УДК 519.281: 528.11: 52.08

Джунь Й. В., **д.ф.-м.н., профессор** (Международный экономико-гуманитарный университет имени академика Степана Дем'янчука, г. Ривне)

НЕКЛАССИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ АНАЛИЗА СТАТИСТИЧЕСКИХ ДАННЫХ И ЕЕ ПРИЛОЖЕНИЯ

Аннотация. *В статье исследованы причины возникновения «Неклассической теории погрешностей измерений» (НТПИ) и изложены ее фундаментальные принципы. Обоснована адекватность этих принципов действительной практике современных многократных наблюдений, что позволяет осуществлять анализ данных на более высоком математическом уровне, обеспечивая эффективное оценивание исследуемых величин. Показано, что методы НТПИ не исключают классическую теорию ошибок, а включают ее в себя как необходимый элемент и являются результатом ее эволюционного развития и, в некотором степени, обобщением ее принципов.*
Ключевые слова: *неклассическая теория ошибок, распределение Пирсона-Джеффриса, весовые функции, информационная матрица.*

Анотація. *В статті досліджено причини виникнення «Некласичної теорії похибок вимірів» (НТПВ) та викладено її фундаментальні принципи. Обґрунтовано адекватність цих принципів дійсній практиці сучасних багатократних спостережень, що дозволяє здійснювати аналіз даних на більш високому математичному рівні, забезпечуючи ефективне оцінювання досліджуваних величин. Показано, що методи НТПВ не виключають класичну теорію похибок, а включають її в себе як необхідний елемент і є результатом її еволюційного розвитку і, в певній мірі, узагальненням її принципів.*
Ключові слова: *некласична теорія похибок, розподіл Пірсона-Джеффріса, вагова функція, інформаційна матриця.*

Annotation. *The reasons of formation of the «Non-Classical Theory of Measurement Errors» (NTME) are indicated and its fundamental principles are stated. The adequacy of these principles to actual practice of modern multiple observations, which allows to analyse the data at a higher mathematical level, ensuring effective evaluation of the studied quantities is substantiated. It is shown that the NETM methods do not ruled out the classical theory of errors, but and consider it as the essential element and they are the result of its evolutionary development and, to some extent, are generalisation of its principles.*
Keywords*: non-classical theory of errors, distribution of Pearson-Jeffreys, weight functions, informative matrix.*

В течение последних двухсот лет и до настоящего времени успешно применяются в математическом моделировании методы классической теории ошибок (КТО) и основанного на ней метода наименьших квадратов (МНК), созданного трудами великих математиков: А. М. Лежандра (1806 г.), К. Ф. Гаусса (1809 г.) и П. С. Лапласа (1812 г.). КТО опирается на следующие фундаментальные принципы, которые впервые сформулировал К. Ф. Гаусс в своей знаменитой работе [1]: 1) случайные погрешности наблюдений подчиняются нормальному закону распределения; 2) в результатах наблюдений полностью отсутствуют систематические ошибки.

Однако, анализ литературных источников показал, что уже в конце XIX века известный американский математик С. Ньюком впервые заявил о несоответствии распределения ошибок астрономических наблюдений закону Гаусса. Этот вывод, казалось бы, противоречил опыту почти векового успешного применения КТО и МНК, с помощью которых получено много блестящих результатов во многих отраслях науки. Это противоречие разрешил знаменитый кембриджский профессор сэр Г. Джеффрис, который утверждал, что нормальный закон обнаруживает свою полную теоретическую и практическую несостоятельность при условии, если число наблюдений $n > 500$. Ранее считали, что к закону Гаусса стремятся все распределения ошибок как к своей идеально предельной форме, если наблюдений много.

Упомянутое противоречие сэр Г. Джеффрис объясняет следующим образом: «при $n < 500$ трудно доказать отличие эмпирического распределение от закона Гаусса» [2], т. е. при таком числе наблюдений этот закон вполне адекватен, чем и объясняется победное шествие как КТО так и МНК на протяжении целых двухсот лет. Случаи успешного применения классических методов как раз и охватывают выборки объема $n < 500$, что и показал В. Ф. Бессель в работе [3]. Но в XX веке экспериментальная практика все чаще и чаще стала не подтверждать закон нормального распределения Гаусса. Исследователи столкнулись с не укладывающемся в голову результатом: *с увеличением числа наблюдений, даже при неизменной метрологической ситуации, ошибки измерений вовсе не стремились к закону Гаусса как к своей идеальной предельной форме, как ожидали математики, убежденные в значении центральной предельной теоремы, а подчинялись симметричным, негауссовым распределениям с существенно различными положительными эксцессами.* Возник так называемый парадокс Эльясберга-Хампеля как констатация этого явления: *любая непрерывная гипотеза о типе закона распределения будет неизбежно отвергнута с ростом числа наблюдений.*

Ситуация особенно обострилась во второй половине XX века, когда вследствие автоматизации экспериментов, и, прежде всего, в астрометрии и в космических исследованиях, резко возросло количество измерительной информации. Например, число локаций искусственного спутника Земли лазером, за время его движения от горизонта до горизонта составляет до 10^3. Современные абсолютные измерения галилеевого ускорения составляют 10^4 и больше измерений в сутки, астрономические каталоги получают на основании измерения координат 10^6-10^7 звезд. В ядерной физике регистрируется 10^6-10^8 событий в одном эксперименте. При таком количестве наблюдений стают неадекватными действительной практике наблюдений не то что основополагающие принципы КТО, но и такие известные классические законы, как закон больших чисел, постулаты теории Гаусса-Маркова и др. Возникла так называемая проблема больших выборок, решение которой выходило далеко за рамки возможностей КТО да и вообще классической математической статистики. Появилась острая необходимость в создании новой теории математической обработки данных, которая была бы адекватной реалиям новой, космической эры, эры неклассических методов. Эти методы появились не сразу – они формировались, подвергались тщательному анализу и проверке на протяжении последних 33 лет. Как их симбиоз возникла неклассическая теория ошибок (НТО), основанная на новой теории хаоса и на положениях, которые адекватные реалиям, возникающим при математической обработке больших объемов информации.

Цель настоящей статьи – изложить основополагающие принципы НТО, которая, как и всякая другая математическая теория, основана на определенных постулатах.

Например, фундаментом геометрии Евклида являются четыре постулата, геометрии Лобачевского – пять. Но главным условием практического применения любой математической теории является адекватность ее основополагающих принципов действительной практике наблюдений. Ни в коем случае нельзя экстраполировать неизменность этих принципов на сотни, тысячи, миллионы, а то и миллиарды лет вперёд или на условии бесконечного космоса, как это сейчас повсеместно делается, или на случай, когда количество измерительной информации становится огромным.

Великие математики, в отличие от современных профанаторов от физики, астрономии, экономики и других наук, не решались даже публиковать свои теории, пока не получали подтверждения ее постулатов практике наблюдений. Например, К. Ф. Гаусс, который открыл неевклидову геометрию задолго до Лобачевского, так и не решился ее опубликовать, так как, несмотря на проведение своих сверхточных измерений углов в ганноверской триангуляции, он не получил доказательств ее правильности. Он не хотел, да и моральные принципы ему не позволяли вооружить человечество неправильной теорией и пустить ученное человечество по неправильному пути. Так какие же фундаментальные принципы легли в основу НТО?

В качестве первого фундаментального положения НТО взято следующее достижение выдающегося кембриджского профессора сэра

Г. Джеффриса: случайные, независимые погрешности наблюдений при их числе n > *500 подчиняются следующему распределению [2]:*

$$f(x) = \frac{\Gamma(m+1)}{\sqrt{2\pi(m-0{,}5)}\cdot\Gamma(m+0{,}5)}\cdot\frac{1}{\sigma}\left[1+\frac{0{,}5m^2}{(m-0{,}5)^3}\left(\frac{x-\lambda}{\sigma}\right)^2\right]^{-m}, \qquad (1)$$

где λ, σ – являются соответственно параметрами положения и рассеяния, а m – характеризует степень уклонения распределения (1) от нормального закона; при $m=\infty$ распределение (1) идентично закону Гаусса.

Распределение (1) сэр Гарольд Джеффрис, получил используя классическую кривую Пирсона VII, которая имеет недиагональную информационную матрицу. Эту кривую сэр Гарольд преобразовал к виду (1), который имеет, как и закон Гаусса независимые параметры, т. е., (1) – единственное негауссово регулярное распределение которое имеет недиагональную информационную матрицу Фишера. Это уникальное свойство распределения (1) обеспечивает методам НТО наибольшую степень простоты ее использования. Однако, новую форму (1) сэр Гарольд продолжал называть распределением Пирсона VII типа, что привело к смешению понятий об этих двух похожих, но различных распределениях. Учитывая сказанное, чтобы избежать в дальнейшем путаницы, мы будем называть джеффрисову форму (1) – распределением Пирсона-Джеффриса или законом ошибок Пирсона-Джеффриса, или просто неклассическим законом ошибок. Последний имеет еще и другие замечательные свойства, главным из которых есть то, что он является обобщенной формулой распределений Гаусса и Стьюдента, которые наиболее часто применяются в анализе данных. Таким образом, первый фундаментальный принцип НТО построен на обобщении первого фундаментального принципа КТО.

Адекватность формы (1) действительной практике наблюдений основательно проверялась по инициативе академика Е. П. Федорова в АН Украины и в НИИТМ на протяжении 1967–1992 гг. с использованием огромного статистического материала, включающего более чем 130000 наблюдений [4]. Эта проверка показала, что при незначимых значениях асимметрии эмпирических распределений ошибок, средневзвешенные значения их эксцессов получились следующими для рядов наблюдений: *экономических* $\varepsilon = 2.895 \pm 0.142$; *космических* $\varepsilon = 1.719 \pm 0.052$; *астрономических* $\varepsilon = 1.077 \pm 0.015$; *гравиметрических* $\varepsilon = 0.810 \pm 0.105$; *геодезических* $\varepsilon = 0.767 \pm 0.034$.

Заметим также, что получив форму (1) сэр Гарольд не предпринимал попыток построить на этом основании новую и более универсальную теорию погрешностей измерений.

Известно, что в случае негауссового распределения $f(x_i)$ ошибок наблюдений x_i их вес описывает весовая функция:

$$p(x_i) = \frac{f'(x_i)}{x_i f(x_i)} = \frac{\ln' f(x_i)}{x_i}. \tag{2}$$

впервые полученная королевскими астрономами Х. Р. Хюльме и Л. С. Т. Симсом в Гринвиче [5]. Однако они не предложили аналитического выражения для вычисления весов $p(x_i)$ и получали их на основании сглаженной кривой распределения ошибок, полученной по гистограмме.

Подставляя форму (1) в (2) и выполнив дифференцирование, получаем следующее аналитическое выражение весовой функции обобщенного неклассического закона ошибок (1), адекватного реалиям больших выборок

$$p(x) = \left[\left(\frac{m-0.5}{m} \right)^3 \sigma^2 + \frac{x^2}{2m} \right]^{-1} \tag{3}$$

Легко видеть, что при $m = \infty$ (закон Гаусса) $p(x_i)$ превращается в константу:

$$p(x) = \sigma^{-2} \tag{4}$$

Таким образом, как видно из (4), все наблюдения имеют одинаковые веса, т. е. являются однородными только в том единственном случае, когда их ошибки подчиняются закону Гаусса. При любом другом их распределении, как это следует из формулы (3) это замечательное свойство не имеет места. Из формулы (4) также видно, что весовая функция $p(x_i)$ имеет размерность обратной дисперсии, т. е. $p(x_i)$ – это вес результата наблюдения, ошибка которого x имеет свою индивидуальную дисперсию σ_x^2. Следовательно, можно сформулировать второй фундаментальный принцип НТО, вытекающий из обобщенного закона ошибок (1):

индивидуальные веса наблюдений, которые подчиняются закону ошибок Пирсона-Джеффриса, характеризует их весовая функция, адаптированная к данному распределению. Адаптация действительных распределений ошибок к форме (1) осуществляется методом максимального правдоподобия.

Перейдем теперь к обоснованию третьего фундаментального принципа НТО. Проанализировав известный эксперимент К. Пирсона [6], сэр Г. Джеффрис показал, что для независимых случайных ошибок наблюдений при неизменной метрологической ситуации, форма (1) характеризуется показателем степени m в пределах:

$$3 \le m \le 5 \tag{5}$$

или, что тоже самое, эксцессом в таких границах:

$$6 \ge \varepsilon \ge 1.2, \tag{6}$$

т. е. форма (1) при условии (5) является формулой наиболее желанного для исследователя распределения ошибок, в которых уже не содержится больше никакой информации, т. е. это математическая форма современного идеального вероятностного хаоса. Оценивая значение второго фундаментального принципа НТО необходимо обратить внимание на следующее парадоксальное обстоятельство: при числе многократных наблюдений $n > 500$, выполненных даже при неизменной метрологической ситуации, веса наблюдений $p(x_i)$ являются разными по той причине, что идеальная форма обобщенного закона ошибок (1) существенно отличается от гауссовой.

В отличие от КТО, которая разработана на основе двух постулатов, в НТО введен третий фундаментальный принцип. Необходимость его введения обусловлена несостоятельностью второго постулата КТО, утверждающего, что из результатов наблюдений полностью исключены систематические ошибки. Однако практика показывает, что из результатов наблюдений невозможно их исключить полностью. Систематические ошибки, пусть малые, пусть незаметные, но они всегда присутствуют в результатах наблюдений и будут влиять на генеральную форму распределения ошибок, искажая ее, что особенно становится заметным при больших объемах наблюдений. Например, даже самые точные приборы, с помощью которых мы аттестуем наши измерительные средства, всегда имеют некоторую систематическую погрешность. Если идеальная форма вероятностного хаоса, т. е. математическая форма (1) для распределения совершенно независимых, случайных ошибок нам известна, то любое значимое отклонение от этой формы будет результатом искажений, вносимых в этот случайный вероятностный хаос систематическими ошибками.

Идеальная форма (1) для распределения совершенно случайных независимых ошибок имеет две особенности:

а) она симметрична, т. е. имеет нулевую асимметрию;

в) ее эксцессы находятся в границах (6).

Для того, чтобы показать важность соблюдения требований а) и в), получим весовую функцию (2) для обширного класса негауссовых распределений с различными асимметрией и эксцессом. С этой целью воспользуемся общим дифференциальным представлением семейств распределений Пирсона, которые охватывают практически все формы кривых плотности вероятности, изобретенные нашей цивилизацией:

$$\frac{f'(x)}{f(x)} = -\frac{x + c_1}{c_0 + c_1 x + c_2 x^2}, \tag{7}$$

где

$$c_0 = \frac{\sigma^2 (4\beta_2 - 3\beta_1)}{b}\ ; c_1 = \frac{\sigma\sqrt{\beta_1(\beta_2 + 3)}}{b}\ ;\ c_2 = \frac{2\beta_2 - 3\beta_1 - 6}{b}\ ; \tag{8}$$

$$\beta_1 = \mathrm{A}^2 = \mu_3^2 \mu_2^{-3}\ ; \beta_2 = \mu_4 \mu_2^{-2}\ ;\quad b = 2(5\beta_2 - 6\beta_1 - 9) \tag{9}$$

$\mu_r = \int\limits_{l_1}^{l_2} x^r f(x)dx;\ r = 2,3,4;$ $\mu_0 = 1;\ \mu_1 = 0;$ $\mu_2 = \sigma^2;$ l_1 и l_2 – A – асимметрия распределения; l и l – нижняя и верхняя границы естественной области определения функции плотности вероятности $f(x)$.

Подставляя (7) в (2) получаем аналитическое выражение для вычисления весовой функции в виде ее зависимости от коэффициентов (8), которые, в свою очередь, определяются значениями асимметрии и эксцесса:

$$p(x) = \frac{x + c_1}{x\left(c_0 + c_1 x + c_2 x^2\right)} = \frac{1}{c_0 + c_1 x + c_2 x^2} + \frac{c_1}{x\left(c_0 + c_1 x + c_2 x^2\right)} \tag{10}$$

Формула (10) задает бесконечное множество весовых функций, однако не все они способны обеспечить состоятельное оценивание. Формула (10) показывает, что есть такие распределения выборочных результатов, оценивание по которым невозможно. Например, если в (10) $x = 0$, то $p(x) = \infty$, т. е. для асимметричных распределений, у которых $c_1 = 0$, весовая функция является сингулярной – singular weight Funktion (SWF). Назовем эту зону оценок областью C_1. Вычисление выборочного среднего при такой весовой функции является метрологическим абсурдом. Заметим также, что еще в начале XX века выдающийся экспериментатор и великий химик Д. И. Менделеев впервые высказал мысль о том, что нулевая асимметрия погрешностей является объективным признаком качественно проведенного эксперимента. Как видим, это его интуитивное предположение получило строгое математическое подтверждение в НТО.

При соблюдении условия а), т. е. для симметричных распределений весовая функция (10) приобретает более простой вид [7]:

$$p(x) = \frac{1}{c_0 + c_2 x^2} = \frac{5\varepsilon + 6}{2\sigma^2 \beta_2 + \varepsilon x^2}, \tag{11}$$

где эксцесс $\varepsilon = \beta_2 - 3$; β_2 – вычисляют по формуле (9). Как видно из (11), для симметричных распределений весовая функция регулярна во всем диапазоне значений:

$$0 \le \varepsilon < \infty \tag{12}$$

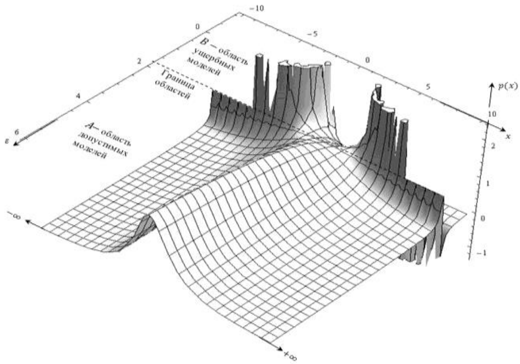

Рис. 1. Фрагмент поверхности весовой функции для симметричных распределений погрешностей наблюдений

На рис. 1 показан фрагмент поверхности весовой функции (11) для симметричных распределений ошибок. Из рис. 1 видно, что прямая классического оценивания $p(x) = \sigma^{-2}$, соответствующая закону нормального распределения, делит поверхность весовой функции на две принципиально различные области: *A* – область распределений с $\varepsilon \ge 0$ и *B* – область плосковершинных распределений, у которых $\varepsilon < 0$. Теперь внимательно рассмотрим область *B*. При $\varepsilon < 0$, веса *p(x)* в (11) возрастают с увеличением погрешности *x*. Если допускать возможность оценивания с весовой функцией, у которой вес наблюдения возрастает с увеличением его ошибки, то в этом случае мы должны знать, что в точке $x_к = \pm\sigma\sqrt{\frac{2\beta_2}{|\varepsilon|}}$

весовая функция имеет точку перегиба и при ошибке $x_к > x$, веса становятся отрицательными. Следовательно, если эмпирическое распределение имеет отрицательный эксцесс и ошибки $x > x_к$, то это означает, что наш эксперимент отягощен солидными систематическими ошибками, т. е. он неудачен, поскольку весовая функция попадает в зону SWF, в которой какое-либо оценивание некорректно. В целом весовая функция имеет две зоны, в которых невозможно произвести эффективное оценивание – это ее сингулярные области *C* и *B*.

Учитывая сказанное, можно сделать следующий важный вывод: *единственной областью оценивания, в которой весовая функция симметрична и имеет невырожденный характер, т. е. является не сингулярной, является область A (рис. 1), соответствующая джеффрисовым ошибкам, подчиняющимися закону (1).* Весовая функция является не сингулярной только при условиях $A = 0$; $\varepsilon \geq 0$. Любое нарушение этих условий является свидетельством недопустимого влияния систематических ошибок, воздействием которых можно пренебречь только в том случае, когда доверительный интервал для оценки асимметрии *A* накрывает ноль, а доверительный интервал для коэффициента эксцесса тоже накрывает ноль или целиком находится в положительной области. Следовательно, для того, чтобы преодолеть несостоятельность второго постулата КТО, не учитывающего действия не исключенных систематических ошибок в результатах наблюдений, в НТО введен третий фундаментальный принцип:

влиянием слабых не исключенных систематических ошибок в результатах статистических наблюдений можно пренебречь только в том случае, когда весовая функция, найденная для эмпирического закона ошибок, является не сингулярной.

Если весовая функция распределения ошибок сингулярна, то такие наблюдения, вообще говоря, обрабатывать нельзя.

Открытие весовой функции знаменует собой новую эру в теории ошибок. До этого предлагались лишь эвристические варианты весовой функции, по которым нельзя было каким-то образом диагностировать влияние систематических ошибок. В отличие от этого в НТО разработана аналитическая теория весовой функции, которая максимально правдоподобно адаптирована к действительному распределению выборки. Все это вместе взятое дает в руки исследователя совершенно новый инструмент, позволяющий ему контролировать эксперимент и улучшать наблюдения. В целом важность третьего принципа НТО состоит в том, что он позволяет эффективно осуществлять процедуры диагностики математического моделирования различных процессов на основании статистического анализа остаточных погрешностей «Observation – Calculation» (O-C). Возможные случаи такой диагностики подробно рассмотрены в [7, с. 81].

В заключение отметим, что НТО не является теорией, отвергающей КТО. Она построена на адекватном обобщении главного постулата КТО. Всегда при применении методов НТО на первом этапе осуществляется моделирование классическими методами. НТО при моделировании применяется лишь после того, когда критериальный анализ разностей O–C на значимость асимметрии и отрицательного эксцесса, подтверждает необходимость во втором приближении применить неклассические процедуры. Поэтому НТО можно рассматривать как обобщение методов КТО и ее необходимую эволюцию. Главный вывод состоит в том, что не существует какого-либо всеобщего закона ошибок, со значением $m = \infty$ (закон Гаусса), как это полагали ранее. Наоборот, каждый измерительный инструмент, метод и даже место наблюдений имеет свой закон распределения ошибок с присущим только ему значением m, которое очень далеко от $m = \infty$ и которое является ключевой метрологической характеристикой погрешностей наблюдений. Значение m дает возможность очень просто оценить качество эксперимента, а затем и веса наблюдений с целью получения эффективных оценок параметров исследуемых процессов. Кроме того, методы НТО позволяют осуществлять эффективную диагностику математического моделирования на основании анализа остаточных погрешностей, что не предусматривалось ранее в процедурах КТО. Отмеченные возможности НТО открывают широкие перспективы для ее использования во многих отраслях науки и техники, в которых приходится обрабатывать большие объемы информации.

1. Гаусс К. Ф. Избранные геодезические сочинения. Том 1. Способ наименьших квадратов / К. Ф. Гаусс. – Под ред. Г. В. Багратуни. – М. : Геодезиздат, 1975. – 252 с. **2.** Jeffreys H. Theory of Probability / Sec. Edition. – Oxford, 1940. – 468 p. **3.** Bessel F. W. Untersuchungen uber die Wahrscheinlichkeit der Beobachtungsfehler / F. W. Bessel // Astronomische Nachrichten. – B. 5. – 1838. – 369 p. **4.** Джунь И. В. Математическая обработка астрономической и космической информации при негауссовых ошибках наблюдений: автореферат дис. на соиск. уч. степени докт. физ.-мат. наук : спец. 01.03.01 «Астрометрия и небесная механика» / И. В. Джунь. – Киев, ГАО НАН Украины, 1992. – 46 с. **5.** Hulme H. R. The Law of Errors and the Combinations of Observations / H. R. Hulme, L. S. T. Syms // Mon. Notic. of RAS. – 1939. – V. 99. – № 8. – P. 642–658. **6.** Pearson K. On the mathematical Theory of Errors of Judgment with special Reference to the personal Equation / K. Pearson // Philosophical Transactions of the RAS of London. – Ser. A. – 1902. – Vol. 198. – P. 253–296. **7.** Джунь И. В. Неклассическая теория погрешностей измерений / И. В. Джунь. Изд. дом ЕСТЕРО, Ровно, 2015 – 168 с.

Рецензент: д.т.н., професор Власюк А. П.