2 $x_1 x_3$, $x_2 x_3$ условия центральности и ортогональности выполняются однозначно. Собственно физическим планом эксперимента является выбор сочетаний факторов x_1 и x_2. Столбцы x_0 и x_3 представляют собой элементы математической модели плана. Столбцы x_1^2 и x_2^2 рассмотрим ниже.

Таблица 13.2

i	x_0	x_1	x_2	$x_3 = x_1x_2$	x_1^2	x_2^2	y	$\hat{y}$
1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	7	7
2	+1	+1	–1	–1	+1	+1	4	4
3	+1	–1	+1	–1	+1	+1	10	10
4	+1	–1	–1	+1	+1	+1	3	3
Суммы		0	0	0				

Если такой план реализован, то есть при заданных сочетаниях уровней факторов выполнены 4 опыта и в каждом из них зафиксированы значения y_i, то далее можно перейти к нахождению функции отклика. Из общего выражения (13.3) для $k = 2$ можно записать

$$\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2 + \ldots \qquad (13.15)$$

Искомые коэффициенты b_j уравнения (13.15) рассчитаем по формуле (13.14). Имея ввиду, что $\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = n$, найдем

$$b_0 = \frac{7+4+10+3}{4} = 6,\ b_1 = \frac{7+4-10-3}{4} = -0{,}5,$$

$$b_2 = \frac{7-4+10-3}{4} = 2{,}5\ ,b_{12} = \frac{7-4-10+3}{4} = -1.$$

Выражение (13.15) принимает вид

$$\hat{y} = 6 - 0{,}5x_1 + 2{,}5x_2 - x_1x_2. \qquad (13.16)$$

Таким образом, выполнив всего четыре опыта, мы получим неполный квадратный полином, содержащий четыре эмпирических коэффициента. Нельзя ли еще усложнить функцию отклика, например до полного квадратного полинома, введя члены $b_{11}x_1^2$ и $b_{22}x_2^2$? Разумеется, нет. Нельзя построить параболическое уравнение, имея результат измерений только на двух уровнях (по каждому фактору). Это подтверждается и формальным анализом: столбцы x_1^2 и x_2^2 (табл. 13.2) определенно не удовлетворяют условиям (13.11). Впрочем, надобности в усложнении функции отклика нет. Рассчитанные по формуле (13.16) значения $\hat{y}_i$ при заданных сочетаниях x_1^2 и x_2^2 в точности соответствуют измеренным значениям y_i. Функция отклика проходит через все точки плана $\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y})^2 = 0$ (правда, число степеней свободы для дисперсии адекватности тоже

равно нулю: $f = n - l = 4 - 4 = 0$). План эксперимента $n = 2^2$ представляет собой плоскость, а функция отклика – двумерную поверхность в трехмерном пространстве (рис. 13.3).

Обратный переход от кодированных $\tilde{x}_j$ к исходным осуществляется подстановкой в (13.15) или (13.16) формул кодирования (13.1).

2. Усложняя задачу, составим план ПФЭ для трех факторов ($k = 3$). Формула плана $n = 2^3$. Функция отклика, которая может быть получена при реализации этого плана имеет вид

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + b_{23} x_2 x_3 + b_{123} x_1 x_2 x_3 . \qquad (13.17)$$

Четыре последних слагаемых в формуле (13.17) отражают влияние взаимодействий между факторами – парные и тройное. Формально их можно рассматривать как самостоятельные факторы $x_4 = x_1 x_2$, $x_5 = x_1 x_3$, $x_6 = x_2 x_3$, $x_7 = x_1 x_2 x_3$. Соответствующий условиям (13.11) план эксперимента приведен в табл. 13.3. В ней для сокращения записи вместо +1 и –1 оставлены только знаки.

Физическим планом эксперимента являются столбцы x_1, x_2, x_3, остальные столбцы – элементы математической модели.

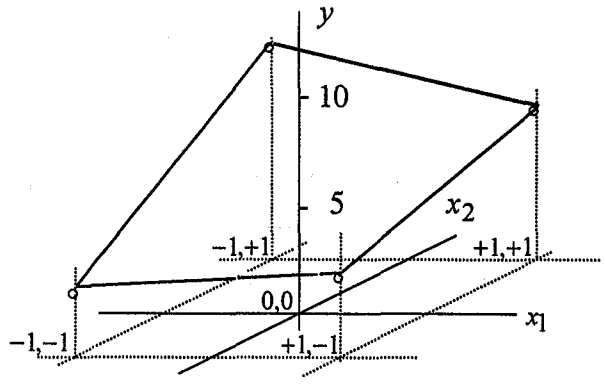


Рис. 13.3. План, результаты и поверхность отклика ПФЭ 2^2.

Составление планов способом половинного деления, представленным в табл. 13.3, не вызывает затруднений. Однако проведение опытов в порядке, указанном в этой таблице, может иметь нежелательные последствия: при сохранении неизменным уровня одного из факторов в нескольких опытах подряд на него может наложиться влияние другого неучтенного и неконтролируемого фактора (из группы Z на рис. 13.1). Чтобы избежать такого наложения при реализации, план следует рандомизировать, то есть проводить опыты не по порядку их расположения в таблице, а случайным образом.

Представим себе, что приведенный в табл. 13.3 план рандомизированным образом реализован. Полученные значения y занесены в таблицу. По формуле (13.14) рассчитаем

коэффициенты функции отклика: $b_0 = 6{,}0$, $b_1 = -0{,}5$, $b_2 = 2{,}5$, $b_3 = -2{,}0$, $b_{12} = -1{,}0$, $b_{13} = 0{,}5$, $b_{23} = -0{,}1$, $b_{123} = -0{,}1$. Таким образом, функция отклика имеет вид

$$\hat{y} = 6{,}0 - 0{,}5x_1 + 2{,}5x_2 - 2{,}0x_3 - x_1x_2 + 0{,}5x_1x_3 - 0{,}1x_2x_3 - 0{,}1x_1x_2x_3. \qquad (13.17а)$$

Легко убедиться, что гиперповерхность (13.17а) проходит через все точки плана. Для ортогональных планов при числе опытов $n = k + 1$ такой результат будет ординарным. Однако является ли это обстоятельство свидетельством высокой точности функции отклика? Вряд ли. Ведь каждое значение y_i получено с погрешностью. Следовательно, функция отклика с нулевыми отклонениями $(y_i - \hat{y})$ создает иллюзию точности, не отражая достоверно общую зависимость.

Таблица 13.3

i	x_0	x_1	x_2	x_3	$x_4 = x_1x_2$	$x_5 = x_1x_3$	$x_6 = x_2x_3$	$x_7 = x_1x_2x_3$	y	$\hat{y}_p$
1	+	+	+	+	+	+	+	+	5,3	5,5
2	+	+	+	−	+	−	−	−	8,7	8,5
3	+	+	−	+	−	+	−	−	2,7	2,5
4	+	+	−	−	−	−	+	+	5,3	5,5
5	+	−	+	+	−	−	+	−	7,5	7,5
6	+	−	+	−	−	+	−	+	12,5	12,5
7	+	−	−	+	+	−	−	+	0,5	0,5
8	+	−	−	−	+	+	+	−	5,5	5,5

Этот недостаток устраняется проверкой значимости коэффициентов функции отклика. Коэффициент считается значимым, если его абсолютное значение больше доверительных границ погрешности определения

$$|b_j| > \varepsilon_{b_j}, \quad j = \overline{0,k}, \qquad (13.18)$$

где $\varepsilon_{b_j} = t_{1-\alpha/2,f_0} \cdot S_{b_j}$.

В свою очередь доказано, что $S^2_{b_j} = S^2_0(y) / \sum_{i=1}^{n} x^2_{ji}$, где $S^2_0(y)$ – *дисперсия воспроизводимости*, которая должна быть найдена при проведении n_0 повторных измерений внутри или вне плана, $f_0 = n_0 - 1$. Поскольку для ПФЭ на двух уровнях всегда $\sum_{i=1}^{n} x^2_{ji} = n$, условие (13.18) можно записать следующим образом

$$|b_j| > t_{1-\alpha/2,f} \cdot S_0(y)/\sqrt{n}. \qquad (13.18а)$$

Примечание

Формула (13.18а) отражает еще одно достоинство линейных планов многофакторного эксперимента. Погрешности определения коэффициентов b_j тем меньше, чем больше число n, которое в

свою очередь быстро возрастает с увеличением числа факторов k. Это позволяет получить достаточно надежную функцию отклика при сравнительно невысокой точности измерения y.

Все слагаемые, содержащие незначимые, не удовлетворяющие условию (13.18, 13.18а) коэффициенты следует исключить из функции отклика. Если в нашем примере $S_0(y) = 0{,}5$, $n_0 = 6$, $\alpha = 0{,}05$, $t_{1-0{,}05/2;5} = 2{,}44$, то $\varepsilon_{b_j} = 2{,}44 \cdot \frac{0{,}5}{\sqrt{8}} = 0{,}43$. Коэффициенты b_{23} и b_{123} – незначимы. Их следует приравнять нулю. После этого функция отклика приводится к рабочему виду

$$\hat{y}_p = 6{,}0 - 0{,}5x_1 + 2{,}5x_2 - 2{,}5x_2 - 2{,}0x_3 - x_1x_2 + 0{,}5x_1x_3. \qquad (13.19)$$

При отсутствии сведений о $S_0(y)$ оценку значимости коэффициентов, кроме b_0, можно сделать, сравнивая их между собой. Поскольку все $x_j \in [-1,+1]$, то максимальный вклад каждого из слагаемых определяется значением b_j. Малые по сравнению с другими слагаемые не дают значимого вклада в функцию отклика. В уравнении (13.17) $|b_{23}|$ и $|b_{123}|$ существенно меньше остальных, ими можно пренебречь. Уравнение (13.19) проверяется на адекватность формулой $S^2_{ад} = \frac{1}{n-l}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y})^2$, где l – число оставшихся в (13.19) коэффициентов, $l = 6$. Элементарный расчет дает $S^2_{ад} = 0{,}08$.

В общем случае сравнение дисперсии адекватности с дисперсией воспроизводимости следует выполнять по критерию Фишера, сравнивая $F = S^2_{ад} / S^2_0(y)$ с критическим значением $F_{1-\alpha/2, f_{S^2_{ад}}, f_{S^2_0}}$. Однако, поскольку в нашем примере $S^2_{ад} < S^2_0(y)$, уравнение (13.19), безусловно, адекватно.

Очевидно, что, как и в случае плана 2^2, при задании факторов на двух уровнях можно получать только линейные связи y и x_j.

Упражнение

Составьте план ПФЭ, удовлетворяющий формуле $n = 2^4$ (для четырех факторов). Выпишите полное выражение функции отклика, которое может быть найдено при реализации этого плана.

13.4. Дробный факторный эксперимент (ДФЭ)

Если априори предполагается или предварительные опыты показывают, что взаимодействия между некоторыми факторами незначимы, то при планировании экспериментов это обстоятельство можно использовать для сокращения числа опытов. Не изменяя структуры плана (то есть сохраняя его ортогональность и центральность), вместо

незначимого взаимодействия можно включить в план новый фактор, переводя его из разряда Z в разряд X (см. рис. 13.1). Фактически речь идет о том, что вместо плана ПФЭ $n = 2^k$ для k факторов, включая новые, используется только его часть – дробная реплика (r), $n = 2^{k-r}$, где r – число взаимодействий, заменяемых новыми факторами. Таким образом, ДФЭ есть $1/2^r$ часть плана ПФЭ.

1. Пусть, например, при составлении плана ПФЭ $n = 2^2$ (табл.13.2) заранее предполагается, что взаимодействие x_1x_2 не проявляется либо установлено, что коэффициент b_{12} в функции отклика незначим. Тогда вместо взаимодействия в план целесообразно включить следующий по рангу фактор X_3 и воспользоваться практически тем же планом, но формально построенным как план ДФЭ $n = 2^{3-1}$ (табл. 13.4).

Таблица 13.4

i	x_0	x_1	x_2	x_3	y
1	+	+	+	+	y_1
2	+	+	–	–	y_2
3	+	–	+	–	y_3
4	+	–	–	+	y_4

Теперь функция отклика имеет вид

$$\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3. \qquad (13.20)$$

Она представляет собой гиперповерхность в четырехмерном пространстве. Функция отклика (13.20) снова проходит через все точки плана. Значимость коэффициентов b_1, b_2, b_3, проверяемая по условию (13.18), свидетельствует о значимом влиянии соответствующих факторов.

При планировании ДФЭ требуется дополнительный анализ коэффициентов на их *смешение.* Речь идет о том, что предполагаемое отсутствие взаимодействия x_1x_2 на самом деле может проявляться, смешиваясь с влиянием фактора x_3. При этом x_3 является суммой коэффициентов β_3 и β_{12}, отражающих действительное влияние фактора x_3 и взаимодействия факторов x_1x_2, так что $b_3 = \beta_3 + \beta_{12}$. Кроме того, с введением x_3 появляется возможность взаимодействия его с x_1 и x_2. В каких b_j могут они проявиться?

Формализуем процедуру оценки смешения коэффициентов. Выражение, которое определяет замену взаимодействия новым фактором, называют *генерирующим соотношением.* В нашем случае это $x_3 = x_1x_2$. Если обе части генерирующего

соотношения умножить на величину, стоящую слева, то получим *определяющий контраст*. Продолжая наш пример, найдем $x_3 x_3 = x_1 x_2 x_3$. Следовательно, *определяющий контраст* $1 = x_1 x_2 x_3$. Далее можно использовать мнемоническое правило: умножая обе части определяющего контраста на x_j, получим справа взаимодействие, с которым смешивается коэффициент β_j. Так, для рассматриваемого примера

$$x_0 = x_1 x_2 x_3, \text{ следовательно, } b_0 = \beta_0 + \beta_{123},$$

$$x_1 = x_2 x_3 \rightarrow b_1 = \beta_1 + \beta_{23},$$

$$x_2 = x_1 x_3 \rightarrow b_2 = \beta_2 + \beta_{13},$$

$$x_3 = x_1 x_2 \rightarrow b_3 = \beta_3 + \beta_{12}$$

(напомним, что $x_0 = 1$, $x_j \cdot x_j = x_j^2 = 1$).

2. Обратимся снова к плану ПФЭ $n = 2^3$, рассмотренному выше в разделе 13.2 (табл. 13.2). Анализ значимости коэффициентов уравнения (13.17а) показал, что члены полинома, учитывающие взаимодействие $x_2 x_3$ и $x_1 x_2 x_3$ можно исключить из функции отклика. Воспользуемся этим обстоятельством и, не увеличивая число опытов, исследуем дополнительно влияние еще двух факторов x_4 и x_5. Будем варьировать эти факторы на уровнях, которые были определены для взаимодействий, так что $x_4 = x_2 x_3$ и $x_5 = x_1 x_2 x_3$. В остальном план, представленный в табл. 13.3, полностью сохраняется. При этом вместо $n = 2^5 = 32$ можно ограничиться всего восьмью опытами ($n = 2^{5-2} = 8$). Тогда функция отклика имеет вид

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_4 x_4 + b_5 x_5 + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3. \qquad (13.21)$$

В выражении (13.21) использованы два генерирующих соотношения $x_4 = x_2 x_3$ и $x_5 = x_1 x_2 x_3$. Соответственно, получим два определяющих контраста $1 = x_2 x_3 x_4$ и $1 = x_1 x_2 x_3 x_5$. Следовательно, каждое слагаемое в полиноме отражает не только влияние соответствующего фактора (или взаимодействий $x_1 x_2$ и $x_1 x_3$), но и еще двух возможных взаимодействий (по числу определяющих контрастов). В рассматриваемом примере последовательно можно рассчитать

$$x_0 = x_2 x_3 x_4, \quad x_0 = x_1 x_2 x_3 x_5 \rightarrow b_0 = \beta_0 + \beta_{234} + \beta_{1235},$$

$$x_1 = x_1 x_2 x_3 x_4, \quad x_1 = x_2 x_3 x_5 \rightarrow b_1 = \beta_1 + \beta_{1234} + \beta_{235},$$

$$x_2 = x_3 x_4, \quad x_2 = x_1 x_3 x_5 \rightarrow b_2 = \beta_2 + \beta_{34} + \beta_{135},$$

$$x_3 = x_2 x_4, \quad x_3 = x_1 x_2 x_5 \rightarrow b_3 = \beta_3 + \beta_{24} + \beta_{125},$$

.....

$$x_1 x_3 = x_1 x_2 x_4, \; x_1 x_3 = x_2 x_5 \rightarrow b_{13} = \beta_{13} + \beta_{124} + \beta_{25}.$$

Зная смешение коэффициентов, можно легче интерпретировать возможные расхождения расчетов по модели с результатами измерений. Анализ смешения коэффициентов на этапе планирования эксперимента позволяет заранее исключить нежелательные наложения взаимодействий на факторы. Представим например, что взаимодействие x_3x_4, накладываясь на влияние фактора x_2, может сильно исказить зависимость отклика от этого фактора. Тогда нежелательное смешение можно исключить, поменяв генерирующие соотношения на $x_4 = x_1x_2x_3$ и $x_5 = x_2x_3$. Естественно, чем выше кратность взаимодействия, тем чаще оно оказывается незначимым.

Подчеркнем снова, что при $m = 2$ планы ДФЭ, как и ПФЭ, позволяют выявить только линейную связь между y и x_j.

Общая формула числа опытов ДФЭ $k+1 \le n < 2^k$.

Приведем в заключение этого параграфа небольшую табличку (табл. 13.5), отражающую изменение числа опытов, необходимых для оценки влияния k факторов при реализации ДФЭ в сравнении с ПФЭ. Различие цифр столь очевидно, что не требует комментариев.

Таблица 13.5

Сравнение планов ПФЭ и ДФЭ

Число факторов, k	Реплики плана, r	Число опытов, n	
		ДФЭ 2^{k-r}	ПФЭ 2^k
3	1	4	8
4	1	8	16
5	2	8	32
6	3	8	64
7	4	8	128
8	4	16	256
9	5	16	512
...	...	...	...
15	11	16	32768

13.5. Нелинейные планы факторного эксперимента

Когда линейная функция не отражает реальной зависимости отклика от факторов, ее необходимо усложнить, переходя к нелинейным (квадратическим, кубическим и т.д.) формам полиномов. Задача состоит в том, чтобы план эксперимента сохранял достоинства линейных планов ПФЭ (простоту процедуры вычисления коэффициентов и их взаимную некоррелированность). Для этого матрица плана по-прежнему должна удовлетворять условиям (13.11) – центральности и ортогональности. Цель достигается путем достройки линейного плана до нелинейного. При этом обычно план ПФЭ 2^k используется как ядро

нелинейного плана. Очевидно, что для нахождения нелинейной зависимости число уровней факторов должно быть больше двух для квадратического полинома, больше трех для кубического и т.д.

13.5.1. Квадратическая функция отклика

1. Начнем снова с двухфакторного эксперимента. Вернемся к рассмотренному ранее плану ПФЭ $n = 2^2$ (табл. 13.2). Повторим его в табл. 13.6 как ядро будущего расширенного плана

Таблица 13.6

i	x_0	x_1	x_2	$x_3 = x_1x_2$	y	$\hat{y}_1$	$x_4 = x_1^2 - 2/3$	$x_5 = x_2^2 - 2/3$	$x_6 = x_4x_5$	$x_7 = x_4x_2$	$x_8 = x_5x_1$	$\hat{y}_2$	$\hat{y}_3$
1	+	+	+	+	7	7	1/3	1/3	1/9	1/3	1/3	7	7,2
2	+	+	–	–	4	4	1/3	1/3	1/9	–1/3	1/3	4	4,2
3	+	–	+	–	10	10	1/3	1/3	1/9	1/3	–1/3	10	10,2
4	+	–	–	+	3	3	1/3	1/3	1/9	–1/3	–1/3	3	3,2
5	+	0	0		12	6	–2/3	–2/3	4/9	0	0	12	11,7
6	+	+	0		1		1/3	–2/3	–2/9	0	–2/3	1	0,7
7	+	–	0		9		1/3	–2/3	–2/9	0	2/3	9	8,7
8	+	0	+		16		–2/3	1/3	–2/9	–2/3	0	16	16,2
9	+	0	–		1		–2/3	1/3	–2/9	2/3	0	1	1,2

Напомним, что полученная по результатам первых четырех опытов линейная функция отклика (обозначим ее здесь $\hat{y}_1$) имела вид

$$\hat{y}_1 = 6{,}0 - 0{,}5x_1 + 2{,}5x_2 - x_1x_2 . \qquad (13.23)$$

Функция отклика $\hat{y}_1$ проходит через все четыре точки плана. Выполним еще один опыт ($i = 5$) в центре плана при $x_{1,5} = x_{2,5} = 0$. Результат измерения $y_5 = 12$. Рассчитанное по уравнению (13.23) значение $\hat{y}_{1,5} = 6$. Расхождение между функцией отклика и экспериментом $y_5 - \hat{y}_{1,5} = 6$ оказалось слишком большим по сравнению с указанным ранее значением СКО $S_0(y) = 0{,}5$. Впрочем, у нас появилась возможность оценить адекватность уравнения (13.23) по критерию Фишера. Найдем дисперсию адекватности

$$S^2_{\text{ад}} = \frac{1}{n-l}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_{1i})^2 = 36, \quad f_{S^2_{\text{ад}}} = n - l = 5 - 4 = 1.$$

Дисперсия воспроизводимости $S_0^2(y)=0{,}25$, $n_0=6$ (см. 13.3), $f_{S_0^2(y)}=5$. Отношение Фишера $F=\dfrac{36}{0{,}25}=144$, критическое значение $F_{1-0{,}05;1;5}=6{,}6$. Таким образом, $F>>F_{1-0{,}05;1;5}\Rightarrow H_1$ – естественно, уравнение неадекватно.

Усложнение плана производится путем включения в него измерений y_i в так называемых «звездных точках», лежащих на осях факторов x_j, одинаково удаленных от центра плана на длину звездного плеча $\pm l^*$. При этом остальные факторы фиксируются на нулевом уровне (в центре плана). Для двух факторов длина звездного плеча $l^*=\pm 1$. Доказательство приведем ниже. При сочетании уровней факторов, заданных в опытах 6-9, находят $y_6 \ldots y_9$.

Введем два новых формальных фактора, отражающих зависимости y от x_1^2 и x_2^2,

$$x_4=x_1^2-\overline{x_1^2} \text{ и } x_5=x_2^2-\overline{x_2^2}, \tag{13.24}$$

где $\overline{x_1^2}=\overline{x_2^2}=\dfrac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_{1(2)i}^2=\dfrac{6}{9}=\dfrac{2}{3}$. Преобразования x_4 и x_5 сохраняют центральность и ортогональность плана. В этом легко убедиться, анализируя табл. 13.6. Теперь можно вычислить коэффициенты квадратической функции отклика:

$$\hat{y}_2'=b_0+b_1x_1+b_2x_2+b_3x_1x_2+b_4x_4+b_5x_5.$$

Однако это уравнение не исчерпывает всех возможностей плана. В самом деле, можно увидеть, что условиям ортогональности и центральности удовлетворяют еще три комбинации факторов

$$\begin{aligned} x_6&=x_4\cdot x_5=(x_1^2-\overline{x_1^2})(x_2^2-\overline{x_2^2}),\\ x_7&=x_4\cdot x_2=(x_1^2-\overline{x_1^2})\cdot x_2,\\ x_8&=x_5\cdot x_1=(x_2^2-\overline{x_2^2})x_1. \end{aligned} \tag{13.25}$$

Тогда полная функция отклика может быть представлена как

$$\begin{aligned} \hat{y}_2=b_0+b_1x_1+b_2x_2+b_3x_1x_2+b_4(x_1^2-\overline{x_1^2})+b_5(x_2^2-\overline{x_2^2})+\\ +b_6(x_1^2-\overline{x_1^2})(x_2^2-\overline{x_2^2})+b_7(x_1^2-\overline{x_1^2})x_2+b_8(x_2^2-\overline{x_2^2})x_1 \end{aligned}. \tag{13.26}$$

Девять неизвестных коэффициентов в уравнении (13.26) находятся по результатам девяти опытов по формуле (13.14).

Рассчитав коэффициенты, получим функцию отклика

$$\hat{y}_2=7-1\frac{2}{3}x_1+4\frac{1}{6}x_2-x_3-4x_4-\frac{1}{2}x_5+4\frac{1}{2}x_6-5x_7+3\frac{1}{2}x_8. \tag{13.27}$$

Оценим значимость коэффициентов уравнения (13.27). Используем снова условие (13.18). Однако в отличие от линейных, в нелинейных планах дисперсии $S^2_{b_j}$ оказываются различными для разных b_j. В формуле $S^2_{b_j} = S^2_0(y) / \sum_{i=1}^{n} x^2_{ji}$ знаменатель становится переменной величиной. Таким образом, условие (13.18а) трансформируется к виду

$$|b_j| > t_{1-\alpha/2,\,f_0} \cdot S_0(y) / \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x^2_{ji}}\,. \qquad (13.28)$$

Вернемся к нашему примеру. Напомним, что $S_0(y) = 0{,}5$; $f_0 = 5$; $t_{1-0{,}05/2;5} = 2{,}44$. Рассчитаем $\sum_{i=1}^{n} x^2_{ji}$ для каждого из b_j (см. табл. 13.6): $\sum_{i=1}^{9} x^2_{0i} = 9$; $\sum_{i=1}^{9} x^2_{1i} = \sum_{i=1}^{9} x^2_{2i} = 6$; $\sum_{i=1}^{9} x^2_{3i} = 4$; $\sum_{i=1}^{9} x^2_{4i} = \sum_{i=1}^{9} x^2_{5i} = 2$; ж; $\sum_{i=1}^{9} x^2_{7i} = \sum_{i=1}^{9} x^2_{8i} = \frac{4}{3}$. Далее сравним b_j с ε_{b_j}:

$7 > 2{,}44\frac{0{,}5}{3} = 0{,}4$, b_0 – значим;

$1{,}67 > 0{,}5$,	b_1 – значим;	$0{,}5 < 0{,}9$,	b_5 – незначим;
$4{,}16 > 0{,}5$,	b_2 – значим;	$4{,}5 > 1{,}8$,	b_6 – значим;
$1{,}0 > 0{,}6$,	b_3 – значим;	$5{,}0 > 1{,}0$,	b_7 – значим;
$4{,}0 > 0{,}9$,	b_4 – значим;	$3{,}5 > 1{,}0$	b_8 – значим.

Исключим из уравнения (13.27) слагаемое, содержащее b_5. Подставляя в него обозначения (13.24) и (13.25), окончательно получим

$$\hat{y}_3 = 11{,}67 - 4{,}0x_1 + 7{,}5x_2 - x_1x_2 - 7{,}0x_1^2 - 3{,}0x_2^2 - 5{,}0x_1^2x_2 + \\ + 3{,}5x_2^2x_1 + 4{,}5x_1^2x_2^2. \qquad (13.29)$$

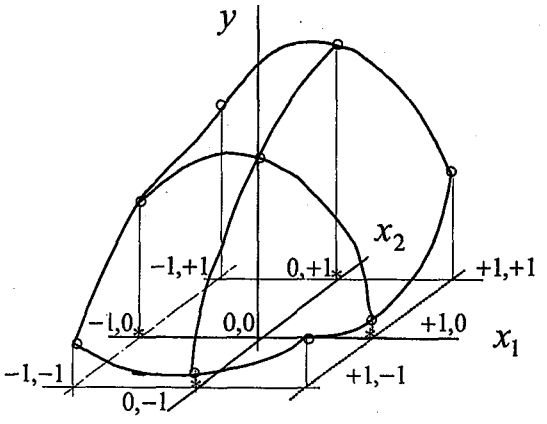


Рис. 13.4. Геометрическая интерпретация, результаты эксперимента и функция отклика плана $n = 2^k + 2k$ при $k = 2$.

Расчеты $\hat{y}_3$ по уравнению (13.29) представлены в табл. 13.6. Оценим адекватность последнего уравнения. Дисперсия адекватности для него $S^2_{\text{ад}} = 0{,}5$, число степеней свобо-

ды $f_{S^2_{ад}} = 1$. Используем принятые ранее в разделе 13.3 значения $S^2_0(y) = 0{,}25$ и $f_{S^2_0(y)} = 5$. Отношение Фишера $F = \dfrac{0{,}5}{0{,}25} = 2$, $F_{1-0{,}05;1;5} = 6{,}6$. Уравнение адекватно.

На рис. 13.4 представлен план и результаты проанализированного эксперимента.

Общая формула плана, достроенного для получения квадратической зависимости, $n = 2^k + 2k + 1$. Здесь 2^k – число опытов ПФЭ для k факторов на двух уровнях (ядро плана), $2k$ – число опытов в звездных точках по каждому из факторов, 1 – опыт в центре плана (все $x_j = 0$). В случае $k = 2$, план $n = 2^2 + 2 \cdot 2 + 1 = 9$, полученный после достройки, представляет собой план ПФЭ $n = 3^2 = 9$ с полным перебором сочетаний уровней двух факторов. В этом смысле достроенный план не обладает никакими преимуществами перед планом 3^2, кроме возможности последовательного перехода от одного плана к другому. При $k > 2$ эти преимущества оказываются более существенными. Прежде чем обсуждать их, найдем l^* – длину звездного плеча.

Для сохранения ортогональности матрицы плана при введении квадратических членов должны выполняться условия

$$\sum_{i=1}^{n} (x_{ji}^2 - \overline{x_j^2})(x_{ui}^2 - \overline{x_u^2}) = 0, \quad j,u = \overline{1,k}, \quad j \neq u. \tag{13.30}$$

Здесь

$$\overline{x_j^2} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_{ji}^2}{n} = \frac{2^k + 2l^{*2}}{2^k + 2k + 1}. \tag{13.31}$$

Представим левую часть выражения (13.30) в виде суммы

$$\sum_{i=1}^{n} x_{ji}^2 \cdot x_{ui}^2 - \sum_{i=1}^{n} x_{ji}^2 \cdot \overline{x_u^2} - \sum_{i=1}^{n} x_{ui}^2 \cdot \overline{x_j^2} + \sum_{i=1}^{n} \overline{x_j^2} \cdot \overline{x_u^2} = 0.$$

Легко показать, что $\sum_{i=1}^{n} x_{ji}^2 \cdot x_{ui}^2 = 2^k$. Тогда, имея ввиду, что $\sum_{i=1}^{n} x_{ji}^2 = \sum_{i=1}^{n} x_{ui}^2$, а $\overline{x_j^2} = \overline{x_u^2}$, получим

$$2^k = \frac{(2^k + 2l^{*2})^2}{2^k + 2k + 1}. \tag{13.32}$$

Решая (13.32) относительно l^*, найдем

$$l^* = 2^{\frac{k-1}{2}} \sqrt{\sqrt{1 + \frac{2k+1}{2^k}} - 1}. \tag{13.33}$$

Ниже приведены результаты расчета длины звездного плеча при различных k.

k	2	3	4	5
l^*	1,000	1,215	1,414	1,547

При $k > 2$ длина звездного плеча $l^* > 1$. Это необходимо помнить на начальной стадии планирования эксперимента при определении факторного пространства. Если сначала реализуется линейный план, но не исключается дальнейшая достройка его до нелинейного, то нужно предусмотреть возможность расширения факторного пространства.

2. Сохраняя структуру предыдущих параграфов, обратимся к плану трехфакторного эксперимента. В качестве ядра нелинейного плана используем план ПФЭ 2^3, представленный ранее в табл. 13.3. Повторим его в табл. 13.7. Добавим к этому плану еще семь испытаний: одно в центре плана (строка 9) и шесть в звездных точках (строки 10...15).

Длина звездного плеча $l^* = 1{,}215$. Введем центрированные квадратические переменные $x_8 = x_1^2 - \overline{x_1^2}$, $x_9 = x_2^2 - \overline{x_2^2}$ и $x_{10} = x_3^2 - \overline{x_3^2}$. Средние значения $\overline{x_1^2} = \overline{x_2^2} = \overline{x_3^2} = \overline{x^2} = 0{,}73$. Обычно в руководствах по планированию экспериментов на этом останавливаются. Однако еще не все возможности исчерпаны. План легко дополняется взаимодействиями между нелинейными (формальными) факторами, ортогональными по условию (13.30):

$$x_{11} = x_8 \cdot x_9 = (x_1^2 - \overline{x_1^2})(x_2^2 - \overline{x_2^2}),$$

$$x_{12} = x_8 \cdot x_{10} = (x_1^2 - \overline{x_1^2})(x_3^2 - \overline{x_3^2}),$$

$$x_{13} = x_9 \cdot x_{10} = (x_2^2 - \overline{x_2^2})(x_3^2 - \overline{x_3^2}).$$

Другие перекрестные взаимодействия между линейными x_1, x_2, x_3 и квадратическими x_8, x_9, x_{10} столбцами плана удовлетворяют условию центральности, но не удовлетворяют условию ортогональности. Тройное взаимодействие x_8, x_9, x_{10} не удовлетворяет условию центральности. Таким образом, реализовав представленный в табл. 13.7 план, можно получить искомую функцию отклика в виде

$$\begin{aligned}\hat{y} = {} & b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_4x_1x_2 + b_5x_1x_3 + b_6x_2x_3 + \\ & + b_7x_1x_2x_3 + b_8(x_1^2 - \overline{x^2}) + b_9(x_2^2 - \overline{x^2}) + b_{10}(x_3^2 - \overline{x^2}) + \\ & + b_{11}(x_1^2 - \overline{x^2})(x_2^2 - \overline{x^2}) + b_{12}(x_1^2 - \overline{x^2})(x_3^2 - \overline{x^2}) + \\ & + b_{13}(x_2^2 - \overline{x^2})(x_3^2 - \overline{x^2}).\end{aligned} \qquad (13.34)$$

Неизвестные коэффициенты $b_0 ... b_{13}$ функции отклика (13.34) находятся по той же формуле (13.14). Поскольку число коэффициентов меньше, чем число опытов (соответственно,

14 и 15), то функция отклика не будет проходить через все значения измеренных y_i. Впрочем, сначала требуется проверить коэффициенты на значимость по условию (13.28). Исключив слагаемые с незначимыми коэффициентами, следует проверить функцию отклика на адекватность.

При добавлении новых факторов, увеличение числа опытов в звездных точках происходит пропорционально k, а количество взаимодействий между нелинейными факторами растет в геометрической прогрессии. Поскольку число определяемых коэффициентов не может быть больше числа опытов, необходимо внимательно проверять парные нелинейные взаимодействия на их взаимную ортогональность.

3. *Дополнительные замечания*

Принципы построения функции отклика изложены в настоящем разделе с позиций и в терминах теории планирования эксперимента. В рекомендациях по практическому применению этой теории осталось незамеченным то обстоятельство, что полиномиальные функции отклика представляют собой набор ортогональных полиномов Чебышева. В самом деле, как это показано в разделе 12, если в полиномах Чебышева перейти к центрированным переменным ($\sum_{i=1}^{n} \tilde{x}_{ji} = 0$), то легко убедиться в полной идентичности столбцов табл. 13.6 и 13.7 полиномам Чебышева: $x_0 = P_0$, $x_j = P_1(\tilde{x}_j)$, $(x_j^2 - \overline{x^2}) = P_2(\tilde{x}_j)$. Линейные, нелинейные и перекрестные взаимодействия являются, в свою очередь, произведениями полиномов, так что

$$\begin{aligned} \hat{y} = b_0 + b_1 P_1(\tilde{x}_1) + b_2 P_1(\tilde{x}_2) + \ldots + b_{11} P_2(\tilde{x}_1) + \\ + \ldots + b_{12} P_1(\tilde{x}_1) P_1(\tilde{x}_2) + b_{13} P_1(\tilde{x}_1) P_1(\tilde{x}_3) + \ldots \end{aligned} \qquad (13.35)$$

В общем случае, если реализуется план ПФЭ на m уровнях, функция отклика может содержать полиномы до $P_{m-1}(\tilde{x}_j)$ с полным набором всех возможных взаимодействий. И наоборот, ограничивая степень полинома, а значит и число слагаемых в функции отклика, методом наименьших квадратов можно найти наиболее эффективные оценки коэффициентов этой функции.

Таблица 13.7

i	x_0	x_1	x_2	x_3	$x_4 = x_1x_2$	$x_5 = x_1x_3$	$x_6 = x_2x_3$	$x_7 = x_1x_2x_3$	$x_8 = x_1^2 - \overline{x_1^2}$	$x_9 = x_2^2 - \overline{x_2^2}$	$x_{10} = x_3^2 - \overline{x_3^2}$	$x_{11} = x_8x_9$	$x_{12} = x_8x_{10}$	$x_{13} = x_9x_{10}$	y
1	+	+	+	+	+	+	+	+	0,27	0,27	0,27	0,0729	0,0729	0,0729	y_1
2	+	+	+	–	+	–	–	–	0,27	0,27	0,27	0,0729	0,0729	0,0729	y_2
3	+	+	–	+	–	+	–	–	0,27	0,27	0,27	0,0729	0,0729	0,0729	y_3
4	+	+	–	–	–	–	+	+	0,27	0,27	0,27	0,0729	0,0729	0,0729	y_4
5	+	–	+	+	–	–	+	–	0,27	0,27	0,27	0,0729	0,0729	0,0729	y_5
6	+	–	+	–	–	+	–	+	0,27	0,27	0,27	0,0729	0,0729	0,0729	y_6
7	+	–	–	+	+	–	–	+	0,27	0,27	0,27	0,0729	0,0729	0,0729	y_7
8	+	–	–	–	+	+	+	–	0,27	0,27	0,27	0,0729	0,0729	0,0729	y_8
9	+	0	0	0	0	0	0	0	–0,73	–0,73	–0,73	0,5329	0,5329	0,5329	y_9
10	+	1,2/5	0	0	0	0	0	0	0,75	–0,73	–0,73	–0,5475	–0,5475	0,5329	y_{10}
11	+	–1,2/5	0	0	0	0	0	0	0,75	–0,73	–0,73	–0,5475	–0,5475	0,5329	y_{11}
12	+	0	1,2/5	0	0	0	0	0	–0,73	0,75	–0,73	–0,5475	0,5329	–0,5475	y_{12}
13	+	0	–1,2/5	0	0	0	0	0	–0,73	0,75	–0,73	–0,5475	0,5329	–0,5475	y_{13}
14	+	0	0	1,2/5	0	0	0	0	–0,73	–0,73	0,75	0,5329	–0,5475	–0,5475	y_{14}
15	+	0	0	–1,2/5	0	0	0	0	–0,73	–0,73	0,75	0,5329	–0,5475	–0,5475	y_{15}

13.5.2. Нелинейная неквадратическая функция отклика

Проверка функции отклика на адекватность проводится по тем же точкам плана, по которым эта функция построена. В планах ПФЭ, если все коэффициенты значимы, мы получаем идеальное совпадение функции отклика с экспериментом. Это обстоятельство еще не гарантирует хорошее соответствие рассчитанных и действительных значений исследуемой величины в интервалах между точками плана. Так, в планах $n=2^k$ зависимость по любому из факторов предполагается линейной, а в достроенных планах ПФЭ $n=2^k+2k+1-$ квадратической. Если реальная поверхность отклика отличается от описываемой уравнением, то расхождения внутри факторного пространства неизбежны (напомним, что распространение функции отклика за пределы факторного пространства чревато серьезными, даже фантастическими погрешностями). Как уже отмечалось, реализуя многоуровенные планы, можно получить сложные, а значит и более точные функции отклика. Нельзя ли добиться того же результата, не увеличивая число опытов? Оказывается можно.

Идея заключается в том, чтобы нелинейные зависимости отклика от факторов превратить в линейные, выполняя преобразования факторов. Существуют различные способы таких преобразований. Рассмотрим здесь один из простых вариантов. Ограничимся сначала всего одним фактором ($k=1$). Обсуждаемая схема применима, если физический (некодированный) фактор изменяется в интервале $x\in[x_1,x_2]$, при этом $x_1\geq 0$, $x_2>x_1$ и зависимость $y=y(x)-$ монотонна, то есть с ростом x величина y либо растет, либо только убывает (без смены знака производной dy/dx). Выполним два измерения y_1 и y_2, соответственно, при x_1 и x_2. Для закодированной переменной $\tilde{x}=\dfrac{2x-x_1-x_2}{x_2-x_1}$ уравнение прямой, проходящей через точки (x_1,y_1) и (x_2,y_2), имеет вид

$$\hat{y}=\frac{y_1+y_2}{2}+\frac{y_2-y_1}{2}\tilde{x}\,. \tag{13.36}$$

Выполним еще одно измерение отклика y_3 при $x_3=\bar{x}=\dfrac{x_1+x_2}{2}$ (кодированное значение $\tilde{\bar{x}}=0$). Если y_3 значительно отличается от $\bar{y}=\dfrac{y_1+y_2}{2}$, то линейная зависимость неадекватна. Переменную (фактор x) следует преобразовать. Выполним степенное преобразование. Введем новую переменную $u=x^{\alpha}$, такую, чтобы зависимость $\hat{y}=y(u)$ превратилась в линейную. Другими словами, если в выражение (13.36) подставить кодированное значение

$$\tilde{\bar{u}}=\frac{2\bar{u}-u_1-u_2}{u_2-u_1}=\frac{2\bar{x}^{\alpha}-x_1^{\alpha}-x_2^{\alpha}}{x_2^{\alpha}-x_1^{\alpha}}, \tag{13.37}$$

то должно выполняться равенство

$$y_3 = \frac{y_1 + y_2}{2} + \frac{y_2 - y_1}{2}\tilde{u} \qquad (13.38)$$

либо

$$\frac{2y_3 - y_1 - y_2}{y_2 - y_1} = \frac{2(\frac{x_1 + x_2}{2})^{\alpha} - x_1^{\alpha} - x_2^{\alpha}}{x_2^{\alpha} - x_1^{\alpha}}. \qquad (13.39)$$

Мы получили трансцендентное относительно неизвестного показателя степени α уравнение. Перепишем его еще раз в более общем виде. Введем обозначения $C = \frac{2y_3 - y_1 - y_2}{y_2 - y_1}$, $a = \frac{x_2}{x_1}$. Тогда

$$C = \frac{2^{1-\alpha}(a+1)^{\alpha} - a^{\alpha} - 1}{a^{\alpha} - 1}. \qquad (13.40)$$

Задавая a и варьируя α, можно рассчитать ряд значений величины C и построить графики связи $\alpha = \alpha(C)$. Семейство таких кривых при различных значениях a приведено на рис. 13.5. Вычислив для конкретного примера a и C, легко найти α..

Теперь уравнение (13.36) можно переписать в виде

$$\hat{y} = \frac{y_1 + y_2}{2} + \frac{y_2 - y_1}{2}\tilde{u}, \qquad (13.41)$$

где

$$\tilde{u} = \frac{2x^{\alpha} - x_1^{\alpha} - x_2^{\alpha}}{x_2^{\alpha} - x_1^{\alpha}}. \qquad (13.42)$$

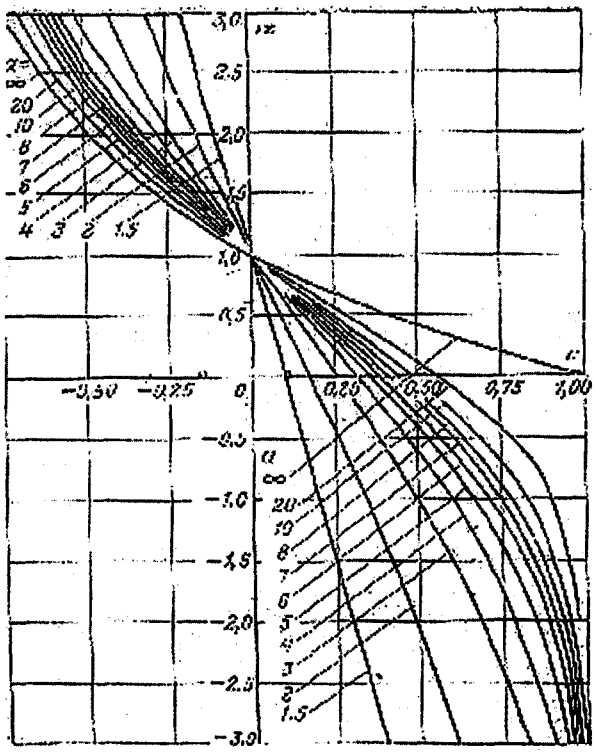


Рис. 13.5. Графическое представление решения уравнения (13.40): зависимость $\alpha = \alpha(C)$ при различных a.

Легко убедиться, что кодированным значениям $\tilde{x} = -1$ и $\tilde{x} = +1$ соответствуют такие же кодированные значения $\tilde{u}$. Однако, внутри интервала (–1, +1), кодированные $\tilde{x} \neq \tilde{u}$.

Рассмотрим более сложную задачу с двумя факторами. Используем двойную индексацию $x_{j\mu}$, где j – номер фактора, $j = 1,\ 2$, μ – уровни фактора, $\mu = 1,\ 2,\ 3$ ($x_{j1} = x_{j,\text{мин}}$, $x_{j2} = x_{j,\text{макс}}$, $x_{j3} = \bar{x}_j$). Пусть факторные пространства задаются интервалами $x_1 \in [0{,}2;0{,}6]$, $x_2 \in [1;9]$. Кодированное значение уровней факторов $\tilde{x}_{11} = \tilde{x}_{21} = -1$, $\tilde{x}_{12} = \tilde{x}_{22} = +1$, $\tilde{x}_{13} = \tilde{x}_{23} = 0$.

Предположим, что построен и реализован план ПФЭ $n = 2^2$ (см. первые четыре строки табл. 13.8).

Рассчитав коэффициенты линейной функции отклика, получим

$$\hat{y} = 7{,}9 + 6{,}1\tilde{x}_1 - 1{,}7\tilde{x}_2 - 1{,}9\tilde{x}_1\tilde{x}_2. \qquad (13.43)$$

Таблица 13.8

i	x_1	x_2	$\tilde{x}_0$	$\tilde{x}_1$	$\tilde{x}_2$	$\tilde{x}_3 = \tilde{x}_1\tilde{x}_2$	y	$\hat{y}_{\text{н/л}}$ *)
1	0,2	1	+	–	–	+	1,6	1,6
2	0,2	9	+	–	+	–	2,0	2,0
3	0,6	1	+	+	–	–	17,6	17,55
4	0,6	9	+	+	+	+	10,4	10,38
5	0,4	5	+	0	0		4,5	4,54
6	0,2	5	+	–	0		1,6	1,93
7	0,6	5	+	+	0		11,4	11,61
8	0,4	1	+	0	–		6,0	5,90
9	0,4	9	+	0	+		4,2	4,26

*) Значения в этом столбце для наглядности сравнения приведены с избыточной точностью.

Выполним измерение в центре плана и сравним результат со значением $\hat{y}_5$. Предположим, что $S_0(y) = 0{,}2$. Тогда разность $y_5 - \hat{y}_5 = 3{,}4$ представляется слишком большой, чтобы считать уравнение (13.43) адекватным. Попробуем уточнить функцию отклика путем степенного преобразования факторов. С этой целью необходимо получить значения y_i в равноотстоящих от центра плана точках по фактору x_1 при $x_{2\mu} = 0$, и далее по фактору x_2 при $x_{1\mu} = 0$ (строки 6...9). Эти измерения эквивалентны опытам в звездных точках. Преобразованные факторы будем представлять в виде $u_1 = x_1^{\alpha_1}$ и $u_2 = x_2^{\alpha_2}$. Используя значения $y_5 \ldots y_9$, составим соотношения, необходимые для нахождения α_1 и α_2

$$C_1 = \frac{2y_5 - y_6 - y_7}{y_7 - y_6} = -0{,}41,\ C_2 = \frac{2y_5 - y_8 - y_9}{y_9 - y_8} = 0{,}67,\ a_1 = \frac{0{,}6}{0{,}2} = 3,,\ a_2 = \frac{9}{1} = 9.$$

Воспользуемся графиками на рис. 13.5 и найдем $\alpha_1 = 3{,}0,\ \alpha_2 = -0{,}5$. (Численное решение уравнения (13.40) дает более точные значения: $\alpha_1 = 2{,}73,\ \alpha_2 = -0{,}53$). Далее исследуем преобразованные факторы $u_1 = x_1^3,\ u_2 = x_2^{-0,5}$. Выполним кодирование преобразованных факторов.

$$\tilde{u}_1 = \frac{2x_1^{\alpha_1} - x_{11}^{\alpha_1} - x_{12}^{\alpha_1}}{x_{12}^{\alpha_1} - x_{11}^{\alpha_1}} = \frac{2x_1^3 - 0{,}2^3 - 0{,}6^3}{0{,}6^3 - 0{,}2^3} = \frac{2x_1^3 - 0{,}224}{0{,}208}, \qquad (13.44а)$$

аналогично

$$\tilde{u}_2 = \frac{2x_2^{-0,5} - 1^{-0,5} - 9^{-0,5}}{9^{-0,5} - 1^{-0,5}} = \frac{2x_2^{-0,5} - 1{,}33}{-0{,}67}. \qquad (13.44б)$$

Подставим выражения (13.44а) и (13.44б) в уравнение (13.43) вместо $\tilde{x}_1$ и $\tilde{x}_2$, соответственно. После элементарных преобразований получим функцию отклика в окончательном (нелинейном – н/л) виде

$$\hat{y}_{\text{н/л}} = 2{,}02 + 22{,}12x_1^3 - 1{,}03x_2^{-0,5} + 54{,}54x_1^3x_2^{-0,5}. \qquad (13.45)$$

В последнем столбце таблицы 13.8 приведем результаты расчета $\hat{y}_{\text{н/л}}$ по формуле (13.45). Сопоставление их с измеренными значениями y свидетельствует о хорошем соответствии расчетов эксперименту.

Дисперсия адекватности $S^2_{\text{ад}} = \frac{1}{9-4}\sum_{i=1}^{9}(y_i - \hat{y}_{\text{н/л},i})^2 = 0{,}032$. При оговоренном ранее значении $S_0 = 0{,}2$ дисперсия воспроизводимости $S_0^2 = 0{,}2^2 = 0{,}04$. Поскольку $S^2_{\text{ад}} < S_0^2$, уравнение адекватно.

Этот метод можно использовать при большом числе факторов, реализуя планы $n = 2^k + 2k + 1$. В отличие от планов ПФЭ, достраиваемых для получения квадратической функции отклика, опыты на осях факторов можно производить, не выходя за пределы факторного пространства, не на длине звездного плеча, а, например, при $\tilde{x}_j = +1, -1$.

Недостаток рассматриваемого варианта преобразования заключается в том, что показатели степени α_j, найденные для центральных сечений по каждому фактору, распространяются далее на все факторное пространство.

14. НАХОЖДЕНИЕ ДИСКРИМИНАНТНОЙ ФУНКЦИИ

Обратимся снова к дихотомической величине, отражающей наличие или отсутствие некоторого явления, зависящего от ряда факторов. Необходимо выделить условия, при которых явление наблюдается или не наблюдается. Задачи такого рода рассматриваются в разделе статистики, называемом теорией распознавания образов. (В метеорологии обычно речь идет о методах прогноза опасных явлений погоды. Тогда учитываемые факторы, определяющие возникновение явления, называют предикторами, а прогнозируемое явление – предиктантом). Решение задачи сводится к отысканию уравнения, которое в многомерном факторном пространстве наилучшим образом отделяет условия осуществления явления от условий его отсутствия. Такое уравнение называют дискриминантной функцией. Планы активного эксперимента оказываются эффективными при нахождении этой функции. Однако рассмотрим сначала общепринятый метод.

14.1. Классический метод построения дискриминантной функции

1. Ограничимся для наглядности изложения простым примером зависимости явления от двух факторов: x_1 и x_2. Будем искать сначала линейную разделительную функцию вида

$$L = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 . \qquad (14.1)$$

Неизвестными здесь являются коэффициенты b_0, b_1, b_2. Исходная информация (обучающая выборка) представляет собой ряды совместных измерений x_{1i} и x_{2i}, $i = \overline{1,n}$ с отметками наличия (1) или отсутствия (0) изучаемого явления. Разделим выборку на две группы. В первую включим все пары значений факторов, при которых явление наблюдается: $x_{1i}^{(1)}$, $x_{2i}^{(1)}$, $i = \overline{1,n^{(1)}}$. Вторую группу составляют результаты измерений при отсутствии явления: $x_{1i}^{(0)}$, $x_{2i}^{(0)}$, $i = \overline{1,n^{(0)}}$. При этом $n^{(1)} + n^{(0)} = n$. Вычислим для факторов в каждой группе средние значения, коэффициенты корреляции и дисперсии: $\overline{x_1^{(1)}}$, $\overline{x_1^{(0)}}$, $\overline{x_2^{(1)}}$, $\overline{x_2^{(0)}}$, $r_{1,2}^{(1)}$, $r_{1,2}^{(0)}$, $S^2(x_1^{(1)})$, $S^2(x_1^{(0)})$, $S^2(x_2^{(1)})$, $S^2(x_2^{(0)})$. Степени свободы для дисперсий $f_1^{(1)} = f_2^{(1)} = n^{(1)} - 1$ и $f_1^{(0)} = f_2^{(0)} = n^{(0)} - 1$. Вычислим также общие средние $\bar{x}_1 = \left(n^{(1)} \overline{x_1^{(1)}} + n^{(0)} \overline{x_1^{(0)}} \right) / n$; $\bar{x}_2 = \left(n^{(1)} \overline{x_2^{(1)}} + n^{(0)} \overline{x_2^{(0)}} \right) / n$.

Запишем выражение (14.1) для средних значений обеих групп

$$\overline{L^{(1)}} = b_0 + b_1 \overline{x_1^{(1)}} + b_2 \overline{x_2^{(1)}}, \qquad (14.2)$$

$$\overline{L^{(0)}} = b_0 + b_1\overline{x_1^{(0)}} + b_2\overline{x_2^{(0)}}. \qquad (14.3)$$

Обозначим $d_1 = \overline{x_1^{(1)}} - \overline{x_1^{(0)}}$, $d_2 = \overline{x_2^{(1)}} - \overline{x_2^{(0)}}$ и представим разность выражений (14.2) и (14.3) в виде

$$d = b_1 d_1 + b_2 d_2. \qquad (14.4)$$

Величину d рассматривают как характеристику разделения групп (по сути это расстояние между группами в факторном пространстве). Другой характеристикой служит дисперсия $S^2(d)$. Получим ее, используя правило суммирования дисперсий,

$$S^2(d) = b_1^2 S_1^2 + 2b_1 b_2 S_{12}^2 + b_2^2 S_2^2. \qquad (14.5)$$

Здесь $S_1^2 = S^2(d_1) = \left(f^{(1)} S^2(x_1^{(1)}) + f^{(0)} S^2(x_1^{(0)})\right) / \left(f^{(1)} + f^{(0)}\right)$,

$S_2^2 = S^2(d_2) = \left(f^{(1)} S^2(x_2^{(1)}) + f^{(0)} S^2(x_2^{(0)})\right) / \left(f^{(1)} + f^{(0)}\right)$,

$S_{12}^2 = \left(f^{(1)} r_{12}^{(1)} S(x_1^{(1)}) S(x_2^{(1)}) + f^{(0)} r_{12}^{(0)} S(x_1^{(0)}) S(x_2^{(0)})\right) / \left(f^{(1)} + f^{(0)}\right)$

Рассмотрим безразмерное отношение $d^2 / S^2(d)$. Его максимум наилучшим образом характеризует разделение групп. Это отношение тем больше, чем больше d и чем меньше $S^2(d)$. Значения d и $S^2(d)$ зависят от коэффициентов b_1 и b_2. Чтобы найти значения коэффициентов, при которых отношение $d^2 / S^2(d)$ принимает максимальное значение, достаточно приравнять нулю частные производные от него по b_1 и b_2 :

$$\frac{d^2}{S^2(d)} \cdot \left(\frac{2}{d} \frac{\partial d}{\partial b_j} - \frac{1}{S^2(d)} \frac{\partial S^2(d)}{\partial b_j} \right) = 0, \quad j = 1,2. \qquad (14.6)$$

В результате получим два уравнения с двумя неизвестными:

$$\frac{d_1}{b_1 d_1 + b_2 d_2} = \frac{b_1 S_1^2 + b_2 S_{12}^2}{b_1^2 S_1^2 + 2b_1 b_2 S_{12}^2 + b_2^2 S_2^2}, \qquad (14.7)$$

$$\frac{d_2}{b_1 d_1 + b_2 d_2} = \frac{b_1 S_{12}^2 + b_2 S_2^2}{b_1^2 S_1^2 + 2b_1 b_2 S_{12}^2 + b_2^2 S_2^2}. \qquad (14.8)$$

Здесь нас ожидает неприятный сюрприз: поскольку система уравнений оказалась однородной, выразить коэффициенты b_1 и b_2 независимо друг от друга не удается. Но разделим уравнение (14.7) на (14.8)

$$\frac{d_1}{d_2} = \frac{b_1 S_1^2 + b_2 S_{12}^2}{b_1 S_{12}^2 + b_2 S_2^2}. \qquad (14.9)$$

Умножим числитель и знаменатель в левой части выражения (14.9) на одно и то же безразмерное неизвестное, пока, число A, такое, чтобы числители и знаменатели левой и

правой частей оказались одинаковыми. Тогда получим снова систему из двух уравнений, но уже с тремя неизвестными

$$\begin{cases} b_1 S_1^2 + b_2 S_{12}^2 = A d_1, \\ b_1 S_{12}^2 + b_2 S_2^2 = A d_2. \end{cases} \tag{14.10}$$

Решим ее относительно b_1 и b_2 :

$$b_1 = A\frac{d_1 S_2^2 - d_2 S_{12}^2}{S_1^2 S_2^2 - \left(S_{12}^2\right)^2}, \quad b_2 = A\frac{d_2 S_1^2 - d_1 S_{12}^2}{S_1^2 S_2^2 - \left(S_{12}^2\right)^2}. \tag{14.11}$$

Как же исключить A? Обратимся к уравнению (14.1). Свободный член b_0 определяет только уровень отсчета L по числовой шкале. Удобно принять в качестве условия наилучшего разделения двух групп $L = 0$. Принимается, что это условие должно выполняться для средних значений $\bar{x}_1$ и $\bar{x}_2$. Тогда

$$b_0 + A\frac{d_1 S_2^2 - d_2 S_{12}^2}{S_1^2 S_2^2 - \left(S_{12}^2\right)^2}\bar{x}_1 + A\frac{d_2 S_1^2 - d_1 S_{12}^2}{S_1^2 S_2^2 - \left(S_{12}^2\right)^2}\bar{x}_2 = 0. \tag{14.12}$$

Отсюда

$$-\frac{b_0}{A}\left(S_1^2 S_2^2 - S_{12}^4\right) = \left(d_1 S_2^2 - d_2 S_{12}^2\right)\bar{x}_1 + \left(d_2 S_1^2 - d_1 S_{12}^2\right)\bar{x}_2. \tag{14.13}$$

В левой части выражения (14.13) содержатся неизвестные b_0 и A. Зато в правой части все величины известны. Следовательно, для вычисления левой части значения b_0 и A_0 нам просто не нужны. Обозначим

$$a_0 = \left(d_1 S_2^2 - d_2 S_{12}^2\right)\bar{x}_1 + \left(d_2 S_1^2 - d_1 S_{12}^2\right)\bar{x}_2,$$

$$a_1 = \left(d_1 S_2^2 - d_2 S_{12}^2\right) \text{ и } a_2 = \left(d_2 S_1^2 - d_1 S_{12}^2\right)$$

Теперь вместо (14.1) дискриминантную функцию в новом для L масштабе можно записать в виде

$$L = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 \tag{14.14}$$

или, что более удобно для вычислений

$$L = a_1(x_1 - \bar{x}_1) + a_2(x_2 - \bar{x}_2). \tag{14.15}$$

Чтобы провести в плоскости переменных x_1 и x_2 разделительную прямую, положим $L = 0$. Выбрав два значения x_1' и x_1'', рассчитаем для них x_2' и x_2''. Прямая, проходящая через точки $(x_1',\ x_2')$ и $(x_1'',\ x_2'')$, служит границей, разделяющей области появления и отсутствия явления. Можно рассчитать и нанести на график доверительные границы дискриминантной функции. Вычислим

$$\varepsilon_{\bar{L}} = t_{1-\alpha/2,f} \cdot \frac{S(L)}{\sqrt{n}}, \tag{14.16}$$

где $t_{1-\alpha/2,f}$ – коэффициент Стьюдента, $f = n-1$ – число степеней свободы. Дисперсия

$$S^2(L) = a_1^2 S_1^2 + 2a_1 a_2 S_{12}^2 + a_2^2 S_2^2. \qquad (14.17)$$

Подставляя в выражение (14.14) вместо L значения $+\varepsilon_{\overline{L}}$ и $-\varepsilon_{\overline{L}}$, тем же способом, что и выше, получим две прямые, параллельные линии дискриминантной функции.

При анализе результатов измерений, не вошедших в обучающую выборку, формально достаточно подставить в выражение (14.14) значения $x_{1\text{изм}}$ и $x_{2\text{изм}}$. Если $L > 0$ – явление ожидается, если $L < 0$ – нет. Знание доверительных границ функции L позволяет судить о значимости формального заключения.

2. Решим более сложную задачу. Она в одинаковой мере пригодна для построения как нелинейной (неполной квадратической) функции, разделяющей на группы двухфакторное пространство, так и линейной дискриминантной функции для трех факторов. Соответствующие уравнения запишем в виде

$$L = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_1 x_2, \qquad (14.18)$$

$$L = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3. \qquad (14.19)$$

Выражение (14.19) можно рассматривать как функцию отклика дробной реплики 2^{3-1} от плана ПФЭ 2^3, в которой незначимое взаимодействие заменяется новым третьим фактором $x_3 = x_1 x_2$. С учетом этого замечания выражения (14.18) и (14.19) оказываются идентичными как и все последующие выкладки для них.

Процедура вычислений аналогична той, которая была использована ранее. По разделенной на две группы выборке рассчитаем $\overline{x_j^{(1)}}$, $\overline{x_j^{(0)}}$, $r_{ju}^{(1)}$, $r_{ju}^{(0)}$, $S^2(x_j^{(1)})$, $S^2(x_j^{(0)})$, $S_{ju}^{(1)2} = r_{ju}^{(1)} S(x_j^{(1)}) S(x_u^{(1)})$, $S_{ju}^{(0)2} = r_{ju}^{(0)} S(x_j^{(0)}) S(x_u^{(0)})$, $j,u = \overline{1,3}$, $j \neq u$. Теперь вычислим $d_j = \overline{x_j^{(1)}} - \overline{x_j^{(0)}}$ и найдем средние взвешенные по объемам обеих групп $\bar{x}_j$, S_j^2, и S_{ju}^2. Далее получим выражения для d и $S^2(d)$.

$$d = b_1 d_1 + b_2 d_2 + b_3 d_3, \qquad (14.20)$$

$$S^2(d) = b_1^2 S_1^2 + b_2^2 S_2^2 + b_3^2 S_3^2 + 2b_1 b_2 S_{12}^2 + 2b_1 b_3 S_{13}^2 + 2b_2 b_3 S_{23}^2 \qquad (14.21)$$

Дифференцируя отношение $d^2 / S^2(d)$ по коэффициентам b_1, b_2, b_3 и используя тот же прием, что и выше, получим неоднородную систему уравнений

$$\begin{cases} b_1 S_1^2 + b_2 S_{12}^2 + b_3 S_{13}^2 = A d_1, \\ b_1 S_{12}^2 + b_2 S_2^2 + b_3 S_{23}^2 = A d_2, \\ b_1 S_{13}^2 + b_2 S_{23}^2 + b_3 S_3^2 = A d_3. \end{cases} \qquad (14.22)$$

Решая систему (14.22) с помощью определителей, найдем

$$b_j = A\frac{D_j}{D},\quad j=\overline{1,3}, \tag{14.23}$$

где D – определитель матрицы, составленный из коэффициентов при неизвестных b_j (то есть из S_j^2 и S_{ju}^2), а D_j – определитель матрицы, составленный заменой j-ого столбца столбцом свободных членов d_j. Множитель A/D остается одинаковым во всех трех выражениях (14.23). Благодаря этому, подставляя b_1, b_2, b_3 в формулу (14.19), величину A/D можно исключить, изменяя только масштаб L.

Перейдем от b_j к новым коэффициентам a_j и раскроем определитель D_j:

$$a_1 = d_1S_2^2S_3^2 + d_2S_{13}^2S_{23}^2 + d_3S_{12}^2S_{23}^2 - d_1S_{23}^4 - d_2S_3^2S_{12}^2 - d_3S_2^2S_{13}^2,$$
$$a_2 = d_1S_{13}^2S_{23}^2 + d_2S_1^2S_3^2 + d_3S_{12}^2S_{13}^2 - d_1S_{12}^2S_3^2 - d_2S_{13}^4 - d_3S_1^2S_{23}^2,$$
$$a_3 = d_1S_{12}^2S_{23}^2 + d_2S_{12}^2S_{13}^2 + d_3S_1^2S_2^2 - d_1S_2^2S_{13}^2 - d_2S_1^2S_{23}^2 - d_3S_{12}^4.$$

Полагая $L=0$ и подставляя в уравнение (14.19) $\bar{x}_j$, найдем $-a_0 = a_1\bar{x}_1 + a_2\bar{x}_2 + a_3\bar{x}_3$.

Окончательно дискриминантная функция может быть представлена как

$$L = a_1(x_1 - \bar{x}_1) + a_2(x_2 - \bar{x}_2) + a_3(x_3 - \bar{x}_3). \tag{14.24}$$

Это линейная функция, разделяющая области осуществления явления и его отсутствия для трех факторов. Построение разделительной поверхности в трехмерном пространстве – задача довольно сложная. Удобнее и проще использовать формальную процедуру. Рассчитанное для проверяемого случая L сравнивают с нулем. Если $L>0,$, мы попадаем в область осуществления явления, при $L<0$ – в область отсутствия его.

Когда выражение (14.24) получено для двух факторов с учетом взаимодействия между ними ($x_3 = x_1x_2$, $\bar{x}_3 = \overline{x_1x_2}$), применяется процедура построения разделительной линии, описанная выше. Разумеется, формальная процедура сравнения L с нулем остается в силе и в этом случае.

Приведенная здесь методика построения дискриминантной функции может быть распространена и на большее число факторов. При этом конечно, добавление каждого нового фактора усложняет процедуру и резко увеличивает объем вычислений. Однако более важным является то обстоятельство, что при этом увеличивается погрешность функции, поскольку растет $S^2(L)$. Следовательно, качество разделения выборки на группы ухудшается.

Изложенная методика традиционного нахождения дискриминантной функции содержит серьезный, но невидимый с первого взгляда недостаток. В ней негласно предпола-

гается, что объемы групп $n^{(1)}$ и $n^{(0)}$, на которые делится выборка, примерно одинаковы. Сложнее обстоит дело, когда $n^{(1)} << n^{(0)}$, либо $n^{(1)} >> n^{(0)}$. Можно представить себе ситуацию, когда $d_j \neq 0$, то есть различие между группами существует, но, например, повторяемость явления при любых значениях x_1, x_2, в том числе и при $\overline{x_1^{(1)}}$, $\overline{x_2^{(1)}}$, меньше повторяемости отсутствия явления. Формально разделительная граница между группами может быть проведена, но заключение о возникновении явления при этих условиях окажется ошибочным. Предложенный ниже метод лишен этого недостатка.

14.2. Метод разности функций отклика

Решение задачи построения дискриминантной функции может быть существенно упрощено, если воспользоваться приемами, реализуемыми в планах активного эксперимента (раздел 13).

Рассмотрим сначала простейший случай. Пусть исследуется зависимость дихотомической величины от двух факторов: x_1 и x_2. Будем проводить эксперименты по схеме плана ПФЭ 2^2. Зададим область экспериментирования по каждому из факторов $x_j \in [x_{j,\text{макс}}, x_{j,\text{мин}}]$ и перейдем к кодированным переменным

$$\tilde{x}_{ji} = \frac{2x_{ji} - (x_{j,\text{макс}} + x_{j,\text{мин}})}{x_{\text{j,макс}} - x_{j,\text{мин}}}, \quad j = 1,2; \quad i = \overline{1,4}. \tag{14.25}$$

При проведении экспериментов естественно задать уровни факторов $x_{ji} = -1, +1$. В отличие от обычной схемы измерения, в каждой из четырех точек плана проведем многократно. При этом, с целью исключения влияния неконтролируемых факторов, эксперимент должен быть рандомизирован, то есть сочетания уровней факторов при очередном испытании следует выбирать случайным образом. Желательно в каждой точке плана выполнять одинаковое число испытаний ($n_i = const$, $i = \overline{1,4}$). В качестве результатов эксперимента в каждой точке плана получим значения числа испытаний, в которых явление наблюдалось $n_i^{(1)}$, и явление отсутствовало $n_i^{(0)}$, $i = \overline{1,4}$. Пронормируем эти значения на общее число всех испытаний $n = \sum_{i=1}^{4} n_i^{(0)} + \sum_{i=1}^{4} n_i^{(1)}$. Значения $y_i^{(1)} = n_i^{(1)}/n$ и $y_i^{(0)} = n_i^{(0)}/n$ являются частостями, то есть оценками вероятности. Будем рассматривать их как отклики. Выпишем сразу две неполные квадратические функции отклика для двух факторов с учетом взаимодействия

$$\hat{y}^{(1)} = b_0^{(1)} + b_1^{(1)}\tilde{x}_1 + b_2^{(1)}\tilde{x}_2 + b_{12}^{(1)}\tilde{x}_1\tilde{x}_2, \tag{14.26}$$

$$\hat{y}^{(0)} = b_0^{(0)} + b_1^{(0)}\tilde{x}_1 + b_2^{(0)}\tilde{x}_2 + b_{12}^{(0)}\tilde{x}_1\tilde{x}_2. \tag{14.27}$$

Коэффициенты $b_j^{(1)}$ и $b_j^{(0)}$, $j=\overline{0,3}$ вычисляются в каждом уравнении независимо друг от друга. Например

$$b_j^{(1)}=\left(\sum_{i=1}^{4}\tilde{x}_{ji}\cdot y_i^{(1)}\right)\Big/\left(\sum_{i=1}^{4}\tilde{x}_{ji}^2\right). \qquad (14.28)$$

Аналогично и для $b_j^{(0)}$. Разность выражений (14.26) и (14.27) представляет собой дискриминантную функцию

$$L=b_0^{(1)}-b_0^{(0)}+\left(b_1^{(1)}-b_1^{(0)}\right)\tilde{x}_1+\left(b_2^{(1)}-b_2^{(0)}\right)\tilde{x}_2+\left(b_{12}^{(1)}-b_{12}^{(0)}\right)\tilde{x}_1\tilde{x}_2 \qquad (14.29)$$

или, вводя очевидные обозначения,

$$L=a_0+a_1\tilde{x}_1+a_2\tilde{x}_2+a_{12}\tilde{x}_1\tilde{x}_2. \qquad (14.30)$$

Если $\hat{y}^{(1)}>\hat{y}^{(0)}$, вероятность появления события больше, чем его отсутствия, а при $\hat{y}^{(1)}<\hat{y}^{(0)}$ – наоборот. Полагая в (14.29) $L=0$, получим уравнение кривой, разделяющей области (1) и (0).

Принятый здесь план эксперимента сравнительно легко может быть реализован в лаборатории, однако в натурных условиях проведение измерений при фиксированных уровнях факторов осуществить значительно труднее. В таком случае можно рекомендовать следующий прием.

Разделим все факторное пространство некодированных значений x_1 и x_2 на четыре равные по площади части. Единичные далеко отстоящие точки можно отбросить. Для основного массива точек определим верхние ($x_{j\text{в}}$) и нижние ($x_{j\text{н}}$) границы по каждому фактору. Найдем центральную точку с координатами $\bar{x}_1=(x_{1\text{в}}+x_{1\text{н}})/2$ и $\bar{x}_2=(x_{2\text{в}}+x_{2\text{н}})/2$.. Через эту точку проведем прямые, параллельные осям факторов. Аналогично найдем геометрические центры каждого из четырех выделенных прямоугольников. Кодируя переменные, присвоим этим центрам координаты из сочетаний +1 и –1. Сосчитаем теперь число случаев $n_i^{(1)}$ и $n_i^{(0)}$,, содержащихся в каждом прямоугольнике. Будем рассматривать центры прямоугольников как точки плана ПФЭ 2^2, а $n_i^{(1)}/n$ и $n_i^{(0)}/n$ как отклики. Процедура построения дискриминантной функции описана выше.

Чтобы судить о качестве функции (14.30), найдем для нее доверительные границы. С этой целью в уравнение (14.30) подставим вместо L доверительный интервал погрешности ее определения $\varepsilon_{\bar{L}}=t_{1-\alpha/2,f}\cdot S_{\bar{L}}$. Здесь $t_{1-\alpha/2,f}$ – коэффициент Стьюдента, а $S_{\bar{L}}$ – СКО для $\bar{L}$. При этом $S_{\bar{L}}=S(L)/\sqrt{n}$. Найдем $S^2(L)$ как дисперсию результата косвенного измерения, определяемого выражением (14.30). Тогда, имея в виду, что для ортого-

нального плана ПФЭ коэффициент корреляции $r_{x_1x_2}=0$, а $S^2(\tilde{x}_1)=S^2(\tilde{x}_2)=n^\circ/(n^\circ-1)$ (n° – число точек плана, для ПФЭ 2^2 имеем $n^\circ=4$), получим

$$S^2(L)=S^2(\tilde{x}_1)\cdot\left[(a_1+a_{12}\tilde{x}_2)^2+(a_2+a_{12}\tilde{x}_1)^2\right]. \qquad (14.31)$$

Таким образом, контуры доверительного интервала для дискриминантной функции можно найти как корни квадратного уравнения

$$t^2_{1-\alpha/2,f}\cdot\frac{S^2(\tilde{x}_1)}{n}\left[(a_1+a_{12}\tilde{x}_2)^2+(a_2+a_{12}\tilde{x}_1)^2\right]=(a_0+a_1\tilde{x}_1+a_2\tilde{x}_2+a_{12}\tilde{x}_1\tilde{x}_2)^2. \qquad (14.32)$$

Подставляя в выражение (14.32) произвольные значения для одного из факторов, получим квадратное уравнение относительно другого фактора. Корни уравнения дают границы доверительного интервала дискриминантной функции. Уравнение пригодно и для оценки доверительных границ линейной дискриминантной функции, если в нем положить $a_{12}=0$.

Если в качестве нулевой гипотезы принять отсутствие явления, то оценкой вероятности ошибки первого рода $\hat{\alpha}$ может служить отношение числа случаев без явления, попадающих в область (1), $n^{(0|1)}$ к числу $n^{(0)}$, то есть $\hat{\alpha}=n^{(0|1)}/n^{(0)}$. В свою очередь, оценкой вероятности ошибки второго рода является отношение $\hat{\beta}=n^{(1|0)}/n^{(1)}$.

Проиллюстрируем реализацию этого метода на синтезированном примере. На рис. 14.1 приведено стилизованное факторное пространство для переменных x_1 и x_2. На нем разными значками отмечены случаи с явлением и без него.

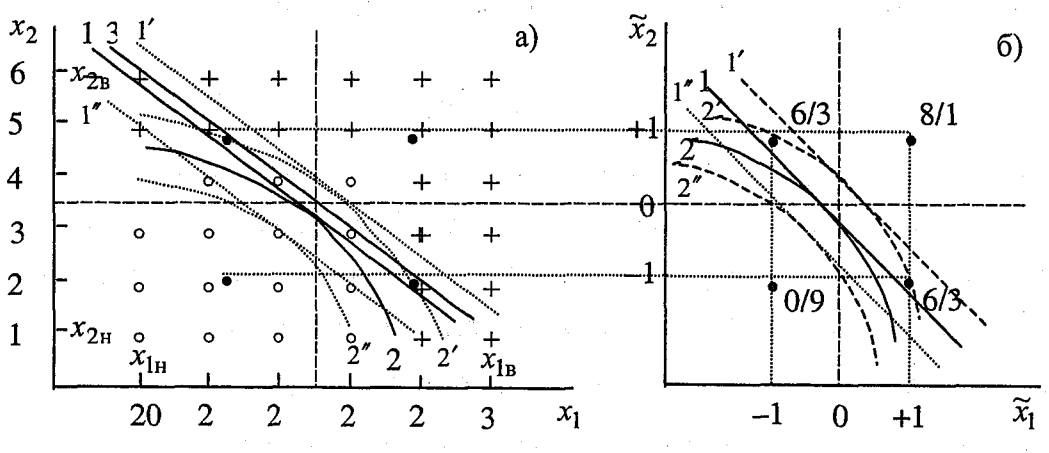


Рис. 14.1. Распределение результатов испытаний с наличием явления (+) и его отсутствием (•)

а) в пространстве некодированных факторов, б) в узлах плана ПФЭ 2^2, $n_i^{(1)}$ – числитель, $n_i^{(0)}$ – знаменатель. Прямая 1 – линейная дискриминантная функция (14.34), кривая 2 – неполная квадратическая функция (14.33), 1′ и 1″, 2′ и 2″ – соответствующие доверительные границы при $\alpha=0{,}05$. Прямая 3 – расчет по уравнению (14.35).

Сведем результаты в таблицу.

i	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	$n_i^{(1)}/n$	$n_i^{(0)}/n$
1	+	+	+	+	8/36	1/36
2	+	+	–	–	6/36	3/36
3	+	–	+	–	6/36	3/36
4	+	–	–	+	0	9/36

Коэффициенты $b_j^{(1)}$ и $b_j^{(0)}$ рассчитываются элементарно. Выпишем сразу функции отклика

$$\hat{y}^{(1)} = \frac{5}{36} + \frac{2}{36}\tilde{x}_1 + \frac{2}{36}\tilde{x}_2 - \frac{1}{36}\tilde{x}_1\tilde{x}_2,$$

$$\hat{y}^{(0)} = \frac{4}{36} - \frac{2}{36}\tilde{x}_1 - \frac{2}{36}\tilde{x}_2 + \frac{1}{36}\tilde{x}_1\tilde{x}_2.$$

Дискриминантную функцию получим как

$$L = \hat{y}^{(1)} - \hat{y}^{(0)} = \frac{1}{36} + \frac{4}{36}\tilde{x}_1 + \frac{4}{36}\tilde{x}_2 - \frac{2}{36}\tilde{x}_1\tilde{x}_2, \qquad (14.33)$$

либо, изменяя масштаб для L, в виде

$$L = 1 + 4\tilde{x}_1 + 4\tilde{x}_2 - 2\tilde{x}_1\tilde{x}_2. \qquad (14.34)$$

Исключая из последнего выражения слагаемое, учитывающее взаимодействие между факторами, получим линейную дискриминантную функцию

$$L = 1 + 4\tilde{x}_1 + 4\tilde{x}_2.$$

На рис. 14.1 построены разделительные линии (при $L = 0$): прямая 1 для линейной функции и кривая 2 для неполной квадратической. Как и следовало ожидать, кривая 2 лучше разделяет области появления и отсутствия явления. Оценки ошибок первого рода («ложная тревога») и второго рода («пропуск цели») для кривых 1 и 2 соответственно составили: $\hat{\alpha}_1 = 3/16$, $\hat{\beta}_1 = 2/20$ и $\hat{\alpha}_2 = 3/16$, $\hat{\beta}_2 = 0$. Здесь же на рисунке показаны двухсторонние доверительные границы при уровне значимости $\alpha = 0{,}05$ для обоих вариантов дискриминантной функции.

Рассмотрим для сравнения вариант расчета дискриминантной функции классическим методом. Опуская промежуточные вычисления, приведем сразу выражение для дискриминантной функции (14.4)

$$L = -1036{,}8 + 32{,}4x_1 + 64{,}8x_2. \qquad (14.35)$$

Расчет по формуле (14.35) при $L = 0$ представлен на рис. 14.1а прямой 3. Линии 1 и 3 параллельны друг другу, но последняя проходит через среднюю точку ($\bar{x}_1 = 25, \bar{x}_2 = 3{,}5$). Поэтому, несмотря на то, что ошибка первого рода по сравнению с функцией (14.34) стала меньше (2/16), ошибка второго рода увеличилась вдвое (4/20). (При этих оценках одну половину точек, лежащих на прямой, относили к области (1), а другую – к области (0)). Таким образом, функция (14.34) представляется предпочтительней функции (14.35).

Главный недостаток предлагаемого метода построения дискриминантной функции заключается в том, что рассеянные по факторному пространству точки искусственно центрируются в узлы плана. Возникающие при этом погрешности в проведении дискриминантной линии могут быть уменьшены, если факторное пространство делить не на четыре, а на большее число площадок. Можно, например, воспользоваться планом $2^2 + 2 \cdot 2 + 1$ (или, что то же самое, планом ПФЭ 3^2). Такой план представлен в разделе 13, табл. 13.6. В этом случае дискриминантная функция может быть выражена квадратическим полиномом. Единственным ограничением при переходе к более сложному плану является объем выборки. Для получения репрезентативных функций отклика требуется, чтобы распределение частностей по точкам плана было сравнительно гладким – без резких экстремумов, связанных со случайностью попадания результатов измерений в малые локальные объемы факторного пространства.

Метод легко может быть распространен на произвольное число факторов ($k > 2$). С этой целью достаточно использовать планы ПФЭ 2^k. Выбор плана определяется соотношением между числом факторов и объемом выборки. Вычислительная процедура при этом усложняется незначительно.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Агекян Т. А.* Основы теории ошибок для астрономов и физиков. – М.: Наука, 1972. – 172 с.

2. *Адлер Ю. П., Маркова Е. В., Грановский Ю. П.* Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий. – М.: Наука, 1976. – 279 с.

3. *Ахназарова С. Л., Кафаров В. В.* Методы оптимизации эксперимента в химической технологии. – М.: Высшая школа, 1985. – 327 с.

4. *Белов Н. Ф., Васильев В. А.* Практикум по климатологии. – Л.: изд. ЛГМИ, 1990. – 203с.

5. *Белоцерковский А. В.* Спектральный анализ в гидрометеорологии. – СПб.: изд. РГГМИ, 1993. – 64 с.

6. *Боровиков В.* STATISTICA: искусство анализа данных на компьютере. – СПб. – М.: Питер, 2001. – 650 с.

7. *Бурдун Г. Д., Марков Б. Н.* Основы метрологии. – М.: Изд-во стандартов, 1985. – 256 с.

8. *Вадзинский Р. Н.* Справочник по вероятностным распределениям. – СПб.: Наука, 2001. – 295 с.

9. *Вентцель Е. С., Овчаров Л. А.* Теория вероятностей и ее инженерные приложения. – М.: Высшая школа, 2000. – 480 с.

10. *Гмурман* В. Е. Теория вероятностей и математическая статистика. – М.: Высшая школа, 1999. – 479 с.

11. ГОСТ 16263-70 ГСИ. Метрология. Термины и определения. – 54 с.

12. ГОСТ 8.417-81 ГСИ. Единицы физических величин. – 40 с.

13. ГОСТ 8.207-76 ГСИ. Прямые измерения с многократными наблюдениями. Методы обработки результатов наблюдений. Основные положения.

14. *Деньгуб В. М., Смирнов В. Г.* Единицы величин: Словарь-справочник. — М.: Изд-во стандартов, 1990. – 240 с.

15. *Дубров А. М., Мхитарян В. С., Трошин Л. И.* Многомерные статистические методы. – М.: Финансы и статистика, 2000. – 352 с.

16. *Дьяконов В. П.* Справочник по алгоритмам и программам на языке бейсик для персональных ЭВМ. – М.: Наука, 1987. – 240 с.

17. *Ермаков С. М., Жиглявский А. А.* Математическая теория оптимального эксперимента. – М.: Наука, 1987. – 320 с.

18. *Ивотенко Б. А., Ильинский Н. Ф., Копылов И. П.* Планирование эксперимента в электромеханике. – М.: Энергия, 1975. – 164 с.

19. *Марчук Г. И.* Методы вычислительной математики. – М.: Наука, 1989. – 607 с.

20. *Налимов В. В.* Теория эксперимента. – М.: Наука, 1971. – 208 с.

21. Основные термины в области метрологии: Словарь-справочник. /Юдин М. Ф., Селиванов М. Н., Тищенко О. Ф., Скороходов А. И.: Под ред. Тарбеева Ю. В. – М.: Изд-во стандартов, 1989. – 113 с.

22. *Пановский Г. А., Брайер Г. В.* Статистические методы в метеорологии / Пер. с англ. – Л.: Гидрометеоиздат, 1972. – 209 с.

23. *Пустыльник Е. И.* Статистические методы анализа и обработки наблюдений. – М.: Наука, 1968. – 288с.

24. *Селиванов М. Н., Фридман А. Э., Кудряшова Ж. Ф.* Качество измерений. Метрологическая справочная книга. – Л.: Лениздат, 1987. – 295 с.

25. *Сергеев А. Г., Крохин В. В.* Метрология: Учебное пособие для вузов. – М.: Логос, 2000. – 408 с.

26. *Смирнов Н. В., Дунин-Барковский И. В.* Курс теории вероятностей и математической статистики для технических приложений. – М.: Наука, 1969. – 512 с.

27. *Худсон Д.* Статистика для физиков / Пер. с англ. – М.: Мир, 1967. – 242 с.

28. *Шелутко В. А.* Техника статистических вычислений в гидрологии. – Л.: Изд. ЛПИ (ЛГМИ), 1977. – 174 с.

29. *Шенк Х.* Теория инженерного эксперимента / Пер. с англ. – М.: Мир, 1972. – 382 с.

Значение функции Лапласа. Квантильные значения стандартного распределения $z_{1-\alpha}$, удовлетворяющие условию $F(z_{1-\alpha}) = 0{,}5 + \Phi(z_{1-\alpha}) = 1-\alpha$

z	$\Phi(z)$	z	$\Phi(z)$	z	$\Phi(z)$	z	$\Phi(z)$
0,00	0,0000	0,64	0,2389	1,29	0,4015	1,94	0,4738
0,01	0,0040	0,65	0,2422	1,30	0,4032	1,95	0,4744
0,02	0,0080	0,66	0,2454	1,31	0,4049	1,96	0,4750
0,03	0,0120	0,67	0,2486	1,32	0,4066	1,97	0,4756
0,04	0,0160	0,68	0,2517	1,33	0,4082	1,98	0,4761
0,05	0,0199	0,69	0,2549	1,34	0,4099	1,99	0,4767
0,06	0,0239	0,70	0,2580	1,35	0,4115	2,00	0,4772
0,07	0,0279	0,71	0,2611	1,36	0,4131	2,02	0,4783
0,08	0,0319	0,72	0,2642	1,37	0,4147	2,04	0,4793
0,09	0,0359	0,73	0,2673	1,38	0,4162	2,06	0,4803
0,10	0,0398	0,74	0,2703	1,39	0,4177	2,08	0,4812
0,11	0,0438	0,75	0,2734	1,40	0,4192	2,10	0,4821
0,12	0,0478	0,76	0,2764	1,41	0,4207	2,12	0,4830
0,13	0,0517	0,77	0,2794	1,42	0,4222	2,14	0,4838
0,14	0,0557	0,78	0,2823	1,43	0,4236	2,16	0,4846
0,15	0,0596	0,79	0,2852	1,44	0,4251	2,18	0,4854
0,16	0,0636	0,80	0,2881	1,45	0,4265	2,20	0,4861
0,17	0,0675	0,81	0,2910	1,46	0,4279	2,22	0,4868
0,18	0,0714	0,82	0,2939	1,47	0,4292	2,24	0,4875
0,19	0,0753	0,83	0,2967	1,48	0,4306	2,26	0,4881
0,20	0,0793	0,84	0,2995	1,49	0,4319	2,28	0,4887
0,21	0,0832	0,85	0,3023	1,50	0,4332	2,30	0,4893
0,22	0,0871	0,86	0,3051	1,51	0,4345	2,32	0,4898
0,23	0,0910	0,87	0,3078	1,52	0,4357	2,34	0,4904
0,24	0,0948	0,88	0,3106	1,53	0,4370	2,36	0,4909
0,25	0,0987	0,89	0,3133	1,54	0,4382	2,38	0,4913
0,26	0,1026	0,90	0,3159	1,55	0,4394	2,40	0,4918
0,27	0,1064	0,91	0,3186	1,56	0,4406	2,42	0,4922
0,28	0,1103	0,92	0,3212	1,57	0,4418	2,44	0,4927
0,29	0,1141	0,93	0,3238	1,58	0,4429	2,46	0,4931
0,30	0,1179	0,94	0,3264	1,59	0,4441	2,48	0,4934
0,31	0,1217	0,95	0,3289	1,60	0,4452	2,50	0,4938
0,32	0,1255	0,96	0,3315	1,61	0,4463	2,52	0,4941
0,33	0,1293	0,97	0,3340	1,62	0,4474	2,54	0,4945
0,34	0,1331	0,98	0,3365	1,63	0,4484	2,56	0,4948
0,35	0,1368	0,99	0,3389	1,64	0,4495	2,58	0,4951
0,36	0,1406	1,00	0,3413	1,65	0,4505	2,60	0,4953
0,36	0,1443	1,01	0,3438	1,66	0,4515	2,62	0,4956
0,37	0,1480	1,02	0,3461	1,67	0,4525	2,64	0,4959
0,38	0,1517	1,03	0,3485	1,68	0,4535	2,66	0,4961
0,39	0,1554	1,04	0,3508	1,69	0,4545	2,68	0,4963
0,40	0,1591	1,05	0,3531	1,70	0,4554	2,70	0,4965
0,41	0,1628	1,06	0,3554	1,71	0,4564	2,72	0,4967
0,42	0,1628	1,07	0,3577	1,72	0,4573	2,74	0,4969
0,43	0,1664	1,08	0,3599	1,73	0,4582	2,76	0,4971
0,44	0,1700	1,09	0,3621	1,74	0,4591	2,78	0,4973
0,45	0,1736	1,10	0,3643	1,75	0,4599	2,80	0,4974
0,46	0,1772	1,11	0,3665	1,76	0,4608	2,82	0,4976
0,47	0,1808	1,12	0,3686	1,77	0,4616	2,84	0,4977
0,48	0,1844	1,13	0,3708	1,78	0,4625	2,86	0,4979
0,49	0,1879	1,14	0,3729	1,79	0,4633	2,88	0,4980
0,50	0,1915	1,15	0,3749	1,80	0,4641	2,90	0,4981
0,51	0,1950	1,16	0,3770	1,81	0,4649	2,92	0,4982
0,52	0,1985	1,17	0,3790	1,82	0,4656	2,94	0,4984
0,53	0,2019	1,18	0,3810	1,83	0,4664	2,96	0,49846

продолжение Приложения I

0,54	0,2054	1,19	0,3830	1,84	0,4671	2,98	0,49856
0,55	0,2088	1,20	0,3849	1,85	0,4678	3,00	0,49865
0,56	0,2123	1,21	0,3869	1,86	0,4686	3,20	0,49931
0,57	0,2157	1,22	0,3883	1,87	0,4693	3,40	0,49966
0,58	0,2190	1,23	0,3907	1,88	0,4699	3,60	0,49984
0,59	0,2224	1,24	0,3925	1,89	0,4706	3,80	0,499928
0,60	0,2257	1,25	0,3944	1,90	0,4713	4,00	0,499968
0,61	0,2291	1,26	0,3962	1,91	0,4719	5,00	0,499997
0,62	0,2324	1,27	0,3980	1,92	0,4726		
0,63	0,2357	1,28	0,3997	1,93	0,4732		

Приложение II

Коэффициенты Стьюдента. Критические значения $t_{1-\alpha/2,f}$ и $t_{1-\alpha,f}$ распределения Стьюдента

Число степеней свободы f	Уровень значимости α (двусторонняя критическая область)					
	0.10	0.05	0.02	0.01	0.002	0.001
1	6.31	12.7	31.82	63.7	318.3	637.0
2	2.92	4.30	6.97	9.92	22.33	31.6
3	2.38	3.18	4.54	5.84	10.22	12.9
4	2.13	2.78	3.75	4.60	7.17	8.61
5	2.01	2.67	3.37	4.03	5.89	6.86
6	1.94	2.45	3.14	3.71	5.21	5.96
7	1.89	2.36	3.00	3.50	4.79	5.40
8	1.86	2.31	2.90	3.36	4.80	5.04
9	1.83	2.26	2.82	3.25	4.30	4.78
10	1.81	2.23	2.76	3.17	4.14	4.59
11	1.80	2.20	2.72	3.11	4.03	4.44
12	1.78	2.18	2.68	3.05	3.93	4.32
13	1.77	2.16	2.65	3.01	3.85	4.22
14	1.76	2.14	2.62	2.98	3.79	4.14
15	1.75	2.13	2.60	2.95	3.73	4.07
16	1.75	2.12	2.58	2.92	3.69	4.01
17	1.74	2.11	2.57	2.90	3.65	3.96
18	1.73	2.10	2.55	2.88	3.61	3.92
19	1.73	2.09	2.54	2.86	3.58	3.88
20	1.73	2.09	2.53	2.85	3.55	3.85
21	1.72	2.08	2.52	2.83	3.53	3.82
22	1.72	2.07	2.51	2.82	3.51	3.79
23	1.71	2.07	2.50	2.81	3.49	3.77
24	1.71	2.06	2.49	2.80	3.47	3.74
25	1.71	2.06	2.49	2.79	3.45	3.72
26	1.71	2.06	2.48	2.78	3.44	3.71
27	1.71	2.05	2.47	2.77	3.42	3.69
28	1.70	2.05	2.46	2.76	3.40	3.66
29	1.70	2.05	2.46	2.76	3.40	3.66
30	1.70	2.04	2.46	2.75	3.39	3.65
40	1.68	2.02	2.42	2.70	3.31	3.55
60	1.67	2.00	2.39	2.66	3.23	3.46
120	1.66	1.98	2.36	2.62	3.17	3.37
∞	1.64	1.96	2.33	2.58	3.09	3.29
	0.05	0.025	0.01	0.005	0.001	0.0005
	Уровень значимости α (односторонняя критическая область)					

Приложение III

Квантильные значения $\chi^2_{1-\alpha,f}$ распределения Пирсона.

Число степеней	Уровень значимости α					
	0.01	0.025	0.05	0.98	0.975	0.9
1	6.6	5.0	3.8	0.0039	0.00098	0.00016
2	9.2	7.4	6.0	0.103	0.051	0.020
3	11.3	9.4	7.8	0.352	0.216	0.115
4	13.3	11.1	9.5	0.711	0.484	0.297
5	15.1	12.8	11.1	1.15	0.831	0.554
6	16.8	14.4	12.6	1.64	1.24	0.872
7	18.5	16.0	14.1	2.17	1.69	1.24
8	20.1	17.5	15.5	2.73	2.18	1.65
9	21.7	19.0	16.9	3.33	2.70	2.09
10	23.2	20.5	18.3	3.94	3.25	2.58
11	24.7	21.9	19.7	4.57	3.82	3.05
12	26.2	23.3	21.0	5.23	4.40	3.57
13	27.7	24.7	22.4	5.89	5.01	4.11
14	29.1	26.1	23.7	6.57	5.63	4.66
15	30.6	27.5	25.0	7.26	6.26	5.23
16	32.0	28.8	26.3	7.96	6.91	5.81
17	33.4	30.2	27.6	8.67	7.56	6.41
18	34.8	31.5	28.9	9.39	8.23	7.01
19	36.2	32.9	30.1	10.1	8.91	7.63
20	37.6	34.2	31.4	10.9	9.59	8.26
21	38.9	35.5	32.7	11.6	10.3	8.90
22	40.3	36.8	33.9	12.3	11.0	9.54
23	41.6	38.1	35.2	13.1	11.7	10.2
24	43.0	39.4	36.4	13.8	12.4	10.9
25	44.3	40.6	37.7	14.6	13.1	11.5
26	45.6	41.9	38.9	15.4	13.8	12.2
27	47.0	43.2	40.1	16.2	14.6	12.9
28	48.3	44.5	41.3	16.9	15.3	13.6
29	49.6	45.7	42.6	17.7	16.0	14.3
30	5.9	47.0	43.8	18.5	16.8	15.0

Приложение IV

Квантили распределения Фишера $F_{1-\alpha,f_1,f_2}$ для $\alpha = 0{,}05$

(f_1, f_2 – число степеней свободы большей и меньшей дисперсий, соответственно).

f_2	f_1								
	1	2	3	4	5	6	12	24	∞
1	164,4	199,5	215,7	224,6	230,2	234,0	244,9	249,0	254,3
2	18,5	19,2	19,2	19,3	19,3	19,3	19,4	19,5	19,5
3	10,1	9,6	9,3	9,1	9,0	8,9	8,7	8,6	8,5
4	7,7	6,9	6,6	6,4	6,3	6,2	5,9	5,8	5,6
5	6,6	5,8	5,4	5,2	5,1	5,0	4,7	4,5	4,4
6	6,0	5,1	4,8	4,5	4,4	4,3	4,0	3,8	3,7
7	5,6	4,7	4,4	4,1	4,0	3,9	3,6	3,4	3,2
8	5,3	4,5	4,1	3,8	3,7	3,6	3,3	3,1	2,9
9	5,1	4,3	3,9	3,6	3,5	3,4	3,1	2,9	2,7
10	5,0	4,1	3,7	3,5	3,3	3,2	2,9	2,7	2,5
11	4,8	4,0	3,6	3,4	3,2	3,1	2,8	2,6	2,4

продолжение Приложения IV

12	4,8	3,9	3,5	3,3	3,1	3,0	2,7	2,5	2,3
13	4,7	3,8	3,4	3,2	3,0	2,9	2,6	2,4	2,2
14	4,6	3,7	3,3	3,1	3,0	2,9	2,5	2,3	2,1
15	4,5	3,7	3,3	3,1	2,9	2,8	2,5	2,3	2,1
16	4,5	3,6	3,2	3,0	2,9	2,7	2,4	2,2	2,0
17	4,5	3,6	3,2	3,0	2,8	2,7	2,4	2,2	2,0
18	4,4	3,6	3,2	2,9	2,8	2,7	2,3	2,1	1,9
19	4,4	3,5	3,1	2,9	2,7	2,6	2,3	2,1	1,8
20	4,4	3,5	3,1	2,9	2,7	2,6	2,3	2,1	1,8
22	4,3	3,4	3,1	2,8	2,7	2,6	2,2	2,0	1,8
24	4,3	3,4	3,0	2,8	2,6	2,5	2,2	2,0	1,7
26	4,2	3,4	3,0	2,7	2,6	2,4	2,1	1,9	1,7
28	4,2	3,3	2,9	2,7	2,6	2,4	2,1	1,9	1,6
30	4,2	3,3	2,9	2,7	2,5	2,4	2,1	1,9	1,6
40	4,1	3,2	2,9	2,6	2,5	2,3	2,0	1,8	1,5
60	4,0	3,2	2,8	2,5	2,4	2,3	1,9	1,7	1,4
120	3,9	3,1	2,7	2,5	2,3	2,2	1,8	1,6	1,3
∞	3,8	3,0	2,6	2,4	2,2	2,1	1,8	1,5	1,0

Приложение V

Критические значения параметра $v_{1-\alpha,n}$ (n – объем выборки)

n	Уровень значимости α				
	0,20	0,10	0,05	0,025	0,01
3	1.3785	1,4059	1,4122	1,4137	1,4141
4	1,5441	1,6420	1,6880	1,7102	1,7234
5	1,6452	1,7848	1,8670	1,9171	1,9554
6	1,7228	1,8863	1,9937	2,0667	2,1301
7	1,7872	1,9657	2,0905	2,1812	2,2659
8	1,8426	2,0311	2,1687	2,2728	2,3751
9	1,8912	2,0870	2,2340	2,3487	2,4653
10	1,9346	2,1356	2,2901	2,4132	2,5417
11	1,9737	2,1788	2,3391	2,4691	2,6076
12	2,0093	2,2176	2,3826	2,5183	2,6653
13	2,0419	2,2527	2,4217	2,5622	2,7164
14	2,0720	2,2849	2,4571	2,6017	2,7622
15	2,0999	2,3145	2,4895	2,6376	2,8036
16	2,1259	2,3419	2,5193	2,6705	2,8414
17	2,1503	2,3674	2,5469	2,7008	2,8759
18	2,1732	2,3913	2,5725	2,7288	2,9078
19	2,1947	2,4137	2,5965	2,7549	2,9374
20	2,2151	2,4348	2,6190	2,7793	2,9649
21	2,2344	2,4547	2,6402	2,8022	2,9907
22	2,2528	2,4736	2,6601	2,8237	3,0148
23	2,2703	2,4915	2,6790	2,8440	3,0376
24	2,2869	2,5086	2,6970	2,8632	3,0590
25	2,3029	2,5248	2,7141	2,8814	3,0793
26	2,3181	2,5404	2,7304	2,8988	3,0986
27	2,3328	2,5553	2,7459	2,9153	3,1169
28	2,3469	2,5696	2,7608	2,9311	3,1344
29	2,3604	2,5833	2,7750	2,9462	3,1511
30	2,3734	2,5965	2,7887	2,9607	3,1671
31	2,3860	2,6092	2,8019	2,9746	3,1824

продолжение Приложения V

32	2,3981	2,6214	2,8146	2,9880	3,1971
33	2,4098	2,6332	2,8268	3,0008	3,2112
34	2,4212	2,6446	2,8385	3,0132	3,2248
35	2,4322	2,6557	2,8499	3,0252	3,2379
36	2,4428	2,6664	2,8609	3,0367	3,2505
37	2,4532	2,6767	2,8716	3,0479	3,2627
38	2,4632	2,6868	2,8819	3,0587	3,2745
39	2,4729	2,6965	2,8919	3,0691	3,2859
40	2,4824	2,7060	2,9016	3,0793	3,2970
45	2,5262	2,7497	2,9463	3,1258	3,3476
50	2,5649	2,7883	2,9855	3,1665	3,3919
55	2,5996	2,8227	3,0205	3,2027	3,4312
60	2,6310	2,8538	3,0519	3,2352	3,4665
65	2,6596	2,8821	3,0805	3,2647	3,4986
70	2,6859	2,9081	3,1067	3,2918	3,5280
80	2,7328	2,9543	3,1533	3,3397	3,5804
90	2,7737	2,9945	3,1937	3,3813	3,6262
100	2,8098	3,0300	3,2294	3,4180	3,6670
110	2,8422	3,0618	3,2613	3,4509	3,7038
120	2,8714	3,0905	3,2901	3,4807	3,7376
150	2,9454	3,1631	3,3630	3,5563	3,8253
200	3,0385	3,2546	3,4552	3,6530	3,9445

Приложение VI

Квантили распределения Кочрена $G_{1-\alpha,f,k}$ для $\alpha = 0{,}05$

n	f													
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	16	36	144	∞
2	9985	9750	9392	9057	8772	8534	8332	8159	8010	7880	7341	6602	5813	5000
3	9669	8709	7977	7454	7071	6771	6530	6333	6167	6025	5466	4748	4031	3333
4	9065	7679	6841	6287	5895	5598	5365	5175	5017	4884	4366	3720	3093	2500
5	8412	6838	5981	5441	5065	4783	4564	4387	4241	4118	3645	3066	2513	2000
6	7808	6161	5321	4803	4447	4184	3980	3817	3682	3568	3135	2612	2119	1667
7	7271	5612	4800	4307	3974	3726	3535	3384	3259	3154	2756	2278	1233	1429
8	6798	5157	4377	3910	3595	3362	3185	3043	2926	2829	2462	2022	1616	1250
9	6385	4775	4027	3584	4286	3067	2901	2768	2659	2568	2226	1820	1446	1111
10	6020	4450	3733	3311	3029	2823	2666	2541	2439	2353	2032	1655	1308	1000
12	5410	3924	3264	2880	2624	2439	2299	2187	2098	2020	1737	1403	1100	0833
15	4709	3346	2758	2419	2195	2034	1911	1815	1736	1671	1429	1144	0889	0667
20	3894	2705	2205	1921	1735	1602	1501	1422	1357	1303	1108	0879	0675	0500
24	3434	2354	1907	1656	1493	1374	1286	1216	1160	1113	0942	0743	0567	0417
30	2929	1980	1593	1377	1237	1137	1061	1002	0958	0921	0771	0604	0457	0333
40	2370	1576	1259	1082	0968	0887	0827	0780	0745	0713	0595	0462	0347	0250
60	1737	1131	0895	0765	0682	0623	0583	0552	0520	0497	0411	0316	0234	0167
120	0998	0632	0495	0419	0371	0337	0312	0292	0279	0266	0218	0165	0120	0083
∞	0000	0000	0000	0000	0000	0000	0000	0000	0000	0000	0000	0000	0000	0000

Критические значения критерия Дункана $r_{1-\alpha,p,f}$ при $\alpha = 0{,}05$

n	p															
	2	3	4	5	6	7	8	9	10	12	14	16	18	20	50	100
1	18,	18,0	18,0	18,0	18,0	18,0	18,0	18,0	18,0	18,0	18,0	18,0	18,0	18,0	18,0	18,0
2	6,0	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09
3	4,5	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50
4	3,9	4,01	4,02	4,02	4,02	4,02	4,02	4,02	4,02	4,02	4,02	4,02	4,02	4,02	4,02	4,02
5	3,6	3,74	3,79	3,83	3,83	3,83	3,83	3,83	3,83	3,83	3,83	3,83	3,83	3,83	3,83	3,83
6	3,4	3,58	3,64	3,68	3,68	3,68	3,68	3,68	3,68	3,68	3,68	3,68	3,68	3,68	3,68	3,68
7	3,3	3,47	3,54	3,58	3,60	3,61	3,61	3,61	3,61	3,61	3,61	3,61	3,61	3,61	3,61	3,61
8	3,2	3,39	3,47	3,52	3,55	3,56	3,56	3,56	3,56	3,56	3,56	3,56	3,56	3,56	3,56	3,56
9	3,2	3,34	3,41	3,47	3,50	3,52	3,52	3,52	3,52	3,52	3,52	3,52	3,52	3,52	3,52	3,52
10	3,1	3,30	3,37	3,43	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47	3,47	3,47	3,47	3,47	3,48	3,48	3,48
11	3,1	3,27	3,35	3,39	3,43	3,44	3,45	3,46	3,46	3,46	3,46	3,46	3,47	3,48	3,48	3,48
12	3,0	3,23	3,33	3,36	3,40	3,42	3,44	3,44	3,46	3,46	3,46	3,46	3,47	3,48	3,48	3,48
13	3,0	3,21	3,30	3,35	3,38	3,41	3,42	3,44	3,45	3,45	3,46	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47
14	3,0	3,18	3,27	3,33	3,37	3,39	3,41	3,42	3,44	3,45	3,46	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47
15	3,0	3,16	3,25	3,31	3,36	3,38	,0	3,42	3,43	3,44	3,45	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47
16	3,0	3,15	3,23	3,30	3,34	3,37	3,39	3,41	3,43	3,44	3,45	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47
17	2,9	3,13	3,22	3,28	3,33	3,36	3,38	3,42	3,42	3,44	3,45	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47
18	2,9	3,12	3,21	3,27	3,2	3,35	3,37	3,39	3,41	3,43	3,45	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47
19	2,9	3,11	3,19	3,26	3,31	3,35	3,37	3,39	3,41	3,43	3,44	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47
20	2,9	3,10	3,18	3,25	3,30	3,34	3,36	3,38	3,40	3,43	3,44	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47
22	2,9	3,08	3,17	3,24	3,29	3,32	3,35	3,37	3,39	3,42	3,44	3,45	3,46	3,47	3,47	3,47
24	2,9	3,07	3,15	3,22	3,28	3,31	3,34	3,37	3,38	3,41	3,44	3,45	3,46	3,47	3,47	3,47
26	2,9	3,06	3,14	3,21	3,27	3,30	3,34	3,36	3,38	3,41	3,43	3,45	3,46	3,47	3,47	3,47
28	2,9	3,04	3,13	3,20	3,26	3,30	3,33	3,35	3,37	3,40	3,43	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47
30	2,8	3,04	3,12	3,20	3,25	3,29	3,32	3,35	3,37	3,40	3,43	3,44	3,46	3,47	3,47	3,47
40	2,8	3,01	3,10	3,17	3,22	3,27	3,30	3,33	3,35	3,39	3,42	3,44	3,46	3,47	3,47	3,47
60	2,8	2,98	3,08	3,14	3,20	3,24	3,28	3,31	3,33	3,37	3,40	3,43	3,45	3,47	3,48	3,48
100	2,8	,95	3,05	3,12	3,18	3,22	3,26	3,29	3,32	3,36	3,40	3,42	3,45	3,47	3,53	3,53
∞	2,7	2,92	3,02	3,09	3,15	3,19	3,23	3,26	3,29	3,34	3,38	3,41	3,44	3,47	3,61	3,67

СОДЕРЖАНИЕ

	Стр.
Предисловие	3
1. Общие сведения из метрологии	5
1.1. Измерения. Термины и определения	5
1.2. Система единиц	9
1.3. Погрешности измерений. Классификация погрешностей	16
1.3.1. Классификация погрешностей	16
1.3.2. Систематические погрешности	19
1.3.3. Классы точности средств измерений	20
2. Распределение случайных погрешностей	23
2.1. Функция распределения случайной величины	23
2.2. Нормальное распределение погрешностей	28
2.3. Другие виды распределения погрешностей	32
2.3.1. Равномерное распределение	32
2.3.2. Треугольное распределение	33
2.3.3. Трапециевидное и антимодальные распределения	35
3. Представление результатов измерений. Оценивание параметров теоретического распределения	38
3.1. Точечные оценки	38
3.1.1. Оценка параметров нормального распределения	40
3.1.2. Оценка параметров равномерного распределения	43
3.1.3. Оценка параметров распределения Лапласа	44
3.2. Доверительные границы погрешности (интервальное оценивание)	46
3.2.1. Доверительные границы погрешности результатов прямых равноточных измерений	46
3.2.2. Доверительные границы погрешности среднего квадратического отклонения	54
4. Обработка результатов измерений. Проверка гипотезы соответствия эмпирического распределения погрешностей теоретическому	59
4.1. Общие принципы проверки статистических гипотез	59
4.2. Графические методы	61
4.2.1. Гистограмма и эмпирическое распределение	61
4.2.2. Использование вероятностных сеток	67

4.3. Аналитические методы 70
4.3.1. Критерий Колмогорова 70
4.3.2. Методы, рекомендуемые ГОСТом 71
4.4. Преобразование распределений 77
4.5. Доверительные границы погрешности результата измерения при неизвестном законе распределения 81
5. Исключение грубых погрешностей 84
5.1 Исключение промахов при известном $\sigma(x)$ 84
5.2. Исключение промахов при неизвестном $\sigma(x)$ 87
5.3. Исключение промахов при произвольных законах распределения погрешностей 89
6. Суммирование погрешностей 94
6.1. Погрешности косвенных измерений 94
6.1.1. Метод линеаризации 95
6.1.2. Метод приведения 104
6.2. Суммирование систематических и случайных погрешностей 106
6.2.1. Суммирование систематических погрешностей 106
6.2.2. Суммирование случайных и систематических погрешностей 107
6.2.3. Критерий малых поправок 109
7. Сравнение эмпирических распределений. Методы проверки гипотез о принадлежности выборок одной генеральной совокупности 112
7.1. Параметрические методы проверки гипотез 112
7.1.1. Сравнение дисперсий 113
7.1.2. Сравнение средних 120
7.2. Непараметрические методы сравнения эмпирических распределений 129
7.2.1. Критерий Вилкоксона 130
7.2.2. Ранговый критерий Сиджела-Тьюки 134
7.2.3. χ^2 – критерий (критерий Пирсона) 135
7.2.4. Критерий знаков 136
7.3. Метод рерандомизации и бутстреп-метод 138
7.3.1. Метод рерандомизации 138
7.3.2. Бутстреп-метод 140
8. Обработка результатов неравноточных измерений. 142
9. Планирование и анализ экспериментов при заданных вероятностях ошибок первого и второго родов 148
9.1. Ошибки первого и второго родов 148
9.2. Планирование числа испытаний при заданных значениях α и β 150
9.3. Последовательный анализ 154

10. Дисперсионный анализ. Планирование экспериментов при дисперсионном анализе 158
10.1. Однофакторный дисперсионный анализ 158
10.2. Двухфакторный дисперсионный анализ 162
10.3. Многофакторный дисперсионный анализ 166
10.3.1. Латинские квадраты 166
10.3.2. Латинские кубы 169
11. Корреляция между случайными величинами 171
11.1. Корреляция между двумя величинами 171
11.1.1. Парный коэффициент корреляции 171
11.1.2. Корреляционное отношение 177
11.1.3. Частный коэффициент корреляции 178
11.1.4. Множественный коэффициент корреляции 180
11.2. Корреляция между нечисловыми случайными величинами 181
11.2.1. Ранговые коэффициенты парной корреляции 181
11.2.2. Коэффициент конкордации 187
11.2.3. Бисериальный коэффициент корреляции 189
11.3. Коэффициент автокорреляции. Корреляционная функция 192
12. Аппроксимация зависимости между случайными величинами (регрессионный анализ) 198
12.1. Метод наименьших квадратов 199
12.2. Линейное уравнение регрессии. 200
12.2.1. Адекватность уравнения регрессии 202
12.2.2. Доверительные границы линейного уравнения регрессии 203
12.2.3. Графический метод нахождения линейного уравнения регрессии. 203
12.3. Полиномиальные нелинейные уравнения регрессии (параболическая регрессия) 205
12.3.1. "Подводные камни" регрессионного анализа 207
12.3.2. Некоторые упрощения 208
12.4. Полиномы Чебышева 209
12.5. Трансцендентная регрессия 211
12.6. Множественная регрессия 212
12.7. Интерполяция 215
12.7.1. Интерполяционный полином Лагранжа 215
12.7.2. Интерполяционные сплайны 216

13. Планирование активных экспериментов для нахождения функции отклика 220
13.1. Этапы планирования активного эксперимента 220
13.2. Планы полного факторного эксперимента (ПФЭ) 222
13.3. Планы полного факторного эксперимента на двух уровнях 225
13.4. Дробный факторный эксперимент (ДФЭ) 229
13.5. Нелинейные планы факторного эксперимента 232
13.5.1. Квадратическая функция отклика 233
13.5.2. Нелинейная неквадратическая функция отклика 240
14. Планирование экспериментов для нахождения экстремума 244
14.1.Метод расстояний (классический) 244
14.2. Метод разности функций отклика 249
Литература 254
Приложение 256

Учебное издание

Программа дисциплины

"ОСНОВЫ ТЕОРИИ ЭКСПЕРИМЕНТА"

Составители: Виктор Иванович Бекряев.

Редактор: И. Г. Максимова.

ЛР№ 020309 от 30.19.96.

Подписано в печать 22.05.02 Формат 60 x 90 1/16.

Бумага офсетная. Печать офсетная. Печ. л. 18,5 Уч.-изд. л. Тираж 200. Зак. № 70.

195196, СПб, Малоохтинский пр. 98. РГГМУ.

Отпечатано в ООО «Спектр»