

С.В. ДРОНОВ

**МАТЕМАТИЧЕСКИЕ  
МЕТОДЫ**

**в психологии**

Барнаул 2006

# Оглавление

|       |  |    |
|-------|--|----|
| 1.1   | Введение . . . . .   | 2  |
| 1.2   | Что нужно знать, чтобы успешно понимать все, написанное<br>ниже? . . . . .   | 2  |
| 1.2.1 | Теория матриц . . . . .  | 2  |
| 1.2.2 | Геометрическая интерпретация . . . . .   | 4  |
| 1.2.3 | Теория вероятностей . . . . .  | 5  |
| 1.3   | Данные наблюдений и их виды. Понятие выборки . . . . .   | 6  |
| 1.4   | Первичная обработка и группировка данных. Грубые ошибки<br>наблюдений . . . . .  | 9  |
| 1.5   | Доверительные интервалы. Таблицы некоторых распределений   | 14 |
| 1.5.1 | Построение доверительного интервала для математи-<br>ческого ожидания, если дисперсия $\sigma^2$ заранее известна.<br>Таблица стандартного нормального распределения . . . | 14 |
| 1.5.2 | Построение доверительного интервала для математи-<br>ческого ожидания, если дисперсия неизвестна. Распре-<br>деление Стьюдента . . . . .                                   | 15 |
| 1.5.3 | Построение доверительного интервала для дисперсии.<br>Таблицы распределения хи-квадрат . . . . .   | 16 |
| 1.6   | Проверка статистических гипотез - общие принципы . . . .   | 16 |
| 1.6.1 | Проверка равенства средних значений двух выборок .   | 18 |
| 1.6.2 | Проверка значимости коэффициента корреляции . .  | 18 |
| 1.6.3 | Проверка равенства дисперсий . . . . .   | 19 |
| 1.7   | Проверка гипотезы о виде распределения. Критерий $\chi^2$ . .  | 20 |
| 2.1   | Экспертные оценки . . . . .  | 23 |
| 2.2   | Регрессионный анализ . . . . .   | 25 |
| 2.3   | Дисперсионный анализ . . . . .   | 27 |
| 2.4   | Проблема отбора наиболее информативных показателей .   | 30 |
| 2.5   | Метод главных компонент . . . . .  | 31 |
| 2.6   | Построение правил классификации (клUSTERНЫЙ и дискрими-<br>нантный анализ) . . . . .   | 33 |
| 2.7   | Факторный анализ . . . . .   | 34 |
| 2.8   | Многомерное шкалирование . . . . .   | 38 |

## 1.1 Введение

В настоящее время математика стала языком, на котором говорят между собой представители различных научных дисциплин, а также удобным инструментом описания тех или иных явлений в различных отраслях человеческой деятельности. Несомненным достоинством этого языка является то, что он не терпит недомолвок и двусмысленностей. Поэтому, чтобы изъясняться на нем, исследователю приходится еще раз переосмыслить свои результаты, придать им стройность и завершенную форму.

Область применения математики постепенно расширяется. Все большее количество дисциплин превращается в поставщиков новых интересных задач для математики. Психология присоединилась к числу этих дисциплин в первых рядах – в начале XX века. Она не только использовала результаты наиболее бурно развивающейся отрасли математики – математической статистики, – но и сама способствовала возникновению ее новых разделов, в первую очередь таких, как факторный и дискриминантный анализ.

В настоящем курсе рассмотрены только самые первые ступени длинной и крутой лестницы, которую нужно преодолеть на пути к уверенному применению математических методов. За подробными сведениями, конкретными алгоритмами и другими методами исследования результатов эксперимента отсылаю читателя к литературе, список которой приведен в конце.

## 1.2 Что нужно знать, чтобы успешно понимать все, написанное ниже?

В этом разделе приведен список сведений из курса высшей математики, которые необходимо освежить в памяти для дальнейшего чтения. Основные определения и факты здесь также приводятся.

### 1.2.1 Теория матриц

Матрица  $n \times m$  – прямоугольная таблица с  $n$  строками и  $m$  столбцами, обозначаемая прописной буквой. Мы будем писать  $[A]_{n,m}$  если хотим подчеркнуть, что матрица имеет именно такой размер. Если  $n = m$ , то матрица называется квадратной, а число  $n$  ее порядком. Элементы матрицы  $A$  обозначаем строчными буквами с индексами, указывающими положение этого элемента в таблице. Через  $A^t$  условимся обозначать транспонированную матрицу, т.е.  $[A^t]_{m,n}$ , и для любых индексов  $i, j$  справедливо  $a_{i,j}^t = a_{j,i}$ . Матрица  $A$  называется симметричной, если  $A = A^t$ . В частности, для симметричной матрицы  $n = m$ . Элементы квадратной матрицы  $a_{i,i}$  называются элементами главной диагонали.

Если  $n = 1$ , то матрицу  $[A]_{1,n}$  называют вектором - строкой, если же  $m = 1$ , то  $[A]_{m,1}$  – вектором-столбцом. Числа  $m, n$  в этом случае называют размерностями векторов. Векторы условимся обозначать строчными буквами.

ми со стрелкой вверху, понимая под  $\vec{a}$  вектор-столбец. Тогда вектор-строка запишется как  $\vec{a}^t$ .

Для квадратных матриц  $A$  порядка  $n$  введем понятие определителя  $|A|$ . В частности, для  $n = 2$ ,

$$\begin{vmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} \\ a_{1,1} & a_{2,2} \end{vmatrix} = a_{1,1}a_{2,2} - a_{1,2}a_{2,1}$$

а для определителя  $\Delta_{n+1}$  порядка  $n + 1$  справедливо

$$\Delta_{n+1} = \sum_{j=1}^{n+1} (-1)^{j+1} a_{1,j} \Delta_n^{1,j},$$

где  $\Delta_n^{1,j}$  - определитель порядка  $n$ , полученный из  $\Delta_{n+1}$  вычеркиванием первой строки и  $j$ -го столбца (разложение по первой строке).

Для умножения матрицы (в частности, вектора) на число необходимо каждый элемент матрицы умножить на это число. Определяются также сумма (поэлементная) матриц и их произведение по следующему правилу. Пусть  $[A]_{n,m}$ ,  $[B]_{m,l}$ ,  $C = AB$ . Тогда  $[C]_{n,l}$ , причем

$$c_{i,j} = \sum_{k=1}^m a_{i,k} b_{k,j}, \quad i = 1, \dots, n, \quad j = 1, \dots, l.$$

Например, если  $\vec{a}$  вектор размерности  $n$ , то  $A\vec{a}$  – вектор размерности  $m$ . Можно проверить, что если  $A, B$  – квадратные матрицы, то

$$|AB| = |A| |B|, \quad |A^t| = |A|.$$

Матрица  $[I]_{n,n}$  называется единичной порядка  $n$ , если по ее главной диагонали стоят единицы, а остальные элементы равны нулю. Очевидно, что для любой квадратной матрицы  $[A]_{n,n}$  справедливо  $AI = IA = A$ . Матрица  $A^{-1}$  называется обратной для матрицы  $A$ , если

$$AA^{-1} = A^{-1}A = I.$$

Пусть  $A$  - квадратная матрица. Если для вектора  $\vec{a}$  найдется такое число  $\lambda$ , что  $A\vec{a} = \lambda\vec{a}$ , то вектор  $\vec{a}$  называется собственным вектором матрицы, отвечающим собственному числу  $\lambda$ . Оказывается, собственные числа матрицы можно найти, решив уравнение

$$|A - \lambda I| = 0.$$

Собственный вектор, отвечающий данному собственному числу, определен неоднозначно с точностью до умножение на любое число  $\alpha$ , так как

$$A(\alpha\vec{a}) = \alpha(A\vec{a}) = \lambda(\alpha\vec{a}),$$

т.е.  $\alpha\vec{a}$  также является таким собственным вектором. Поэтому можно поставить задачу найти собственный вектор, отвечающий заданному собственному числу, и имеющий единичную длину. Для решения этой задачи достаточно найти любой собственный вектор  $\vec{a}$  и поделить его на

$$\|\vec{a}\| = \sqrt{\sum_{j=1}^n a_j^2} -$$

длину вектора  $\vec{a}$ .

Известно, что у симметричной матрицы порядка  $n$  обязательно  $n$  собственных чисел.

### 1.2.2 Геометрическая интерпретация

Пары и тройки чисел (двумерные и трехмерные векторы) можно представлять себе точками плоскости или, соответственно, трехмерного пространства. Векторы большей размерности обычно отождествляют с точками пространства с числом измерений, равным размерности вектора. Поскольку геометрическая интуиция, связанная с числом измерений, большим 3, отсутствует, то чаще всего этот способ - единственная возможность работать с такими пространствами.

Умножая вектор на матрицу, мы вновь получаем вектор, а значит квадратная  $n \times n$  матрица может рассматриваться как преобразование  $n$ -мерного пространства, а матрица  $n \times m$  – как преобразование  $m$ -мерного пространства в  $n$ -мерное.

Известно, что в случае, когда матрица  $A$  ортогональна, т.е.  $A^{-1} = A^t$  и  $n$  равно 2 или 3, то умножение на  $A$  соответствует повороту. Поэтому и в многомерном случае умножение на ортогональную матрицу можно интерпретировать как поворот. Вообще, умножение на любую матрицу можно рассматривать как поворот и растяжение (неодинаковое по разным направлениям). Из определения собственного вектора следует, что в направлении собственного вектора (и только в таких направлениях) действие матрицы является чистым растяжением.

В многомерном случае угол между векторами  $\vec{a}, \vec{b}$  определяется как

$$\varphi = \arccos \frac{\langle \vec{a}, \vec{b} \rangle}{\|\vec{a}\| \|\vec{b}\|},$$

где  $\langle \vec{a}, \vec{b} \rangle = \sum_k a_k b_k$  – скалярное произведение векторов. В частности,  $\vec{a}, \vec{b}$  перпендикулярны, если  $\langle \vec{a}, \vec{b} \rangle = 0$ . Выпишем также формулу

$$\langle \vec{a}, \vec{b} \rangle = \vec{a}^t \vec{b},$$

выполненную по определению произведения матриц и в силу соглашения рассматривать только векторы-столбцы.

Заметим, наконец, что  $C = \vec{a} \vec{b}^t$  –  $n \times n$  – матрица с элементами  $c_{i,j} = a_i b_j$ ,  $i, j = 1, \dots, n$ .

### 1.2.3 Теория вероятностей

В теории вероятностей рассматриваются случайные события и случайные величины. Дискретная случайная величина  $X$  может характеризоваться своим рядом распределения:

|     |       |         |       |
|-----|-------|---------|-------|
| $X$ | $x_1$ | $\dots$ | $x_n$ |
|     | $p_1$ | $\dots$ | $p_n$ |

Здесь  $x_1, \dots, x_n$  – значения случайной величины,  $p_1, \dots, p_n$  – вероятности этих значений. Можно задавать ее также функцией распределения

$$F(x) = P(X < t) = \sum_{j:x_j < t} p_j.$$

Математическим ожиданием такой случайной величины (или ее средним значением) называется число

$$\mathbf{M}X = \sum_{k=1}^n x_k p_k.$$

Дисперсия случайной величины – это числовая характеристика разброса ее значений вокруг среднего. По определению,

$$\mathbf{D}X = \mathbf{M}(X - \mathbf{M}X)^2.$$

Известно, что всегда

$$\mathbf{M}(X + Y) = \mathbf{M}X + \mathbf{M}Y, \quad \mathbf{M}(\alpha X) = \alpha \mathbf{M}X, \quad \mathbf{D}(\alpha X) = \alpha^2 \mathbf{D}X,$$

и если  $X, Y$  независимы, то

$$\mathbf{M}XY = \mathbf{M}X \mathbf{M}Y, \quad \mathbf{D}(X + Y) = \mathbf{D}X + \mathbf{D}Y.$$

Число  $\sigma = \sqrt{\mathbf{D}X}$  называют средним квадратическим отклонением  $X$ . Известно, что в интервале  $(\mathbf{M}X - 3\sigma, \mathbf{M}X + 3\sigma)$  лежит не менее  $8/9$  всех значений  $X$  (неравенство трех сигм).

Величина

$$\rho(X, Y) = \frac{\mathbf{cov}(X, Y)}{\sqrt{\mathbf{D}X \mathbf{D}Y}},$$

где  $\mathbf{cov}(X, Y) = \mathbf{M}XY - \mathbf{M}X \mathbf{M}Y = \mathbf{M}(X - \mathbf{M}X)(Y - \mathbf{M}Y)$  – ковариация между  $X$  и  $Y$ , называется коэффициентом корреляции между этими величинами. Значения  $\rho$  лежат между -1 и 1. Крайние его значения соответствуют линейной зависимости между  $X$  и  $Y$ . Если  $\rho(X, Y) = 0$ , то величины называют некоррелированными. В частности, независимые случайные величины являются некоррелированными. Для  $\rho$  выделяют обычно три зоны:  $|\rho(X, Y)| < 1/3$  соответствует слабой связи (зависимости) между  $X$  и  $Y$ ,  $1/3 \leq |\rho(X, Y)| < 2/3$  умеренной связи и  $|\rho(X, Y)| \geq 2/3$  сильной связи. Если  $\rho > 0$  говорят о положительной, иначе об отрицательной связи.

Если значения случайной величины целиком заполняют какой-либо отрезок, то она называется абсолютно непрерывной, и ее характеризуют плотностью распределения. Наиболее часто в приложениях встречается так называемое нормальное распределение с параметрами  $a$  и  $\sigma^2$ , причем первый параметр представляет из себя математическое ожидание, а второй дисперсию соответствующей случайной величины. Его плотность имеет вид

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}\right\}.$$

При  $a = 0$ ,  $\sigma = 1$  такое распределение называют стандартным нормальным. Выпишем плотность этого распределения.

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-x^2/2).$$

Функция

$$\Phi(t) = \int_{-\infty}^t \varphi(x) dx$$

называется функцией стандартного нормального распределения. Известно, что если  $X$  имеет нормальное распределение с параметрами  $a$ ,  $\sigma^2$ , то  $Y = (X - a)/\sigma$  имеет стандартное нормальное распределение, т.е., например,

$$P(X < t) = P\left(\frac{X - a}{\sigma} < \frac{t - a}{\sigma}\right) = \Phi\left(\frac{t - a}{\sigma}\right).$$

Нам будет нужен также многомерный случай. Случайным  $n$ -мерным вектором называется вектор  $\vec{x}$ , все координаты которого  $x_1, \dots, x_n$  – случайные величины. Через  $\mathbf{M}\vec{x}$  обозначим вектор, каждая из координат которого равна математическому ожиданию соответствующей координаты  $\vec{x}$ . Аналогом понятия дисперсии служит ковариационная матрица  $C$ , причем

$$c_{i,j} = \text{cov}(x_i, x_j), \quad i, j = 1, \dots, n.$$

В частности,  $c_{j,j} = \mathbf{D}x_j$ . С учетом матричных соотношений, рассмотренных в конце первого подпункта,

$$C = \mathbf{M}(\vec{x} - \mathbf{M}\vec{x})(\vec{x} - \mathbf{M}\vec{x})^t.$$

### 1.3 Данные наблюдений и их виды. Понятие выборки

Все наши выводы так или иначе основываются на наблюдениях. Результаты наблюдений для выявления статистических закономерностей, как правило, формируются в повторных экспериментах. Простейший и наиболее распространенный вариант – измерение некоторых числовых характеристик. В

этом случае говорят, что мы имеем в нашем распоряжении выборку объема  $n$ , т.е. набор  $n$  независимых наблюдений над какой-то случайной величиной. Одно наблюдение называют элементом выборки или выборочным значением. Например, в качестве наблюданной случайной величины могут выступать результаты какого-либо тестирования (в баллах) или процент верно опознанных изображений (фонем). Близко к этому расположены данные оценки близости в шкалах "максимально похожи – максимально различны", для которых также нетрудно установить числовые значения.

В практике социальных дисциплин встречаются и нечисловые данные. Отметим, что полностью нерегулярные данные представить себе довольно трудно, и на практике они не встречаются. Всегда имеются некоторые группы (категории) в которые можно отнести наблюдаемые характеристики. Такими группами (категориями) могут служить, например, темпераменты испытуемых (4 категорий), данные о географическом происхождении наблюдений, об их времени и т.п. (см. пример с посетителями кафе ниже). В этом случае мы говорим о категоризованных данных.

Интересным примером является также изучение результатов ранжирования (расположения в порядке убывания значимости) ряда факторов независимыми экспертами. Рассмотрим пример. Пяти студентам, пользующимся общественным транспортом, предложили пронумеровать в порядке убывания значимости следующие факторы: Ч – частота следования транспорта, З – степень его заполненности пассажирами, О – оборудование салона (комфортность сидений, кондиционер и т.п.), Д – исправность дверей и окон, К – настроение и доброжелательность кондуктора, С – освещение салона, Ц – стоимость проезда. Самому важному с точки зрения опрашиваемого фактору он присваивает номер 1, следующему по важности – 2 и т.д. Если студент не может или не хочет упорядочивать несколько факторов (они для него равнозначны), то он присваивает им равные номера (ранги). При этом сумма всех присвоенных рангов должна быть равна  $1+2+\dots+7 = 28$ . Например, если студент уверен, что самые важные факторы - Ц и Ч, но он не может их различить, то каждому из них присваивается ранг  $(1+2)/2 = 1,5$ . Данные соответствующего опроса приведены в таблице. Такая таблица называется матрицей экспертных оценок.

Встречаются также и данные, имеющие смешанный характер. Для примера рассмотрим следующие результаты наблюдений за 12 посетителями кафе. Ниже  $x_1$  – сумма, истраченная посетителем,  $x_2$  – время в минутах, проведенное в кафе,  $x_3, x_4, x_5$  – закуска, основное блюдо и напиток, выбранные посетителем. Здесь  $x_1, x_2$  – числовые переменные,  $x_3, x_4, x_5$  – нечисловые категоризованные,  $x_3$  имеет 3 градации,  $x_4, x_5$  по 4 градации.

Основные методы обработки данных разработаны для случая числовых данных (выборок). Поэтому важное значение приобретают методы придания нечисловым данным числовых значений (оцифровка). Такие методы мы обсудим ниже. Тем не менее, в силу общего происхождения (из наблюдений), условимся все наши данные далее называть выборочными данными.

Данные ранжирования  
пятью экспертами семи факторов по убыванию значимости

| эксперты<br>факторы | 1 | 2 | 3   | 4 | 5 |
|---------------------|---|---|-----|---|---|
| Ч                   | 1 | 2 | 2   | 1 | 3 |
| З                   | 3 | 1 | 2   | 5 | 2 |
| О                   | 5 | 3 | 6,5 | 5 | 5 |
| Д                   | 7 | 4 | 6,5 | 5 | 4 |
| К                   | 6 | 7 | 5   | 5 | 7 |
| С                   | 4 | 6 | 2   | 5 | 6 |
| Ц                   | 2 | 5 | 4   | 2 | 1 |

Двенадцать посетителей кафе

| Посетитель | $x_1$ | $x_2$ | $x_3$ | $x_4$ | $x_5$ |
|------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| 1          | 100   | 63    | 1     | 4     | 1     |
| 2          | 85    | 63    | 1     | 2     | 1     |
| 3          | 65    | 45    | 1     | 2     | 2     |
| 4          | 65    | 45    | 2     | 2     | 2     |
| 5          | 110   | 95    | 2     | 3     | 3     |
| 6          | 120   | 95    | 2     | 3     | 3     |
| 7          | 125   | 135   | 2     | 3     | 4     |
| 8          | 170   | 95    | 2     | 1     | 3     |
| 9          | 180   | 135   | 2     | 1     | 4     |
| 10         | 95    | 63    | 3     | 4     | 1     |
| 11         | 105   | 95    | 3     | 3     | 3     |
| 12         | 175   | 135   | 3     | 4     | 4     |

## 1.4 Первичная обработка и группировка данных. Грубые ошибки наблюдений

Если выборка  $X$  имеет небольшой объем  $n$ , то мы можем непосредственно приступить к расчету выборочных характеристик наблюдаемой величины. Число

$$\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$$

называется выборочным средним или выборочным математическим ожиданием, а

$$S^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{X})^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left( \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \right)^2 -$$

выборочной дисперсией. Эти характеристики не следует путать с математическим ожиданием и дисперсией наблюдаемой случайной величины  $x$ .  $\bar{X}$  и  $S^2$  - это оценки  $Mx$ ,  $Dx$  по результатам наблюдений и равны последним (теоретическим) характеристикам лишь приближенно. В частности, значение  $S^2$  в основном оказывается меньше теоретической дисперсии (имеется систематическая ошибка). Чтобы улучшить оценку, при малых  $n$  имеет смысл применять т.н. исправленную (правильное название – несмещенную) оценку дисперсии:

$$S_0^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{X})^2.$$

В прикладных исследованиях применяются также такие характеристики, как асимметрия и эксцесс:

$$\text{As}X = \frac{1}{nS^3} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{X})^3, \quad \text{Ex}X = \frac{1}{nS^4} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{X})^4 - 3.$$

Здесь  $S$  – корень квадратный из выборочной дисперсии  $S^2$ . Эти величины характеризуют соответственно смещение пика плотности влево (асимметрия положительна) или вправо (асимметрия отрицательна) относительно середины интервала, и остроту (эксцесс положителен) или пологость (эксцесс отрицателен) этой плотности. Случай нулевого эксцесса соответствует нормальной кривой.

Величины

$$X_{(1)} = \min\{x_1, \dots, x_n\}, \quad X_{(n)} = \max\{x_1, \dots, x_n\}$$

характеризуют размах выборки

$$T = X_{(n)} - X_{(1)}.$$

Довольно часто бывает так, что выборка содержит повторяющиеся значения или имеется много близких по величине элементов. В этом случае всю

имеющуюся в выборке информацию удобно хранить в сгруппированном виде:

|   |       |       |         |       |
|---|-------|-------|---------|-------|
| Значение                                | $x_1$ | $x_2$ | $\dots$ | $x_k$ |
| Количество таких значений (повторности) | $n_1$ | $n_2$ | $\dots$ | $n_k$ |

Очевидно, здесь  $\sum_{j=1}^k n_j = n$ . Теперь выписанные выше формулы примут вид

$$\begin{aligned}\bar{X} &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^k n_i x_i, & S^2 &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^k n_i (x_i - \bar{X})^2, \\ \text{As}X &= \frac{1}{nS^3} \sum_{i=1}^k n_i (x_i - \bar{X})^3, & \text{Ex}X &= \frac{1}{nS^4} \sum_{i=1}^k n_i (x_i - \bar{X})^4 - 3\end{aligned}$$

и для  $k \ll n$  вычисления существенно упрощаются. Поэтому возникает желание "образовать" повторяющиеся элементы даже если совпадающих элементов в выборке нет. Этот процесс носит название группировки данных.

Далее даются некоторые рекомендации по группировке несгруппированных числовых данных. Группировку можно производить и иначе, но те требования, которые обязательно должны быть выполнены при проведении любой группировки будут отдельно оговорены.

- Определим размах выборки и первоначальное число групп - интервалов. Если это число заранее никак не было определено, рекомендуется пользоваться формулой Стерджеса

$$r = [\log_2 n] + 1,$$

где  $[.]$  – целая часть, т.е. наибольшее целое, не превосходящее данное. При этом, очевидно, можно использовать вместо формулы Стерджеса следующую таблицу:

|     |      |       |       |        |         |         |          |
|-----|------|-------|-------|--------|---------|---------|----------|
| $n$ | 8-15 | 16-31 | 32-63 | 64-127 | 128-255 | 256-511 | 512-1023 |
| $r$ | 4    | 5     | 6     | 7      | 8       | 9       | 10       |

Еще раз отметим, что этот выбор  $r$  достаточно произволен, и впоследствии число групп может меняться.

- Определим нижнюю границу группировки. Это может быть либо  $-\infty$  либо 0, либо  $X_{(1)} - \varepsilon$ , где  $\varepsilon$  – достаточно малое число. Наличие здесь его обуславливается одним из двух основных принципов группировки, обязательным для соблюдения при любом способе:

Границы групп не должны совпадать с выборочными значениями

После выбора нижней границы  $z_0$  строим остальные по формулам

$$\begin{aligned} z_1 &= X_{(1)} + T/r, \\ z_{j+1} &= z_j + T/r, \quad 1 \leq j \leq r-2, \\ z_r &= X_{(n)} + \varepsilon. \end{aligned}$$

Вместо последней формулы можно использовать  $z_r = +\infty$ . Если некоторые из построенных границ попали на выборочные значения – двигаем границы (на  $\varepsilon$ ) влево или вправо до тех пор, пока это не будет устранено. Итак, построены группы  $\Delta_j = [z_{j-1}, z_j]$ ,  $j = 1, \dots, r$ .

- Вычислим  $n_j$  - количества элементов выборки, попавших в  $\Delta_j$ ,  $j = 1, \dots, r$ . Тут появляется второй основной принцип группировки:

|                                       |
|---------------------------------------|
| Для всех групп $3 \leq n_j \leq 19$ . |
|---------------------------------------|

Если хотя бы в одной из групп это условие нарушено – необходимо передвинуть границы интервалов или объединить "слишком пустые", или разбить "слишком наполненные" на более мелкие интервалы (совсем не обязательно одинаковой длины). При этом  $r$  может изменяться.

Выделенные условия являются основными, и можно проводить группировку "на глазок", ориентируясь лишь на них. После того, как мы добились их выполнения, группировка закончена, и мы заменяем нашу выборку таблицей

| $X$ | $\tilde{x}_1$ | $\tilde{x}_2$ | ... | $\tilde{x}_r$ |
|-----|---------------|---------------|-----|---------------|
|     | $n_1$         | $n_2$         | ... | $n_r$         |

Здесь  $\tilde{x}_j$  - середина интервала  $\Delta_j$ ,  $j = 1, \dots, r$ .

По сгруппированной выборке можно определить моду, медиану, построить гистограмму и полигон распределения наблюдаемой величины. Мода – это наиболее часто встречающееся значение, т.е. то из  $\tilde{x}_j$ , для которого  $n_j$  максимально. Медианой называется то из выборочных значений, левее и правее которого расположено поровну элементов выборки. Гистограмма – это столбчатая диаграмма, у которой на интервале  $\Delta_i$  значение равно  $n_i/n$ ,  $i = 1, \dots, r$ . Полигоном называется ломаная линия с узлами в точках с координатами  $(\tilde{x}_i, n_i/n)$ .

Рассмотрим числовой пример на группировку данных. В опыте по изучению амплитудно-частотной характеристики колебаний руки оператора получены следующие амплитудные характеристики установившихся колебаний в мм ( $n = 100$ ).

|    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |
|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| 64 | 72 | 60 | 67 | 63 | 65 | 60 | 75 | 51 | 80 |
| 65 | 62 | 73 | 62 | 71 | 63 | 55 | 56 | 64 | 61 |
| 65 | 69 | 69 | 65 | 68 | 58 | 62 | 52 | 68 | 72 |
| 66 | 62 | 67 | 60 | 68 | 60 | 60 | 58 | 57 | 60 |
| 64 | 59 | 64 | 65 | 60 | 63 | 59 | 60 | 58 | 62 |
| 63 | 55 | 61 | 45 | 46 | 64 | 72 | 70 | 70 | 63 |
| 63 | 41 | 62 | 60 | 69 | 71 | 58 | 60 | 64 | 70 |
| 73 | 52 | 59 | 54 | 64 | 65 | 70 | 65 | 58 | 52 |
| 56 | 55 | 60 | 54 | 59 | 71 | 63 | 55 | 55 | 58 |
| 66 | 62 | 82 | 54 | 74 | 58 | 55 | 62 | 75 | 62 |

Здесь  $X_{(1)} = 41$ ,  $X_{(n)} = 82$ . Размах выборки  $T = 41$ . Первоначальное рекомендованное число интервалов  $r = 7$ . Длина типичного интервала  $T/r \approx 5,86$ . Результаты первичной группировки:

|   | интервал    | $n_i$ |
|---|-------------|-------|
| 1 | 40,90-46,76 | 3     |
| 2 | 46,76-52,61 | 4     |
| 3 | 52,61-58,47 | 19    |
| 4 | 58,47-64,33 | 39    |
| 5 | 64,33-70,19 | 22    |
| 6 | 70,19-76,04 | 11    |
| 7 | 76,04-82,10 | 2     |

Объединим первые два и последние два интервала. Получим грубую группировку:

|               |             |             |             |             |             |
|---------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| $\Delta_i$    | 40,90-52,61 | 52,61-58,47 | 58,47-64,33 | 64,33-70,19 | 70,19-82,10 |
| $\tilde{x}_i$ | 46,76       | 55,54       | 61,40       | 67,26       | 76,04       |
| $n_i$         | 7           | 19          | 39          | 22          | 13          |

Заметим, что в "переполненных" интервалах значения распределены следующим образом:

$$\begin{array}{cccccc} 59-61 & 62 & 63-64 & 65 & 66-70 \\ 16 & 9 & 14 & 7 & 15 \end{array}$$

Таким образом, можно разбить интервал  $(58,41, 70,19)$  на 5 интервалов. Получим

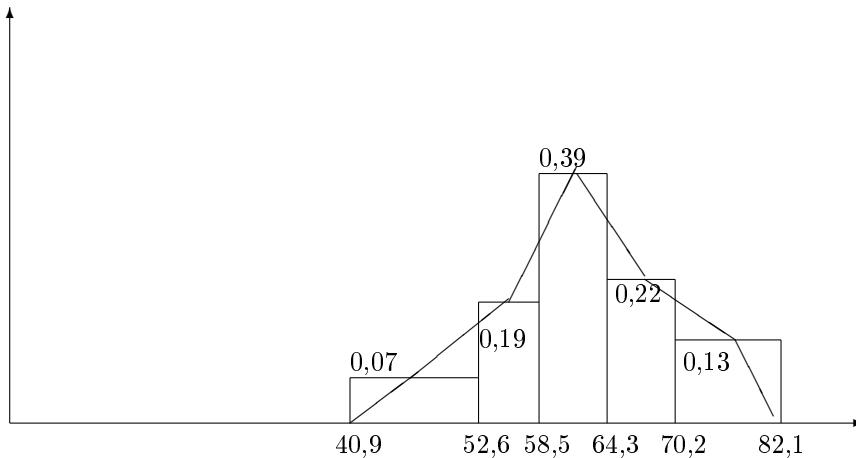
| $i$ | $\Delta_i$  | $\tilde{x}_i$ | $n_i$ |
|-----|-------------|---------------|-------|
| 1   | 40,90-52,61 | 46,76         | 7     |
| 2   | 52,61-58,47 | 55,54         | 19    |
| 3   | 58,47-61,50 | 59,98         | 16    |
| 4   | 61,50-62,50 | 62,00         | 9     |
| 5   | 62,50-64,50 | 63,50         | 14    |
| 6   | 64,50-65,50 | 64,00         | 7     |
| 7   | 65,50-70,19 | 67,85         | 15    |
| 8   | 70,19-82,10 | 76,04         | 13    |

Окончательно получено 8 интервалов. Чтобы проследить влияние разбиения на выборочные характеристики, приведем значения четырех средних: по полной выборке  $\bar{X} = 62,52$ ; с использованием первичной группировки – 62,22; после усечения краев (грубая группировка) – 62,45; по окончательной группировке – 62,44. Мы видим, что окончательная группировка незначительно сказалась на среднем, а число интервалов увеличилось. Поэтому вычисления дисперсии, асимметрии и эксцесса проведем с использованием грубой группировки. Заполним таблицу

| $i$                         | 1        | 2       | 3     | 4      | 5        |
|-----------------------------|----------|---------|-------|--------|----------|
| $n_i$                       | 7        | 19      | 39    | 22     | 13       |
| $\tilde{x}_i$               | 46,76    | 55,54   | 61,40 | 67,26  | 76,04    |
| $\tilde{x}_i - \bar{X}$     | -15,46   | -6,68   | -0,82 | 5,04   | 13,82    |
| $(\tilde{x}_i - \bar{X})^2$ | 239,01   | 44,62   | 0,67  | 25,40  | 190,99   |
| $(\tilde{x}_i - \bar{X})^3$ | -3695,12 | -298,08 | -0,55 | 128,02 | 2639,51  |
| $(\tilde{x}_i - \bar{X})^4$ | 57126,54 | 1191,16 | 0,45  | 645,24 | 36478,09 |

Вычисления дают  $S^2 = 55,90$ ,  $S = \sqrt{S^2} = 7,48$ ,  $A_s X = 0,13$  (пик слегка влево),  $E_x X = 2,91 - 3 = -0,09$  (пик скорее острый, чем пологий).

Гистограмма и полигон



Бывает, что среди наблюдаемых значений присутствуют такие, которые сильно отличаются от остальных. Как правило, это крайние по величине наблюдения. Эти наблюдения (если они действительно резко выбиваются из общего ряда наблюдений) называют грубыми ошибками наблюдения. Их желательно исключить из обрабатываемой выборки. Существует много способов (критериев) определения, является ли данное наблюдение грубой ошибкой. Эти способы иногда называют методами цензурирования. Один из таких методов – исключение тех значений, которые оказались в единственном числе при осуществлении группировки выборки, да еще отделены от остальных пустыми интервалами. Другой состоит в том, что отбрасыванию подлежит то значение, которое существенно изменяет  $\bar{X}$  (см. ниже).

Мы приводим следующий критерий: рассчитывается

$$t = \frac{\max |x_i - \bar{X}|}{S}$$

и сравнивается со значением  $t_n$ , приводимым ниже в таблице. Если  $t > t_n$ , то выделяющееся значение нужно отбросить.

| $n$ | $t_n$ | $n$ | $t_n$ |
|-----|-------|-----|-------|
| 5   | 1,972 | 30  | 3,291 |
| 10  | 2,616 | 35  | 3,364 |
| 15  | 2,905 | 40  | 3,424 |
| 20  | 3,079 | 45  | 3,474 |
| 25  | 3,200 | 50  | 3,518 |

Следует иметь ввиду, что для уверенного пользования этим критерием нужно, чтобы наблюдения имели нормальный (в смысле распределения) характер. Соответствующий критерий для проверки этого будет дан ниже.

## 1.5 Доверительные интервалы. Таблицы некоторых распределений

Как уже отмечалось,  $\bar{X}, S^2$  являются лишь оценками математического ожидания и дисперсии, причем их совпадение с теоретическими характеристиками практически исключено (имеет нулевую вероятность). Иногда бывает удобно указать интервал, внутри которого теоретическая, недоступная непосредственному измерению характеристика попадает с достаточно большой, близкой к единице, вероятностью. Такой интервал называют доверительным. Более точно, если  $\theta$  – неизвестный параметр, а  $\varepsilon$  – достаточно малое число, то интервал  $[\theta^-, \theta^+]$  называется доверительным интервалом для  $\theta$  уровня  $1 - \varepsilon$ , если неравенство  $\theta^- \leq \theta \leq \theta^+$  выполнено с вероятностью  $1 - \varepsilon$ , или в  $100(1 - \varepsilon)$  процентах случаев.

Приведем без обоснования формулы для вычисления границ доверительных интервалов для математических ожиданий и дисперсий.

### 1.5.1 Построение доверительного интервала для математического ожидания, если дисперсия $\sigma^2$ заранее известна. Таблица стандартного нормального распределения

Нужные границы рассчитываются по формулам

$$a^- = \bar{X} - \frac{\sigma t_\varepsilon}{\sqrt{n}}, \quad a^+ = \bar{X} + \frac{\sigma t_\varepsilon}{\sqrt{n}},$$

где  $t_\varepsilon$  ищется по таблице функции стандартного нормального распределения  $\Phi$  из соотношения

$$\Phi(-t_\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{2}.$$

Наиболее употребимые  $t_\varepsilon$

$$\begin{array}{lll} \Phi(0,00) = 0,500 & \Phi(-1,28) = 0,100 & \Phi(-1,64) = 0,050 \\ \Phi(-2,32) = 0,010 & \Phi(-2,58) = 0,005 & \Phi(-2,98) = 0,001 \end{array}$$

Ниже приводится таблица  $\Phi(x)$ ,  $x < 0$ . Для положительных значений  $x$  применяем формулу  $\Phi(x) = 1 - \Phi(-x)$ ,

Функция стандартного нормального распределения

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{t^2}{2}} dt$$

|           |       |       |       |       |       |       |       |       |
|-----------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| $x$       | -3,00 | -2,80 | -2,60 | -2,40 | -2,20 | -2,00 | -1,80 | -1,60 |
| $\Phi(x)$ | 0,001 | 0,003 | 0,005 | 0,008 | 0,014 | 0,023 | 0,036 | 0,055 |
| $x$       | -1,40 | -1,20 | -1,00 | -0,80 | -0,60 | -0,40 | -0,20 | -0,10 |
| $\Phi(x)$ | 0,081 | 0,115 | 0,159 | 0,212 | 0,274 | 0,345 | 0,421 | 0,460 |

### 1.5.2 Построение доверительного интервала для математического ожидания, если дисперсия неизвестна. Распределение Стьюдента

В этом случае дисперсия заменяется на корень квадратный из ее оценки  $S^2$ , и меняется характер распределения.

$$a^- = \bar{X} - \frac{S\tau_{\varepsilon,n}}{\sqrt{n-1}}, \quad a^+ = \bar{X} + \frac{S\tau_{\varepsilon,n}}{\sqrt{n-1}},$$

где  $\tau_{\varepsilon,n}$  – двусторонняя критическая точка распределения Стьюдента с  $n-1$  степенью свободы. Ее значения находятся из таблицы.

Двусторонние критические точки  
(коэффициенты) Стьюдента  $\tau_{\varepsilon,n}$

| $n$ | $\varepsilon$ |      | $n$      | $\varepsilon$ |      |
|-----|---------------|------|----------|---------------|------|
|     | 0,1           | 0,01 |          | 0,1           | 0,01 |
| 5   | 2,02          | 4,03 | 25       | 2,06          | 2,79 |
| 10  | 2,23          | 3,17 | 30       | 2,04          | 2,75 |
| 15  | 2,13          | 2,95 | 50       | 2,01          | 2,68 |
| 20  | 2,09          | 2,85 | $\infty$ | 1,64          | 2,57 |

### 1.5.3 Построение доверительного интервала для дисперсии. Таблицы распределения хи-квадрат

Формулы для соответствующих границ имеют вид

$$(\sigma^2)^- = \frac{nS^2}{T_{\varepsilon,n}^+}, \quad (\sigma^2)^+ = \frac{nS^2}{T_{\varepsilon,n}^-},$$

где  $T_{\varepsilon,n}^+$  – критическая точка распределения  $\chi^2$  с  $n - 1$  степенью свободы уровня  $\frac{\varepsilon}{2}$ , а  $T_{\varepsilon,n}^-$  – такая же точка уровня  $1 - \frac{\varepsilon}{2}$ . Эти значения берутся из таблицы.

Критические точки распределения  $\chi^2$

| $n$ | $\varepsilon$         |       | $n$ | $\varepsilon$ |       |
|-----|-----------------------|-------|-----|---------------|-------|
|     | 0,95                  | 0,05  |     | 0,95          | 0,05  |
| 1   | $0,39 \times 10^{-5}$ | 3,84  | 19  | 10,12         | 30,14 |
| 2   | 0,103                 | 5,99  | 20  | 10,85         | 31,41 |
| 3   | 0,352                 | 7,81  | 24  | 13,85         | 36,42 |
| 4   | 0,711                 | 9,49  | 25  | 14,61         | 37,65 |
| 5   | 1,15                  | 11,07 | 29  | 17,71         | 42,56 |
| 6   | 1,64                  | 12,59 | 30  | 18,49         | 43,77 |
| 9   | 3,33                  | 16,92 | 34  | 21,66         | 48,60 |
| 10  | 3,94                  | 18,31 | 35  | 22,47         | 49,80 |
| 14  | 6,57                  | 23,68 | 49  | 33,93         | 66,34 |
| 15  | 7,26                  | 25,00 | 50  | 34,76         | 67,50 |

## 1.6 Проверка статистических гипотез - общие принципы

Предположим, что нам нужно принять одно из двух взаимоисключающих решений (гипотез)  $H_0$  или  $H_1$  относительно наблюдаемой случайной величины. Если при этом мы руководствуемся имеющейся выборкой  $X$ , то говорим, что имеет место задача проверки статистических гипотез, а соответствующее решающее правило, указывающее, которую из гипотез надо принять, называют критерием для проверки  $H_0$  против  $H_1$ .  $H_0$  обычно выбирается так, что для ее принятия нужны гораздо менее убедительные аргументы, чем для того, чтобы ее отвергнуть. Тогда  $H_0$  называют основной гипотезой, а  $H_1$  – альтернативной гипотезой или альтернативой. Часто  $H_1$  вообще не формулируется, имея ввиду, что это решение совпадает с отрицанием  $H_0$ .

В силу широкого спектра применения таких задач имеется обширная терминология, связанная с критериями. Для их определения введем обозначения.

|                   | Статус объекта   |                     |         |
|-------------------|------------------|---------------------|---------|
|                   | "случай" $(H_0)$ | "не случай" $(H_1)$ | Всего   |
| $H_0$ принимается | $a$              | $b$                 | $a + b$ |
| $H_0$ отвергается | $e$              | $f$                 | $e + f$ |
| Всего             | $a + e$          | $b + f$             | $n$     |

Здесь  $a$  – число тех изученных объектов, для которых принимается  $H_0$ , и она действительно справедлива,  $b$  – число тех объектов, для которых мы приняли основную гипотезу, а она в действительности не верна и т.д. Определим некоторые характеристики критерия.

- Вероятность ошибки первого рода –  $\frac{e}{a+e}$ .
- Вероятность ошибки второго рода –  $\frac{b}{b+f}$ .
- Специфичность, или мощность критерия –  $\frac{f}{b+f}$ .
- Чувствительность –  $\frac{a}{a+e}$ .
- Частота случаев –  $\frac{a}{n}$ .
- Относительный риск –  $\frac{a}{a+e} : \frac{e}{e+f}$ .
- Доля ложноотрицательных –  $\frac{e}{e+f}$ .
- Доля ложноположительных –  $\frac{b}{a+b}$ .

Среди этих характеристик только три независимых, остальные могут быть вычислены через них. В прикладных работах чаще всего используется частота случаев, чувствительность и специфичность.

Среди всех критериев для проверки конкретных гипотез выделяется группа так называемых критериев согласия. В основе их действия лежит следующее простое соображение. Предположим, что гипотеза  $H_0$  справедлива и посмотрим, согласуется ли это предположение с характером выборочных данных. Если некоторая, соответствующим образом подобранный, мера отклонения ожидаемых с точки зрения справедливости  $H_0$  от наблюдаемого в эксперименте принимает небольшие (не превосходящие некоторого критического) значения, то основная гипотеза принимается, если большие – отвергается, и принимается альтернативная гипотеза. При этом в качестве критического берется то значение, которое при  $H_0$  превосходит выбранной мерой с малой вероятностью (0,1, 0,01 и т.п.). В психологических значениях обычно выбирают пятипроцентный уровень ошибки (0,05), считая при этом, что принятие ошибочного решения в 5 процентах случаев допустимо. Однако иногда приходится выбирать уровни ошибок, имеющие другие величины. Следует иметь ввиду что, выбирая меньший уровень ошибки, мы увеличиваем допустимые отклонения от идеала. Рассмотрим примеры некоторых из статистических критериев.

### 1.6.1 Проверка равенства средних значений двух выборок

Пусть есть выборки  $X, Y$  объемов  $n, m$  соответственно. Предположим, что  $n \leq m$ . Основная гипотеза состоит в том, что  $\mathbf{MX} = \mathbf{MY}$ . Альтернатива – математические ожидания не совпадают (обычно не формулируется). Для проверки построим

$$u_i = x_i - \sqrt{\frac{n}{m}} y_i, \quad i = 1, \dots, n,$$

$$\bar{U} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n u_i, \quad S_U^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (u_i - \bar{U})^2, \quad T = \frac{\bar{X} - \bar{Y}}{S_U} \sqrt{n-1}.$$

Если  $|T|$  не превосходит двусторонней критической точки распределения Стьюдента с  $n-1$  степенью свободы, то гипотезу  $H_0$  можно принять.

Идея функционирования описанного здесь критерия состоит в том, что при совпадающих или незначительно различающихся математических ожиданиях имеющихся выборок, их оценки  $\bar{X}, \bar{Y}$  будут также близки, а значит, величина  $T$ , основанная на их разности, должна быть малой. Те числа, на которые умножается и делится разность выборочных средних для вычисления  $T$ , а также выбор таблицы для определения критического значения, с которым нужно рассчитанное  $T$  сравнивать, призваны придать точный смысл выражению "различие  $\bar{X}$  и  $\bar{Y}$  не является слишком большим".

Как уже упоминалось выше, этот критерий можно применять для исключения грубых ошибок наблюдения. Для этого в качестве выборки  $X$  возьмем  $Y$  с удаленным "подозрительным" значением ( $n = m-1$ ). Если различие  $\mathbf{MX}$  и  $\mathbf{MY}$  оказалось существенным (принята альтернативная гипотеза), то удаленное значение следует признать грубой ошибкой. Для пользования этим критерием не требуется проверки равенства дисперсий, но нужна нормальность распределений  $X, Y$ .

### 1.6.2 Проверка значимости коэффициента корреляции

Рассмотрим две выборки  $X, Y$  одинакового объема  $n$ . Основная гипотеза состоит в том, что наблюдаемые распределения некоррелированы, т.е.  $\rho(X, Y) = 0$ . Это предположение близко к независимости  $X$  и  $Y$  и часто им подменяется, что совершенно законно для случая, когда обе выборки имеют совместное нормальное распределение. Идея критерия состоит здесь в том, что если наблюдаемые величины некоррелированы, то выборочный коэффициент корреляции

$$R(X, Y) = \frac{\bar{XY} - \bar{X}\bar{Y}}{S_X S_Y}$$

незначительно отличается от нуля. Здесь

$$\bar{XY} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n x_j y_j -$$

среднее произведение,  $S_X$ ,  $S_Y$  – квадратные корни из выборочных дисперсий  $X$ ,  $Y$  соответственно.

Для проверки гипотезы о нулевом (незначимом) коэффициенте корреляции рассчитаем

$$T = \frac{R\sqrt{n-2}}{\sqrt{1-R^2}},$$

где  $R$  – выборочный коэффициент корреляции и сравним  $|T|$  с двусторонней критической точкой распределения Стьюдента с  $n-2$  степенями свободы. Если критический уровень не превзойден – коэффициент корреляции  $\rho$  незначимо отличается от 0.

### 1.6.3 Проверка равенства дисперсий

Даны две выборки –  $X$  объема  $n$  и  $Y$  объема  $m$ . Основная гипотеза состоит в том, что дисперсии двух наблюдаемых случайных величин совпадают. Здесь критерий основан на том, что если гипотеза справедлива, то отношение выборочных дисперсий  $X$  и  $Y$  будет близко к единице. Свообразие этой задачи состоит в том, что при нарушении гипотезы отклонение от 1 упомянутого отношения возможно в стороны уменьшения и увеличения несимметричным образом. Дело в том, что уменьшение этого отношения ограничено снизу нулем, а сверху ничем не ограничено. Именно поэтому для проверки этой гипотезы приходится сравнивать рассчитанную величину с двумя критическими значениями.

Рассчитаем

$$f = \frac{(m-1)nS_X^2}{(n-1)mS_Y^2},$$

где  $S_X^2$ ,  $S_Y^2$  – выборочные дисперсии  $X$ ,  $Y$  соответственно. Найдем левую  $f^-$  и правую  $f^+$  критические точки распределения Фишера с  $n-1$ ,  $m-1$  степенями свободы по соответствующей таблице (имеется практически в любом учебнике по статистическим методам). Если выполнено неравенство  $f^- \leq f \leq f^+$ , то можно считать дисперсии равными. В некоторых таблицах даны лишь правые критические точки. Тогда, с целью обеспечения тривиального ограничения снизу, при расчете  $f$  требуется большую выборочную дисперсию разделить на меньшую (т.е. за  $X$  брать ту из выборок, для которой  $S_X$  больше).

Отметим, что все критерии, приведенные выше, корректно работают лишь для случая выборок из нормального распределения. Проверка гипотезы о виде распределения описана в следующем разделе. В случае же, когда мы не уверены в нормальности наших распределений, или гипотеза нормальности не принимается, практики все равно пользуются описанными критериями, хотя достоверность их заключений в этом случае является высокой лишь в ситуации, когда мы имеем выборки очень больших объемов (несколько сотен элементов).

## 1.7 Проверка гипотезы о виде распределения. Критерий $\chi^2$

Пусть основная гипотеза состоит в том, что наблюдаемая величина имеет конкретное, известное распределение (например, нормальное распределение с заранее заданными параметрами  $a$ ,  $\sigma^2$ ). Предположим, что значения нашей величины разбиты на группы  $\Delta_1, \dots, \Delta_r$  и  $p_1, \dots, p_r$  - вероятности попадания величины, имеющей требуемое распределение, в каждую из групп соответственно. Естественно, при этом предполагается, что  $\sum_{i=1}^r p_i = 1$ . Обозначим, как и раньше, через  $n_i$ ,  $i = 1, \dots, r$  количества элементов выборки, попавших в каждую из групп. Статистикой хи-квадрат называется

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^r \frac{(n_i - np_i)^2}{np_i}.$$

Если рассчитанное значение  $\chi^2$  меньше, чем критическая точка распределения хи-квадрат с  $r - 1$  степенью свободы, то гипотеза о виде распределения принимается.

Как видно из формулы, все вычислительные трудности сводятся к расчету чисел  $p_i$ . Если, например, проверяется гипотеза о стандартном нормальном распределении, и  $\Delta_i = [z_{i-1}, z_i]$ , то  $p_i = \Phi(z_i) - \Phi(z_{i-1})$ . Если рассматривается гипотеза о нормальном характере распределения, и параметры его неизвестны, а именно такая гипотеза в приложениях встречается наиболее часто, то следует положить

$$p_i = \Phi\left(\frac{z_i - \bar{X}}{S}\right) - \Phi\left(\frac{z_{i-1} - \bar{X}}{S}\right) \quad (1.1)$$

и число степеней свободы распределения хи-квадрат уменьшается на число параметров, которые мы заменили их оценками (а их два). Этот результат следует из более общей теоремы Фишера, которую здесь мы обсуждать не будем.

Итак, для того, чтобы проверить гипотезу о нормальном характере выборки, нужно произвести ее группировку, используя  $z_0 = -\infty$ ,  $z_r = \infty$  и заполнить следующую таблицу:

| строка | содержание                                 | способ вычисления               |
|--------|--|---------------------------------|
| 1      | $z_j$                                      | по выборке                      |
| 2      | $\frac{z_j - \bar{X}}{S}$                  | по строке 1 и выборке           |
| 3      | $\Phi\left(\frac{z_j - \bar{X}}{S}\right)$ | по таблице $\Phi(x)$ и строке 2 |
| 4      | $p_j$                                      | по формуле (1.1) и строке 3     |
| 5      | $np_j$                                     | по строке 4                     |
| 6      | $n_j$                                      | по выборке                      |
| 7      | $(n_j - np_j)^2$                           | по строкам 5, 6                 |
| 8      | $\frac{(n_j - np_j)^2}{np_j}$              | по строкам 7, 5                 |

Сумма последней, восьмой строки и есть значение статистики  $\chi^2$ . Оно сравнивается с критической точкой распределения хи-квадрат с  $r - 3$  степенями свободы, где  $r$  – окончательное число групп.

Рассмотрим числовой пример, группировка для которого уже была проведена. Это данные о колебании руки оператора. Напомним, что в этой выборке  $\bar{X} = 62,45$ ,  $S = 7,48$ . Границы первого и последнего интервалов заменяем бесконечными. Составляем таблицу.

|   |  |           |       |       |       |       |          |
|---|--|-----------|-------|-------|-------|-------|----------|
| 1 | $z_j$                                      | $-\infty$ | 52,61 | 58,47 | 64,33 | 70,19 | $\infty$ |
| 2 | $\frac{z_j - \bar{X}}{S}$                  | $-\infty$ | -1,31 | -0,53 | 0,25  | 1,03  | $\infty$ |
| 3 | $\Phi\left(\frac{z_j - \bar{X}}{S}\right)$ | 0         | 0,090 | 0,300 | 0,580 | 0,850 | 1        |
| 4 | $p_j$                                      |           | 0,090 | 0,210 | 0,280 | 0,270 | 0,150    |
| 5 | $np_j$                                     |           | 9     | 21    | 28    | 27    | 15       |
| 6 | $n_j$                                      |           | 7     | 19    | 39    | 22    | 13       |
| 7 | $(n_j - np_j)^2$                           |           | 4     | 4     | 121   | 25    | 4        |
| 8 | $\frac{(n_j - np_j)^2}{np_j}$              |           | 0,444 | 0,190 | 4,321 | 0,926 | 0,267    |

Заметим, что строки, начиная с четвертой, не полны, поскольку интервалов на один меньше, чем их границ. Сумма последней строки  $\chi^2 = 6,149$ . Число степеней свободы  $5-3 = 2$ . Критическая точка по таблице – 5,99. Поэтому формально гипотезу о нормальном характере распределения следует отвергнуть. Однако следует иметь ввиду два обстоятельства – близость расчетного и критического значений, а также то, что группировка, используемая здесь, проведена с нарушением одного из двух основных принципов – имеются "перенаселенные" интервалы. Внимательное изучение таблицы показывает, что именно один из них дает самый существенный вклад в величину  $\chi^2$ . Поэтому необходим повторный расчет, по окончательной группировке из п. 4, который показывает, что гипотезу следует принять.

С помощью критерия  $\chi^2$  можно проверять и ряд других гипотез, например, гипотезу однородности, которая состоит в отсутствии существенных различий в поведении двух наблюдаемых величин. Рассмотрим эту задачу.

Пусть даны две выборки:  $X$  объема  $n$  и  $Y$  объема  $m$ . Основная гипотеза состоит в том, что распределения двух наблюдаемых величин совпадают, т.е. фактически наблюдается одна величина. Для проверки объединим две выборки в одну объема  $n + m$ , осуществим ее группировку и заполним таблицу, называемую таблицей сопряженности.

| интервал            | 1           | ... | $r$         | всего   |
|---------------------|-------------|-----|-------------|---------|
| число элементов $X$ | $n_1$       | ... | $n_r$       | $n$     |
| число элементов $Y$ | $m_1$       | ... | $m_r$       | $m$     |
| всего               | $n_1 + m_1$ | ... | $n_r + m_r$ | $n + m$ |

Затем рассчитываем

$$\chi^2 = (n+m) \left( \sum_{i=1}^r \frac{n_i^2}{n(n_i+m_i)} + \sum_{i=1}^r \frac{m_i^2}{m(n_i+m_i)} - 1 \right)$$

и сравниваем с критической точкой распределения хи-квадрат с  $r - 1$  степенью свободы. Если соответствующее критическое значение не превзойдено, гипотезу об однородности можно принять.

Заметим, что идея этого критерия весьма проста – если два наших ряда наблюдений однородны, то в любой интервал должно попасть примерно равное количество слагаемых. Отсюда следует, что описанную процедуру при малом числе данных можно применять для проверки гипотезы о незначительности изменений при двух последовательных измерениях любой характеристики без группировки. Например, психолог оценивает уровень тревожности у каждого члена некоторой группы до и после тренинга. Наличие влияния тренинга на снижение тревожности должно означать, что а) средний уровень тревожности после тренинга меньше, чем до него; и б) различие двух уровней тревожности существенно. Условие а) проверяется путем вычисления средних, условие б) с помощью описанного выше критерия.

Рассмотрим числовой пример. Группа студентов-филологов ( $X$ ) и группа студентов-математиков ( $Y$ ) получила следующие оценки при тестировании в баллах

| сумма баллов | 10 | 11 | 12 | 13 | 14 | 15 | 16 | 17 | 18 | Всего |
|--------------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|-------|
| число $X$    | 3  | 4  | 2  | 7  | 9  | 11 | 8  | 5  | 1  | 50    |
| число $Y$    | 5  | 3  | 5  | 5  | 5  | 2  | 10 | 2  | 3  | 40    |
| всего        | 8  | 7  | 7  | 12 | 14 | 13 | 18 | 7  | 4  | 90    |

Расчеты показывают, что  $\chi^2 = 90(1,117 - 1) = 10,53$ . По таблице хи-квадрат с 8 степенями свободы находим критическую точку 15,57. Таким образом, различие рядов несущественно. и можно принять гипотезу о несущественном влиянии направления образования на результаты теста.

Во второй части пособия рассматриваются более сложные и узкоспециализированные методы статистического анализа результатов эксперимента, связанные с установлением наличия и характера связи между показателями в виде конкретных формул, а также задачами снижения размерности и классификации данных.

## 2.1 Экспертные оценки

Предположим, что некоторому количеству  $m$  людей, которых в этом контексте принято называть экспертами, предложили проранжировать (пронумеровать в порядке убывания значимости)  $n$  каких-либо факторов. Если некоторый из указанных фактор с точки зрения эксперта наиболее важен, то он присваивает ему ранг (номер) 1, следующему по значимости – 2 и т.д. Если какие-то несколько факторов эксперт не может или не хочет ранжировать, то он присваивает всем им одинаковые ранги, равные среднему арифметическому тех рангов, которые должны были быть присвоены. Естественно, каждый из экспертов высказывает свое мнение, и ранги одного фактора у разных экспертов могут значительно различаться.

Для установления наличия и степени согласованности мнений двух экспертов используется коэффициент ранговой корреляции Спирмена, который можно рассматривать, как меру близости мнений одного эксперта к мнениям другого:

$$R(X, Y) = 1 - \frac{6 \sum_{i=1}^n d_i^2}{n^3 - n - T_X - T_Y}.$$

Этот коэффициент рассчитывается для пары экспертов  $X, Y$ . Здесь  $d_i$  – разность рангов, присвоенных экспертами  $i$ -му фактору,  $n$  – число оцениваемых факторов,  $T_X, T_Y$  вычисляются для каждого из экспертов  $X, Y$  по формуле

$$T = \frac{1}{2} \sum (t_j^3 - t_j),$$

где сумма берется по всем группам связанных (равных) рангов у выбранного эксперта, при этом  $t_j$  – число факторов с равными рангами, составляющими  $j$ -ю группу. Если у эксперта связанных рангов нет, то для него  $T = 0$ . Чем больше  $R$ , тем сильнее согласованы мнения экспертов. Отрицательные же его значения соответствуют "противоположно направленным" мнениям, т.е. ситуации конфликта.

Тех экспертов, мнения которых наиболее согласованы, можно объединить в группу, и рассматривать эту группу в качестве "коллективного эксперта". Суммы рангов всех экспертов группы для данного фактора называется его коллективным рангом. Ранги, присвоенные факторам в соответствии с возрастанием их коллективных рангов, называются групповыми рангами.

Рассмотрим пример с оцениванием студентами состояния общественного транспорта. У первого, второго и пятого экспертов нет связанных рангов,

а значит  $T_1 = T_2 = T_5 = 0$ . У третьего имеется одна группа связанных факторов, содержащая  $t_1 = 2$  фактора (ранги по 6,5). Т.о.  $T_3 = (2^3 - 2)/2 = 3$ . У четвертого  $t_1 = 5$  связанных факторов, поэтому  $T_4 = (5^3 - 5)/2 = 60$ . Если бы у эксперта имелось две группы связанных факторов, содержащих, скажем, 3 и 2 фактора, то  $T = ((3^3 - 3) + (2^3 - 2))/2 = 15$  для такого эксперта. Произведем, например, расчет

$$R(1,2) = 1 - \frac{6 \times}{\frac{(1-2)^2 + (3-1)^2 + (5-3)^2 + (7-4)^2 + (6-7)^2 + (4-6)^2 + (2-5)^2}{7^3 - 7 - 0 - 0}} \approx 0,41.$$

Остальные коэффициенты вычисляются аналогично. Заполним таблицу.

*Коэффициенты ранговой корреляции  
в задаче о студентах и транспорте*

| Эксперты | 1 | 2    | 3    | 4    | 5    |
|----------|---|------|------|------|------|
| 1        | 1 | 0,41 | 0,75 | 0,78 | 0,64 |
| 2        | - | 1    | 0,24 | 0,22 | 0,61 |
| 3        | - | -    | 1    | 0,40 | 0,43 |
| 4        | - | -    | -    | 1    | 0,56 |
| 5        | - | -    | -    | -    | 1    |

Нижняя часть таблицы не заполнена, т.к.  $R(i,j) = R(j,i)$  для всех пар индексов, т.е. таблица симметрична. Объединим в группу первого и четвертого эксперта, т.к. максимальная согласованность мнений наблюдается именно между ними. Можно было бы к ним добавить третьего, но он, несмотря на его хорошую согласованность с первым, имеет не очень хорошее согласование с четвертым. Оставшаяся часть таблицы содержит максимальное число  $R(2,5)$  – можно сформировать еще одну группу, состоящую из второго и пятого экспертов. Отметим еще раз, что группа может состоять из любого числа экспертов, но все они попарно должны иметь большие положительные коэффициенты Спирмена. Но у нас группы получились состоящими не более, чем из двух экспертов. Итак,

- 1-я группа: 1, 4 эксперты;
- 2-я группа: 2, 5 эксперты;
- 3-я группа – 3-й эксперт.

Коллективные ранги  $f_i$  в группах:

| группы | ф а к т о р ы |   |     |     |    |    |   |
|--------|---------------|---|-----|-----|----|----|---|
|        | ч             | з | о   | д   | к  | с  | ц |
| 1      | 2             | 8 | 10  | 12  | 11 | 9  | 4 |
| 2      | 5             | 3 | 8   | 8   | 14 | 12 | 6 |
| 3      | 2             | 2 | 6,5 | 6,5 | 5  | 2  | 4 |

Заполним таблицу групповых рангов:

| группы | факторы |   |     |     |   |   |   |
|--------|---------|---|-----|-----|---|---|---|
|        | ч       | з | о   | д   | к | с | ц |
| 1      | 1       | 3 | 5   | 7   | 6 | 4 | 2 |
| 2      | 2       | 1 | 4,5 | 4,5 | 7 | 6 | 3 |
| 3      | 2       | 2 | 6,5 | 6,5 | 5 | 2 | 4 |

Теперь, считая каждую группу новым (групповым) экспертом, снова можно вычислить числа  $T_i$ ,  $i = 1, 2, 3$  уже для групп и, например, оценить согласованность мнений разных групп. Заметим, наконец, что значимость отличия  $R$  от нуля можно проверять, пользуясь критерием для коэффициента корреляции.

Для определения согласованности внутри уже построенных групп применяют так называемый коэффициент конкордации, который принимает значения между 0 и 1. Чем он больше, тем лучше согласована группа. Этот коэффициент вычисляют по формуле

$$W = \frac{6S_g}{m_g(n^3 - n) - 6T_g},$$

где  $T_g$  – сумма чисел  $T$  для всех экспертов группы,  $m_g$  – количество экспертов в группе, а

$$S_g = \frac{1}{m_g} \sum_{j=1}^n (f_j - L_g)^2,$$

а число  $L_g$  есть средний коллективный ранг группы:

$$L_g = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n f_j.$$

У нас  $L_A = L_B = 8$ ,  $L_C = 4$ ,  $S_A = 41$ ,  $S_B = 45$ ,  $S_C = 25,5$ ,  $T_A = 20$ ,  $T_B = 0$ ,  $T_C = 5$ , а значит  $W_A = W_B = 0,8$ ,  $W_C = 1$ . Выводы сделайте сами.

## 2.2 Регрессионный анализ

Если имеются основания считать, что случайная величина  $X$  зависит от другой случайной величины  $Y$  (например, коэффициент корреляции между ними значимо отличается от нуля), то можно попытаться восстановить формулу, выражющую эту зависимость. Естественно, речь может идти только о приближенной формуле из какого-то параметрического класса формул, из которых наиболее просты линейные зависимости:

$$Y = \alpha X + \beta, \quad X = kY + b. \quad (2.2)$$

Параметры  $\alpha, \beta, k, b$  подбираются, как правило, из условий

$$S(\alpha, \beta) = \sum_{i=1}^n (Y_i - \alpha X_i - \beta)^2 \rightarrow \min_{\alpha, \beta} \quad (2.3)$$

и

$$T(k, b) = \sum_{i=1}^n (X_i - kY_i - b)^2 \rightarrow \min_{k, b} \quad (2.4)$$

Такой метод подбора коэффициентов называют методом наименьших квадратов. Геометрически процесс подбора коэффициентов можно интерпретировать следующим образом. В качестве исходных данных у нас имеются набор попарно соединенных данных вида

$$\begin{array}{cccc} x_1 & x_2 & \dots & x_n \\ y_1 & y_2 & \dots & y_n \end{array}$$

которые получены в  $n$  экспериментах, в  $i$ -м из которых одновременно наблюдалась пара  $(x_i, y_i)$  (можно рассматривать ее как точку  $A_i$  на плоскости). Итак, мы получили  $n$  точек. Уравнения (2.2) задают на этой плоскости прямые линии, а задачи подбора их коэффициентов можно теперь переформулировать, как задачу проведения прямых, проходящих как можно ближе к этим точкам.

Найденные из условий (2.3, 2.4) уравнения (2.2) могут быть записаны так:

$$Y = \rho \frac{S_Y}{S_X} (X - \bar{X}) + \bar{Y}, \quad X = \rho \frac{S_X}{S_Y} (Y - \bar{Y}) + \bar{X},$$

где  $\rho$  – выборочный коэффициент корреляции,  $S_X, S_Y$  – корни квадратные из выборочных дисперсий  $X, Y$  соответственно. Эти два уравнения называются уравнениями прямых регрессии.

Если мы не хотим ограничиваться линейной зависимостью и не нуждаемся в простых формулах, но хотим увидеть характер зависимости между  $X$  и  $Y$  наглядно, имеет смысл построить так называемое поле корреляции. Для этого осуществим группировку выборки  $X$  на  $r$  групп  $A_1, \dots, A_r$ , а выборку  $Y$  разобьем на  $s$  групп  $B_1, \dots, B_s$ . Обозначим через  $\Delta_{i,j}$  прямоугольник, проекции которого на оси  $Ox$  и  $Oy$  совпадают с  $A_i$  и  $B_j$  соответственно. Двумерный вектор с координатами  $X, Y$  попадает, таким образом, в  $\Delta_{i,j}$  тогда и только тогда, когда  $X \in A_i$  и  $Y \in B_j$ . Пусть  $n_1, \dots, n_r$  количества элементов  $X$  в  $A_1, \dots, A_r$ , а  $m_1, \dots, m_s$  – элементов  $Y$  в  $B_1, \dots, B_s$  соответственно. Определим групповые средние

$$\begin{aligned} \bar{Y}_{(i)} &= \frac{1}{n_i} \sum_{\{k: X_k \in A_i\}} Y_k, \quad i = 1, \dots, r, \\ \bar{X}_{(j)} &= \frac{1}{m_j} \sum_{\{k: Y_k \in B_j\}} X_k, \quad j = 1, \dots, s. \end{aligned}$$

Далее построим на плоскости  $Oxy$  ломаные с узлами в точках с координатами  $(\bar{X}_i, \bar{Y}_{(i)})$ ,  $i = 1, \dots, r$  и  $(\bar{X}_{(j)}, \bar{Y}_j)$ ,  $j = 1, \dots, s$ . Напомним, что  $\bar{X}_i$  – это середина отрезка  $A_i$ , а  $\bar{Y}_j$  – середина  $B_j$ . Построенные ломаные называют эмпирическими линиями регрессии, и их можно рассматривать как приближенные графики зависимостей  $Y$  от  $X$  и  $X$  от  $Y$ .

Результаты этого раздела позволяют приближенно предсказывать, какое значение будет принимать одна из величин, если значение другой нам известно. Конечно же, речь идет не о точном значении, а лишь об оценке.

## 2.3 Дисперсионный анализ

Рассмотрим задачу выявления и оценки степени влияния некоторого фактора А на изменчивость случайной величины  $X$ . Требуется выяснить, является ли влияние фактора на эту величину существенным. Фактор А при этом обычно считается нечисловым категоризованным или числовым, принимающим небольшое число значений. Его градации принято называть уровнями. Опишем идею критерия.

Пусть нам известна дисперсия  $\mathbf{D}_0X$  величины  $X$ , и мы имеем выборку значений  $X$  под действием фактора А. Очевидно, что если А не влияет на изменчивость, то оцененная по выборке дисперсия  $\mathbf{D}$  не значительно отличается от  $\mathbf{D}_0X$ . Если же  $\mathbf{D}X > \mathbf{D}_0X$ , то следует признать существенный характер влияния. Вообще говоря,

$$\mathbf{D}X = \mathbf{D}_0X + \mathbf{D}_AX,$$

где через  $\mathbf{D}_AX$  обозначена часть дисперсии, объясняемая влиянием фактора А. Если же исследуемых факторов несколько, то

$$\mathbf{D}X = \mathbf{D}_0X + \mathbf{D}_AX + \mathbf{D}_BX + \mathbf{D}_{A,B}X + \dots$$

Идея оценки влияния факторов основана на изучении доли дисперсии, которая объясняется через изучаемый фактор.

Сформулируем предположения, необходимые для применения описываемого далее аппарата:

1. выборки нормально распределены (проверка описана в разделе "Проверка гипотезы о виде распределения");
2. изучаемый фактор влияет на среднее значение  $X$  (справедливость этого исследователь должен проверить на основе своего предыдущего опыта или интуиции);
3. дисперсии  $X$  в каждой из градаций факторов однородны, т.е. их отличия незначимы (проверка описана в разделе "Проверка равенства дисперсий").

Основная задача при решении общей проблемы дисперсионного анализа – оценить влияние каждого из относительно небольшого числа факторов на значения наблюдаемой величины. Первый этап задачи – оценка общего влияния группы факторов, второй - частного (парциального) влияния каждого из факторов группы.

Выделяются следующие разновидности дисперсионного анализа: по числу факторов влияния; по количеству градаций (уровней) изменения изучаемых факторов, например, 3- или 2-х уровневый; по наличию или отсутствию повторных (параллельных) испытаний. Различают также полный и дробный, т.е. содержащий пропущенные уровни при испытаниях, дисперсионный анализ.

Рассмотрим подробнее полный однофакторный дисперсионный анализ с параллельными испытаниями. Исходные данные собраны в таблицу. Предполагается, что на каждом из  $m$  уровней фактора поставлено по  $n$  параллельных испытаний, в которых наблюдалось значение величины  $X$ . Ее значения, наблюденные в  $i$ -м испытании в предположении, что фактор находился на  $j$ -м уровне, обозначены  $x_{i,j}$ .

| Испытание | Уровни      |     |             |
|-----------|-------------|-----|-------------|
|           | $A_1$       | ... | $A_m$       |
| 1         | $x_{1,1}$   | ... | $x_{1,m}$   |
| ...       | ...         | ... | ...         |
| $n$       | $x_{n,1}$   | ... | $x_{n,m}$   |
| средние   | $\bar{x}_1$ | ... | $\bar{x}_m$ |

Объем выборки здесь, таким образом, равен  $N = nm$ . Обозначим

$$\bar{X} = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \bar{x}_j = \frac{1}{nm} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m x_{i,j}.$$

Нетрудно заметить, что

$$\sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^n (x_{i,j} - \bar{X})^2 = \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^n (x_{i,j} - \bar{x}_j)^2 + n \sum_{j=1}^m (\bar{x}_j - \bar{X})^2.$$

Обозначим левую часть этого равенства через  $Q$ , двойную сумму в правой части через  $Q_0$ , а второе слагаемое справа без множителя  $n$  через  $Q_A$ . При этом  $Q$  интерпретируется как общая изменчивость  $X$ ,  $Q_0$  как сумма изменчивостей внутри уровней, а  $Q_A$  как изменчивость  $X$  между уровнями, т.е. при переходе от уровня к уровню.

Таким образом, если ввести обозначения

$$\begin{aligned} u &= \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^n x_{i,j}^2, \quad t = \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^n x_{i,j}; \\ z &= \frac{1}{n} \sum_{j=1}^m (\sum_{i=1}^n x_{i,j})^2, \end{aligned}$$

то

$$Q = u - \frac{1}{N}t^2; \quad Q_0 = u - z; \quad Q_A = z - \frac{1}{N}t^2.$$

Определим

$$D_A = \frac{Q_A}{m-1}, \quad D_0 = \frac{Q_0}{N-m}, \quad F = \frac{D_A}{D_0}.$$

Теперь сравним рассчитанное по выборочным данным значение  $F$  с правой критической точкой распределения Фишера с  $m-1$ ,  $m(n-1)$  степенями свободы. Если критическое значение не превзойдено, следует принять гипотезу об отсутствии значимого влияния фактора  $A$  на величину  $X$ .

**Пример.** Сравнить три метода преподавания (использование различного наглядного материала для обучения). Результаты тестирования в трех

*Сравнение трех методов преподавания*

| учащийся        | метод 1 | метод 2 | метод 3 |              |
|-----------------|---------|---------|---------|--------------|
| 1               | 9       | 15      | 18      |              |
| 2               | 11      | 16      | 14      |              |
| 3               | 10      | 15      | 17      |              |
| 4               | 12      | 10      | 9       |              |
| 5               | 7       | 13      | 14      |              |
| 6               | 11      | 14      | 17      |              |
| 7               | 12      | 15      | 16      |              |
| 8               | 10      | 7       | 15      |              |
| 9               | 13      | 13      | 16      |              |
| 10              | 11      | 15      | 8       |              |
| 11              | 13      | 15      | 14      |              |
| 12              | 11      | 14      | 10      |              |
| 13              | 10      | 11      | 16      |              |
| 14              | 12      | 15      | 15      |              |
| 15              | 13      | 10      | 17      | всего        |
| суммы $S_j$     | 165     | 198     | 216     | $t = 579$    |
| суммы квадратов | 1853    | 2706    | 3242    | $u = 7801$   |
| $S_j^2$         | 27225   | 39204   | 46656   | $v = 113085$ |

группах учеников по 15 человек в баллах, а также некоторые промежуточные расчетные характеристики и их обозначения приводятся в таблице. Заметим, что в этом примере  $N = 45$ .

Вычислим по таблице  $z = (S_1 + S_2 + S_3)/15 = 7539,0$ . Теперь мы готовы привести основные результаты дисперсионного анализа:

- Факторная вариативность  $Q_A = z - \frac{t^2}{N} = 89,2$ ,  $D_A = 44,6$ .
- Случайная вариативность  $Q_0 = u - z = 262,0$ ,  $D_0 = 6,24$ .
- Общая вариативность  $Q = u - \frac{t^2}{N} = 351,2$ .
- Значение критерия  $F = 7,15$ .

По таблице распределения Фишера с 2, 42 степенями свободы, находим критическую точку уровня 0,01. Она равна 5,15. Поскольку расчетное значение критерия больше, то следует признать существенность влияния метода применения наглядных материалов на успеваемость учащихся. Более того, определяя долю  $Q_A$  в  $Q$ , видим, что примерно треть изменчивости баллов тестирования может быть объяснена через этот фактор.

## 2.4 Проблема отбора наиболее информативных показателей

Пусть при изучении  $n$  объектов у каждого из них наблюдается большое количество  $p$  показателей. Рассмотрим задачу уменьшения числа  $p$  с наименьшими потерями информации, содержащихся в наших наблюдениях. При этом исследователем могут ставиться следующие цели:

1. большая наглядность (визуализация) данных;
2. лаконизм получаемой модели, обозримость и простота зависимостей;
3. сжатие объемов хранимой информации о наблюдениях.

Конечно же, возможны иные цели или комбинация перечисленных. Меньшее количество признаков  $q$  (как правило,  $q \ll p$ ) может выбираться из уже имеющихся  $p$  или строиться вновь, как комбинации наблюдаемых показателей. Возможны разные варианты требований к новым показателям, например:

- наибольшая информативность (в разных смыслах);
- взаимная независимость показателей или их некоррелированность;
- наименьшее искажение геометрической структуры данных и т.д.

В зависимости от вида требований задается критерий оптимальности для предлагаемой системы признаков и строится алгоритм оптимального построения. При этом имеется три основных типа предпосылок к успешному решению поставленной задачи:

1. дублирование информации (сильная связь между показателями);
2. неинформативность некоторых из показателей (их незначительная изменчивость при переходе от объекта к объекту);
3. возможность агрегирования, т.е. объединения нескольких показателей в один без существенного ущерба для информативности.

Поставим задачу снижения размерности формально. Пусть  $x^{(1)}, \dots, x^{(p)}$  – наблюдаемые показатели,  $X = (x^{(1)}, \dots, x^{(p)})$ ,  $Z = Z(X)$  –  $q$ -мерная векторная функция,  $q \ll p$ ,  $Z(X) = (Z^{(1)}(X), \dots, Z^{(q)}(X))$ ,  $I_q(Z(X))$  – мера информативности или критерий оптимальности. Этот критерий определяется сущностью решаемой задачи. Варианты  $I$  будут приведены ниже. Предположим также, что задан класс  $F$  допустимых преобразований  $Z$ . Тогда задача ставится так: построить такое  $\tilde{Z}$  из класса  $F$ , что

$$I_q(\tilde{Z}(X)) = \max_{Z \in F} I_q(Z(X)).$$

Тот или иной выбор  $I$ ,  $F$  приводит к методу главных компонент, факторному анализу, методу экстремальной группировки признаков, многомерному

шкалированию, дисперсионному или регрессионному анализу. Два из этих методов уже рассмотрены нами, другие будут рассмотрены позднее.

Отметим, что дополнительную классификацию перечисленных методов можно провести по виду критерия информативности. Некоторые из них обладают так называемыми автоинформативными критериями, т.е. такими, которые определяются внутренней структурой данных. Таковыми, например, являются задачи автоматической классификации (кластерного анализа), метод главных компонент, задача многомерного шкалирования. Другие для выяснения оптимальности привлекают соображения, не заложенные в структуре данных (так называемые внешние критерии). К таковым относится дискриминантный анализ и уже рассмотренный регрессионный анализ. Действительно, в последнем случае критерием является наибольшая коррелированность  $Y$  и  $aX + b$ , причем задание  $Y$  не находится в распоряжении экспериментатора, т.е. он является "внешним" по отношению к проводимым экспериментам.

## 2.5 Метод главных компонент

Выберем в качестве  $F$  (класса допустимых преобразований из предыдущего раздела) класс линейных комбинаций входящих в задачу показателей. Мы ставим задачу выбрать такие комбинации показателей, которые имеют наибольшую изменчивость при переходе от объекта к объекту. Часто это действительно возможно. Например, при снятии мерки с клиента портной снимает 11 показателей, тогда как при покупке готовой одежды мы довольствуемся двумя - тремя (размер, рост, полнота). При этом величиной, качественно характеризующей изменчивость, будет, как всегда, дисперсия. Договоримся также, что если одна или несколько нужных нам комбинаций уже найдены, то следующие мы будем искать так, чтобы они были некоррелированы с уже имеющимися.

Формально: пусть  $X$  –  $p$ -мерный вектор,  $\mu$  – вектор его средних,  $S = p \times p$  – ковариационная матрица, критерий оптимальности задан формулой

$$I_q = \frac{\sum_{j=1}^q \mathbf{D}z^{(j)}}{\sum_{i=1}^p \mathbf{D}x^{(i)}} \rightarrow \max,$$

где  $Z = L(X - \mu)$ ,  $L$  –  $q \times p$ -матрица с ортогональными строками (подбирается из условия оптимальности).

Итак, первая главная компонента – такая центрированно - нормированная комбинация координат  $X$ , которая обладает наибольшей дисперсией среди всех таких комбинаций, ...,  $k$ -я главная компонента – такая центрированно - нормированная комбинация, которая некоррелирована с  $k - 1$  предыдущими главными компонентами и среди всех таких комбинаций обладает наибольшей дисперсией. Значит, элементы матрицы  $L$  для первой главной компоненты подбираем из условий

$$\mathbf{D} \sum l_j^{(1)} x^{(j)} \rightarrow \max, \quad \text{или} \quad \sum_{i,j} S_{i,j} l_i^{(1)} l_j^{(1)} \rightarrow \max,$$

что в матричной записи имеет вид

$$\langle Sl^{(1)}, l^{(1)} \rangle \rightarrow \max_{l_1},$$

и аналогичных условий для остальных компонент. В силу определения скалярного произведения, максимум достигается тогда, когда  $Sl^{(1)}$  и  $l^{(1)}$  коллинеарны, т.е.  $l^{(1)}$  является собственным вектором матрицы  $S$ , отвечающим некоторому собственному числу  $\lambda$ , а значит

$$\langle Sl^{(1)}, l^{(1)} \rangle = \lambda \|l^{(1)}\|^2.$$

Если мы поймем, что найти направление можно, лишь указывая определяющий его вектор единичной длины, то можно положить  $\|l^{(1)}\| = 1$ . Теперь понятно, что первая главная компонента задается направлением того собственного вектора матрицы ковариаций, который отвечает наибольшему ее собственному числу. Аналогичным образом вторая главная компонента связана со вторым по величине собственным числом  $S$  и т.д. При этом дисперсия  $j$ -й главной компоненты равна собственному числу  $\lambda_j$ . Решение этой задачи возможно всегда, т.к.  $S$  – симметричная положительно определенная матрица. Если все параметры измерены в единицах одного масштаба, то при выборе одной главной компоненты

$$I_q = \frac{\lambda_1}{\lambda_1 + \dots + \lambda_p},$$

иначе параметры следует предварительно нормировать.

Геометрически метод главных компонент можно интерпретировать следующим образом. Представим наши объекты точками в  $p$ -мерном пространстве. Тогда первая главная компонента – направление в этом пространстве, проекции на которое всех точек-объектов наиболее разбросаны. Остальные компоненты имеют тот же смысл, но подбираются после исключения из наблюдаемых данных влияния всех предыдущих, что геометрически соответствует проецированию точек на гиперподпространство, ортогональное всем ранее построенным компонентам. Как уже отмечалось, критерий здесь является внутренним, т.е. использует лишь данные обрабатываемого эксперимента.

Рассмотрим числовой пример. По данным измерений в миллиметрах длины  $x_1$ , ширины  $x_2$  и высоты  $x_3$  панциря 24 особей одного из видов черепах определена выборочная ковариационная матрица

$$S = \begin{pmatrix} 451,39 & 271,17 & 168,70 \\ 271,17 & 171,73 & 103,29 \\ 168,70 & 103,29 & 66,65 \end{pmatrix}.$$

Для нахождения собственных чисел решаем кубическое характеристическое уравнение. Его корни:  $\lambda_1 = 680,40$ ,  $\lambda_2 = 6,50$   $\lambda_3 = 2,86$ . Соответствующие собственные векторы:

$$l_1 = \begin{pmatrix} 0,81 \\ 0,50 \\ 0,31 \end{pmatrix}, \quad l_2 = \begin{pmatrix} -0,55 \\ 0,83 \\ 0,10 \end{pmatrix}, \quad l_3 = \begin{pmatrix} -0,21 \\ -0,25 \\ 0,95 \end{pmatrix}.$$

Отсюда при  $i = 1,2,3$  получаем  $z^{(i)} = \langle l_i, X \rangle$ , где  $X$  – вектор отклонений  $x_j$  от соответствующих средних значений.

Вычислим величины вклада координат  $Z$  в изменчивость параметров. При этом

$$\frac{\lambda_1}{\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3} = 0,9864,$$

т.е. более 98 процентов информации о всех трех размерах содержится в первой главной компоненте – а значит, ее и нужно использовать для классификации. Как следует из найденного вида собственного вектора  $l_1$ , при заданных значениях  $x_1, x_2, x_3$  и средних  $\bar{X}_1, \bar{X}_2, \bar{X}_3$  каждого из показателей, значения первой главной компоненты вычисляются по формуле

$$z_1 = 0,81(x_1 - \bar{X}_1) + 0,50(x_2 - \bar{X}_2) + 0,31(x_3 - \bar{X}_3).$$

## 2.6 Построение правил классификации (кластерный и дискриминантный анализ)

Задача группировки, объединения близких данных в некоторые классы, рассматривалась выше на примере одномерных числовых данных. В случае же, когда с каждым из изучаемых объектов связано  $p > 1$  показателей она гораздо более сложна. Если мы просто хотим выделить некоторое количество групп "естественно близких" к друг другу объектов, то говорят, что мы имеем дело с задачей классификации без обучения или кластерным анализом (кластерами называют те самые группы, формирование которых является нашей целью). Итак, критерием информативности здесь является относительная близость объектов одного кластера между собой и относительная удаленность друг от друга объектов разных кластеров – внутренний (автоинформативный) критерий. Мы не будем здесь останавливаться на алгоритмах кластерного анализа – их можно найти в литературе, список которой приведен в конце пособия, а еще более правильным подходом является использование при необходимости имеющихся в достаточном количестве прикладных пакетов обработки статистических данных на компьютере.

Отличием в постановке задачи дискриминантного анализа является то, что имеющиеся классы, по отношению к которым нужно произвести классификацию, заранее заданы, причем заданы своими "типичными" представителями. Именно поэтому задачу дискриминантного анализа называют иногда задачей классификации с учителем. В роли учителя выступают наборы заданных типичных представителей – именно на основании их заданных параметров мы и обучаем строящееся правило классификации. Целью является построение так называемого прогностического правила, которое для некоторого нового объекта укажет, к какому из имеющихся классов он должен быть отнесен. Правило называют прогностическим, поскольку указание класса есть в некотором смысле лишь прогноз развития событий, а правильно ли была произведена классификация, мы узнаем лишь позднее.

Наиболее понятным примером здесь, заодно проясняющим терминологию, служит задача установления медицинских диагнозов – внешний критерий.

Конечно же, имеется большое количество алгоритмов решения поставленной задачи. Упомянем здесь метод ближайших соседей для случая двух заранее определенных своими представителями классов. Для наглядности представим, как обычно, наших типичных представителей и новый объект точками в  $p$ -мерном пространстве. Зафиксируем заранее нечетное число  $k$  и определим  $k$  ближайших соседей новой точки среди типичных представителей. Точку относим в тот класс, к которому относятся большинство из  $k$  ближайших соседей.

Опишем также и более формальный метод, использующий линейное прогностическое правило. Предположим, что  $a_1, a_2$  – векторы средних значений каждого из  $p$  показателей, рассчитанные для первого и второго класса объектов соответственно,  $V$  – оценка ковариационной матрицы вектора показателей. Если задано так называемое пороговое значение  $C$ , то решение об отнесении некоторого нового объекта с набором показателей  $X$  принимается путем сравнения величины

$$h(X) = V^{-1}(a_1 - a_2)(X - \frac{a_1 + a_2}{2})$$

с пороговым значением. Обычно  $C$  выбирают так. Вычислим значение  $h(X)$  на всех элементах обучающей выборки, принадлежащих первому и второму классу. Пороговое значение должно разделять два этих набора значений. После этого наш объект относят к первому классу, если  $h(X) > C$ , иначе ко второму.

С точки зрения теории должно подходить  $C = 0$ , но на практике это не всегда так. Если распределения показателей в обоих классах нормальны и ковариационные матрицы этих распределений различаются незначительно, то описанное здесь правило является наилучшим с точки зрения минимизации ошибок классификации. Если же не так, то это – наилучшее правило среди линейных прогностических правил.

## 2.7 Факторный анализ

Рассмотрим задачу объяснения изменчивости показателей  $x^{(1)}, \dots, x^{(p)}$  через непосредственно не наблюдаемые (латентные) факторы  $f^{(1)}, \dots, f^{(q)}$ . Условимся также считать, что факторы  $f$  между собой некоррелированы. Целью нашего исследования будет выявление и интерпретация латентных факторов. При этом возникает также желание минимизировать число этих факторов и степень зависимости исходных показателей от той части их изменчивости, которая не объясняется через  $f^{(i)}$  – и два этих желания противоречивы. Можно интерпретировать изменчивость латентных факторов как причину, а изменчивость наблюдаемых показателей как следствие.

Перейдем к математической модели. Подбираемые факторы будут объяснять лишь изменчивость наблюдаемых показателей, а не их абсолютные

значения. в силу чего будем считать  $x^{(j)}$  центрированными, то есть обладающими нулевыми средними. Если они такими не были, то этого легко добиться, вычитая средние из значений каждого. Предположим теперь, что влияние факторов линейно, т.е.

$$X = QF + U,$$

где  $Q$  —  $p \times q$ -матрица неизвестных коэффициентов при неизвестных факторах  $F$ , называемая матрицей нагрузок латентных факторов на показатели  $X$ ,  $U$  — вектор остаточных компонент, не объясняемый через вводимые факторы. Предполагается, что распределение  $U$  имеет нормальный характер, его компоненты независимы и не зависят от  $F$ . Через  $V$  обозначим ковариационную матрицу  $U$ . Принципиальное отличие от задач регрессии и дисперсионного анализа здесь состоит в том, что все, кроме  $X$  в выписанной формуле неизвестно.

Для того, чтобы понять связь поставленной задачи с методом главных компонент, предположим, что нашлись (возможно, в неограниченном числе) такие факторы, что

$$X = AF, \quad \mathbf{D}f^{(i)} = 1, \quad i = 1, 2, \dots$$

Отметим, что матрица  $A$  и вектор  $F$  в данной записи определены неоднозначно, достаточно взять  $Z = CF$ , тогда  $X = (AC)Z$ . Матрица  $C$  может быть любой, но необходимость сохранения некоррелированности новых факторов, накладывает на нее условие ортогональности. Итак, после нахождение каких-то  $A, F$  возможно *вращение*. Теперь через  $F(m)$  обозначим "урезанный" вектор (оставляем только первые  $m$  координат), а через  $A_m$  соответствующим образом "урезанную" матрицу и вместо  $X$  рассмотрим

$$\hat{X}(m) = A_m F(m).$$

Если теперь мы объявим критерием оптимальности минимальное отличие ковариационных матриц исходных показателей  $X$  и "урезанных" показателей  $\hat{X}(m)$ , то получим, что

$$f^{(i)} = \frac{1}{\sqrt{\lambda_i}} \tilde{f}^{(i)},$$

где  $\tilde{f}^{(i)}$  —  $i$ -я главная компонента, а  $i$ -й столбец матрицы  $A$  имеет вид  $\sqrt{\lambda_i} l_i$ ,  $l_i$  — собственный вектор ковариационной матрицы  $S$  исходных показателей, отвечающий собственному числу  $\lambda_i$ . Таким образом, в этом случае мы приходим к методу главных компонент. Если же взять за критерий оптимальности максимальное объяснение корреляции между исходными показателями с помощью латентных факторов, например, оценив адекватность такого объяснения через близость ковариаций между  $x^{(i)}, x^{(j)}$  и  $\hat{x}^{(i)}, \hat{x}^{(j)}$  соответственно, придем к задаче факторного анализа.

В исходной модели оказывается слишком много параметров для их точного определения. Поэтому обычно накладываются некоторые дополнительные ограничения.

ные условия. Например, можно искать матрицу нагрузок в виде

$$Q = \begin{pmatrix} q_{1,1} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ q_{2,1} & q_{2,2} & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ q_{q,1} & q_{q,2} & q_{q,3} & \dots & q_{q,q} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ q_{p,1} & q_{p,2} & q_{p,3} & \dots & q_{p,q} \end{pmatrix},$$

т.е. первый показатель мы объясняем только через первый фактор, второй показатель – через первый и второй и т.д. Возможны, конечно, и другие варианты условий, иногда объясняющиеся внутренней логикой решаемой задачи.

Существует несколько разработанных методов для оценивания матрицы нагрузок  $Q$  и матрицы ковариаций  $V$  остаточной компоненты. Мы остановимся только на центроидном методе, подробное описание которого также не входит в наши задачи. Опишем только геометрическую интерпретацию этого метода. Аккуратный же подсчет этим или другим методом в каждой конкретной задаче оставим на долю вычислительной техники (соответствующее программное обеспечение имеется в любом пакете прикладных статистических программ).

Отождествим  $x^{(1)}, \dots, x^{(p)}$  с векторами, выходящими из начала координат так, чтобы косинусы углов между  $i$ -м и  $j$ -м были бы равны коэффициентам корреляции  $\rho_{i,j}$ , а длины этих векторов –  $\mathbf{D}x^{(i)}$ . Изменим направления некоторых из этих векторов на противоположные так, чтобы как можно большее число ковариаций стали бы положительными (образуем тестовый "пучок"). Обозначим через  $f^{(1)}$  центральный вектор "пучка", имеющий единичную длину. Перейдем теперь к остаточным показателям, вычитая из каждого из векторов проекцию  $f^{(1)}$  на его направление:

$$x^{(i1)} = x^{(i)} - \hat{q}_{i,1}f^{(1)}.$$

Далее процесс повторяется с остаточными показателями до тех пор, пока не будет выделено нужное число показателей и определены оценки нагрузок  $\hat{Q}$ . Для оценивания  $V$  применяем соотношение

$$\hat{V} = S - \hat{Q}\hat{Q}^t.$$

Одной из главных задач факторного анализа является задача оценивания значений латентных факторов для каждого изучаемого объекта. Чтобы понять значимость этой задачи, отметим, что например при изучении результатов некоторого интеллектуального тестирования в роли латентных факторов обычно выступают способности тестируемой личности, а численная оценка таких способностей в той или иной шкале весьма привлекательна.

Предположим, что  $Q, V$  мы уже оценили. Метод Бартлетта интерпрети-

рует  $F$ , как коэффициенты регрессии  $q$  на  $x$ :

$$x_k^{(i)} = \sum_{j=1}^q q_{i,j} f_k^{(j)} + u_k^{(i)}, \quad i = 1, \dots, p, \quad k = 1, \dots, n.$$

Их находим далее, применяя, как обычно, метод наименьших квадратов:

$$\hat{F}_k = (\hat{Q}^t \hat{V}^{-1} \hat{Q})^{-1} \hat{Q}^t X_k, \quad k = 1, \dots, n.$$

Другой метод, метод Томсона, "выворачивает" описанный выше процесс наизнанку. Найдем коэффициенты  $c_{i,j}$ , участвующие в соотношении  $\hat{F} = CX$  по методу наименьших квадратов, т.е. решим задачу на минимум:

$$\sum_{k=1}^n \sum_{i=1}^q M(f_k^{(i)} - \sum_{j=1}^p c_{i,j} x_j^{(k)})^2 \rightarrow \min_C.$$

При этом, хотя сами  $f_k^{(i)}$  неизвестны, нам достаточно знать их дисперсии и ковариации, которые легко извлекаются из соотношения

$$M \left( \begin{pmatrix} X \\ F \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ F \end{pmatrix}^t \right) = \begin{pmatrix} QQ^t + V & Q \\ Q^t & I \end{pmatrix}.$$

Получаем

$$\hat{F}_k = (I + \hat{Q}^t \hat{V}^{-1} \hat{Q})^{-1} \hat{Q} \hat{V}^{-1} X_k, \quad k = 1, \dots, n.$$

Рассмотрим числовой пример. После изучения оценок 220 английских школьников получена следующая корреляционная матрица оценок по гэльскому языку, английскому языку, истории, арифметике, алгебре и геометрии:

|       | $x_1$ | $x_2$ | $x_3$ | $x_4$ | $x_5$ | $x_6$ | $q_{i,1}$ | $q_{i,2}$ |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-----------|-----------|
| $x_1$ | 1     | 0,439 | 0,410 | 0,288 | 0,329 | 0,248 | 0,606     | 0,337     |
| $x_2$ | 0,439 | 1     | 0,351 | 0,354 | 0,320 | 0,329 | 0,611     | 0,197     |
| $x_3$ | 0,410 | 0,351 | 1     | 0,164 | 0,190 | 0,181 | 0,458     | 0,384     |
| $x_4$ | 0,288 | 0,354 | 0,164 | 1     | 0,595 | 0,570 | 0,683     | -0,365    |
| $x_5$ | 0,329 | 0,320 | 0,190 | 0,595 | 1     | 0,464 | 0,686     | -0,335    |
| $x_6$ | 0,248 | 0,329 | 0,181 | 0,570 | 0,464 | 1     | 0,575     | -0,212    |

Матрица была подвергнута бифакторному анализу. В последних двух столбцах таблицы приведены нагрузки, полученные центроидным методом. Следующая задача – подсчитать значения двух латентных факторов для каждого из 220 учеников, после чего данные можно представить геометрически в виде облака из 220 точек плоскости. Метод Томсона дает

$$f_1 = 0,245x_1 + 0,208x_2 + 0,158x_3 + 0,278x_4 + 0,271x_5 + 0,157x_6,$$

$$f_2 = 0,352x_1 + 0,201x_2 + 0,309x_3 - 0,351x_4 - 0,303x_5 - 0,126x_6.$$

Простой анализ таблицы и полученных формул дает возможность интерпретировать  $f_1$  как общую одаренность, а  $f_2$  как гуманитарную одаренность школьника.

## 2.8 Многомерное шкалирование

Алгоритмы многомерного шкалирования ориентированы на решение актуальных сегодня задач наглядного представления данных опросов или измерений. В качестве исходного материала мы рассматриваем набор  $n$  объектов и квадратную матрицу  $\delta$  порядка  $n$ , в которой на  $(i, j)$ -м месте расположено число, характеризующее степень похожести (и в этом случае мы называем ее матрицей сходств) или степень различия (матрица различий)  $i$ -го и  $j$ -го объектов. Эта матрица получена путем опроса одного или нескольких людей, которых здесь мы вновь будем называть экспертами. Если мнения каждого из экспертов заносились в отдельную матрицу, то задача называется шкалированием индивидуальных различий (ШИР).

После ликвидации неизбежных при опросах несообразностей (например, различие между первым и вторым объектами необходимо уравнять с различием между вторым и первым объектами), мы можем приступать к решению самой задачи. Она может быть сформулирована так. *Изобразить объекты точками в пространстве небольшого числа измерений так, чтобы расстояния между ними соответствовали бы их различиям.* Из постановки задачи видно, что сначала от матрицы сходств нужно перейти к матрице различий, а затем различия интерпретировать как расстояния. Для этого, кроме ликвидации несимметричности в матрице различий, необходимо добиться, чтобы элементы этой матрицы удовлетворяли неравенствам треугольника, то есть для любого набора чисел  $i, j, k$

$$\delta_{i,j} \leq \delta_{i,k} + \delta_{k,j}.$$

Это делается путем добавления ко всем элементам матрицы различий, кроме диагональных, некоторого специальным образом подобранным числа  $c$ . Подробнее такой процесс описан в примере ниже.

Затем матрица различий с помощью специального алгоритма двойного центрирования переводится в матрицу скалярных произведений. Сформулируем основную задачу немного более точно.

У нас имеется одна или несколько матриц  $\Delta^l$  с элементами  $\delta_{i,j}^l$ , представляющие собой оценки расстояний между  $i$ -м и  $j$ -м объектами с точки зрения  $l$ -го эксперта (возможно, просто ранги соответствующих расстояний). Задача состоит в построении геометрической комбинации точек, изображающих наши объекты в  $q$ -мерном пространстве ( $q=1, 2$  или  $3$ ) так, чтобы ранговый порядок расстояний между ними совпадал с определенным в  $\Delta^l$  (если матрица была одна), или наилучшим образом согласовывался со всеми имевшимися матрицами. В последнем случае говорят о шкалировании индивидуальных различий. Эту задачу здесь мы более не будем упоминать.

Обычно для решения задач многомерного шкалирования используют алгоритм Торгерсона, одну из модификаций которого рассмотрим ниже. Из матрицы скалярных произведений выделим  $q$  нормированных главных компонент (см. соответствующий раздел). Пусть  $\hat{x}_{i,k}^0$ ,  $i = 1, \dots, n$ ,  $k = 1, \dots, q$  - координаты объектов в главных компонентах. Будем говорить, что они образуют стартовую (первую) конфигурацию алгоритма, поскольку именно с

нее мы начинаем работу. Первоначальные оценки расстояний вычисляем по формуле

$$\hat{d}_{i,j}^1 = \sqrt{\sum_k (\hat{x}_{i,k}^0 - \hat{x}_{j,k}^1)^2}.$$

Будем эти оценки для краткости называть отклонениями. Характеристикой качества каждой из рассматриваемых здесь и ниже комбинаций служит так называемый стресс-критерий

$$S = \sqrt{\frac{\sum_{i,j} (\hat{d}_{i,j}^c - \hat{d}_{i,j}^{c-1})^2}{\sum_{i,j} (\hat{d}_{i,j}^{c-1})^2}}.$$

Здесь  $\hat{d}_{i,j}^0 = \delta_{i,j}$ , а  $c$  – номер итерации, который на старте алгоритма равен единице. Окончательную конфигурацию, то есть такую, дальнейшее улучшение которой представляется нецелесообразной ввиду малой величины стресса, назовем финальной.

Рассмотрим итерационный процесс, начинающийся со стартовой конфигурации. Сначала расположим все пары  $(i, j)$ ,  $i, j = 1, \dots, n$  по возрастанию различий  $\delta_{i,j}$ , параллельно с ними разместив отклонения  $\hat{d}_{i,j}$  в следующем столбце. Равные отклонения объединяем в блоки (на первом шаге чаще всего каждый из блоков содержит ровно один объект). Первая часть этапа состоит в многократных проходах по столбцу отклонений. Если отклонения в следующем блоке меньше, чем в предыдущем, то объединяем их в один новый блок, заменяя в нем все отклонения на среднее арифметические отклонений по объединяемым блокам. Иначе не меняем ничего. Признаком окончания этой части этапа служит отсутствие изменений при очередном проходе.

Вторая часть этапа состоит в пересчете координат и отклонений по формулам

$$\begin{aligned}\hat{x}_{i,j}^{c+1} &= \hat{x}_{i,j}^c + \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \left(1 - \frac{d_{i,k}}{\hat{d}_{i,k}^c}\right) (\hat{x}_{k,j}^c - \hat{x}_{i,j}^c) \\ \hat{d}_{i,j}^{c+1} &= \sqrt{\sum_k (\hat{x}_{i,k}^{c+1} - \hat{x}_{j,k}^{c+1})^2},\end{aligned}$$

Здесь  $d_{i,j}$  – отклонения, полученные в процессе выполнения первой части этапа,  $c$  – номер этапа.

Для отклонений в новой конфигурации вычислим величину стресса  $S$ . Если она несущественна (меньше выбранного заранее малого числа) – финальная конфигурация построена, иначе повторяем описанный выше этап, приняв за исходную построенную конфигурацию  $\delta_{i,j}^{c+1}$ .

Рассмотрим в заключение числовой пример. Одному Эксперту было предложено оценить в баллах различия между чупачупсом, шоколадной конфетой, карамелью с фруктовой начинкой, ириской и пирожным Чокопай в баллах от 0 (максимально похожи) до 12 (совершенно различны). Сравниваемые пары были выписаны на карточках, причем каждая пара

встречалась дважды с большим интервалом (например карамель – ириска и через 5 пар ириска – карамель). Возвращаться назад и использовать ранее данные оценки не допускалось. Результаты собраны в таблице.

Результаты оценки различий  
кондитерских изделий (сырые данные)

|          | Чупачупс | Шокол | Карамель | Ириска | Чокопай |
|----------|----------|-------|----------|--------|---------|
| Чупачупс | 0        | 12    | 4        | 12     | 11      |
| Шокол    | 12       | 0     | 8        | 8      | 3       |
| Карамель | 10       | 6     | 0        | 9      | 11      |
| Ириска   | 12       | 8     | 9        | 0      | 12      |
| Чокопай  | 12       | 4     | 11       | 6      | 0       |

Эти данные были подвергнуты симметризации, то есть если различие между объектами А и Б оказалось не равным различию между Б и А, то заменяют оба эти различия на их среднее арифметическое.

Результаты оценки различий  
кондитерских изделий (симметричный вариант)

|          | Чупачупс | Шокол | Карамель | Ириска | Чокопай |
|----------|----------|-------|----------|--------|---------|
| Чупачупс | 0        | 12    | 7        | 12     | 11,5    |
| Шокол    | 12       | 0     | 7        | 8      | 3,5     |
| Карамель | 7        | 7     | 0        | 9      | 11      |
| Ириска   | 12       | 8     | 9        | 0      | 9       |
| Чокопай  | 11,5     | 3,5   | 11       | 9      | 0       |

Теперь ищем константу  $c$  для превращения наших различий в расстояния

$$c = \max_{k,i,j} (\delta_{k,j} - \delta_{k,i} - \delta_{i,j}).$$

Добавляя ее ко всем элементам построенной симметричной матрицы  $\delta$  (кроме диагональных), мы получим матрицу расстояний  $D$ , элементы которой уже удовлетворяют неравенству треугольника. В нашем случае выписанный максимум достигается при  $k = 3, j = 5, i = 2$ , и

$$c = 11 - 7 - 3,5 = 0,5.$$

Матрица расстояний  $D$   
(ее элементы удовлетворяют неравенствам треугольника)

|          | Чупачупс | Шокол | Карамель | Ириска | Чокопай |
|----------|----------|-------|----------|--------|---------|
| Чупачупс | 0        | 12,5  | 7,5      | 12,5   | 12      |
| Шокол    | 12,5     | 0     | 7,5      | 8,5    | 4       |
| Карамель | 7,5      | 7,5   | 0        | 9,5    | 11,5    |
| Ириска   | 12,5     | 8,5   | 9,5      | 0      | 9,5     |
| Чокопай  | 12       | 4     | 11,5     | 9,5    | 0       |

Теперь, согласно алгоритму Торгерсона, для создания стартовой конфигурации построим из матрицы расстояний матрицу скалярных произведений

по следующему правилу. Возведем все элементы матрицы расстояний  $D$  в квадрат, вычислим средние значения этих квадратов по каждой строке ( $s_i$ ), каждому столбцу ( $t_j$ ) и по всей матрице (U). После этого элементы матрицы скалярных произведений строятся по формуле

$$P_{i,j} = -(D_{i,j} - s_i - t_j + U)/2.$$

Результаты вычислений собраны в таблицах.

Квадраты расстояний и их средние

|       | 1      | 2      | 3      | 4      | 5      | $s_i$  |
|-------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| 1     | 0      | 156,25 | 56,25  | 156,25 | 144    | 102,55 |
| 2     | 156,25 | 0      | 56,25  | 72,25  | 16     | 60,15  |
| 3     | 56,25  | 56,25  | 0      | 90,25  | 132,25 | 67     |
| 4     | 156,25 | 72,25  | 90,25  | 0      | 90,25  | 81,8   |
| 5     | 144    | 16     | 132,25 | 90,25  | 0      | 76,5   |
| $t_j$ | 102,55 | 60,15  | 67     | 81,8   | 76,5   | 71,6   |

| Скалярные произведения (матрица $P$ ) |         |         |        |         |  |
|---------------------------------------|---------|---------|--------|---------|--|
| 63,75                                 | -35,575 | 17,85   | -24,75 | -21,275 |  |
| -35,575                               | 21,35   | -3,35   | -3,95  | 21,525  |  |
| 17,85                                 | -3,35   | 28,2    | -9,525 | -33,175 |  |
| -24,75                                | -3,95   | -9,525  | 43     | -4,775  |  |
| -21,275                               | 21,525  | -33,175 | -4,775 | 37,7    |  |

Вычислим сумму квадратов элементов матрицы  $P$ , находящихся на главной диагонали и выше ее, после чего разделим все ее элементы на квадратный корень из полученного числа. Найдем два единичных собственных вектора полученной нормированной матрицы, отвечающие двум ее наибольшим собственным числам (это называется извлечением двух главных компонент из нормированной матрицы  $P$ ). Получим следующие результаты.

| Стартовая конфигурация,<br>координаты в двух главных компонентах $x_{i,j}^c$ |        |        |
|--|--------|--------|
| Чупачупс   | -0,695 | -0,419 |
| Шокол  | 0,372  | -0,225 |
| Карамель   | -0,356 | 0,347  |
| Ириска   | 0,240  | 1,076  |
| Чокопай  | 0,439  | -0,780 |

Таким образом, мы получили стартовую комбинацию алгоритма Торгерсона, в которой каждое из наших изделий задано точкой на плоскости. Вычислим попарные расстояния между этими точками, а затем разделим каждое из них на корень квадратный из суммы квадратов всех элементов получившейся матрицы. То, что получено, мы называем различиями (матрица  $\delta$ ). В таблице заполнены лишь половина клеток, поскольку она симметрична.

Нормированные различия (стартовая конфигурация)

|          | Чупачупс | Шокол | Карамель | Ириска | Чокопай |
|----------|----------|-------|----------|--------|---------|
| Чупачупс | 0        | 0,275 | 0,212    | 0,447  | 0,302   |
| Шокол    |          | 0     | 0,235    | 0,332  | 0,142   |
| Карамель |          |       | 0        | 0,239  | 0,350   |
| Ириска   |          |       |          | 0      | 0,473   |
| Чокопай  |          |       |          |        | 0       |

Полученную матрицу сравним с нормированной матрицей истинных расстояний, то есть аналогичным образом нормируем элементы матрицы  $D$  (поделим на корень из суммы квадратов ее различных элементов).

Нормированные расстояния (истинные значения)

|          | Чупачупс | Шокол | Карамель | Ириска | Чокопай |
|----------|----------|-------|----------|--------|---------|
| Чупачупс | 0        | 0,401 | 0,241    | 0,401  | 0,385   |
| Шокол    |          | 0     | 0,241    | 0,273  | 0,128   |
| Карамель |          |       | 0        | 0,305  | 0,369   |
| Ириска   |          |       |          | 0      | 0,305   |
| Чокопай  |          |       |          |        | 0       |

В результате сравнения этих матриц получим значение стресс-критерия, равное 0,250. Отметим, что после произведенной нормировки значение стресса вычисляются по простой формуле

$$S = \sum_{i,j} (d_{i,j} - \delta_{i,j})^2.$$

Результаты упорядочивания пар и слияния блоков приводятся ниже

Неметрический этап алгоритма

| пары          | различия | расстояния | слияние 1 | слиян.2 | слиян.3 |
|---------------|----------|------------|-----------|---------|---------|
| шок чокопай   | 0,142    | 0,128      | 0,128     | 0,128   | 0,128   |
| чупс карам    | 0,212    | 0,241      | 0,241     | 0,241   | 0,241   |
| карам ирис    | 0,239    | 0,305      | 0,273     | 0,273   | 0,273   |
| шок карам     | 0,235    | 0,241      | 0,273     | 0,273   | 0,273   |
| чупс шок      | 0,275    | 0,401      | 0,393     | 0,357   | 0,355   |
| чупс чокопай  | 0,302    | 0,385      | 0,393     | 0,357   | 0,355   |
| шок ирис      | 0,332    | 0,273      | 0,321     | 0,357   | 0,355   |
| карам чокопай | 0,350    | 0,369      | 0,321     | 0,357   | 0,355   |
| чупс ирис     | 0,447    | 0,401      | 0,353     | 0,353   | 0,355   |
| ирис чокопай  | 0,473    | 0,305      | 0,353     | 0,353   | 0,355   |

Полученные после третьего слияния значения отклонений соберем в матрицу  $Q$ , после чего рассчитаем поправочные коэффициенты

$$\Delta_{i,j} = 1 - \frac{\delta_{i,j}}{Q_{i,j}}.$$

Их значения получились равными (если знаменатель дроби в последней формуле равен 0, то соответствующий коэффициент полагаем единицей)

Поправочные коэффициенты  $\Delta$  (первая итерация)

|          | Чупачупс | Шокол | Карамель | Ириска | Чокопай |
|----------|----------|-------|----------|--------|---------|
| Чупачупс | 1        | 0,115 | 0        | 0,115  | 0,078   |
| Шокол    |          | 1     | -0,133   | -0,301 | 0       |
| Карамель |          |       | 1        | 0,105  | 0,038   |
| Ириска   |          |       |          | 1      | -0,164  |
| Чокопай  |          |       |          |        | 1       |

Пересчитаем новые координаты по формуле

$$\hat{x}_{i,j}^{c+1} = \hat{x}_{i,j}^c + \frac{1}{n} \sum_k \Delta_{i,k} (\hat{x}_{k,j}^c - \hat{x}_{i,j}^c),$$

получим

Координаты после первой итерации  $x_{i,j}^{c+1}$

|          |        |        |
|----------|--------|--------|
| Чупачупс | -0,627 | -0,396 |
| Шокол    | 0,367  | -0,304 |
| Карамель | -0,351 | 0,402  |
| Ириска   | 0,198  | 1,160  |
| Чокопай  | 0,413  | -0,862 |

После пересчета нормированных расстояний получим величину стресса 0,307. Это достаточно большая величина, поэтому переходим к следующей итерации. Увеличение стресса можно объяснить тем, что алгоритм только что начал свою работу и, как мы увидим, дальше его величина будет очень быстро уменьшаться. При этом матрица  $Q$  осталась прежней, но матрица поправочных коэффициентов должна быть пересчитана, поскольку изменились различия – объекты получили новые координаты.

Поправочные коэффициенты  $\Delta$  (вторая итерация)

|          | Чупачупс | Шокол  | Карамель | Ириска | Чокопай |
|----------|----------|--------|----------|--------|---------|
| Чупачупс | 1        | -0,469 | -0,121   | 0,167  | -0,288  |
| Шокол    |          | 1      | -0,086   | 0,004  | 0,218   |
| Карамель |          |        | 1        | -0,170 | 0,006   |
| Ириска   |          |        |          | 1      | 0,278   |
| Чокопай  |          |        |          |        | 1       |

Новые координаты (рассчитываем по той же формуле)

Координаты после второй итерации

|          |        |        |
|----------|--------|--------|
| Чупачупс | -0,495 | -0,447 |
| Шокол    | 0,260  | -0,277 |
| Карамель | -0,327 | 0,398  |
| Ириска   | 0,195  | 1,300  |
| Чокопай  | 0,368  | -0,750 |

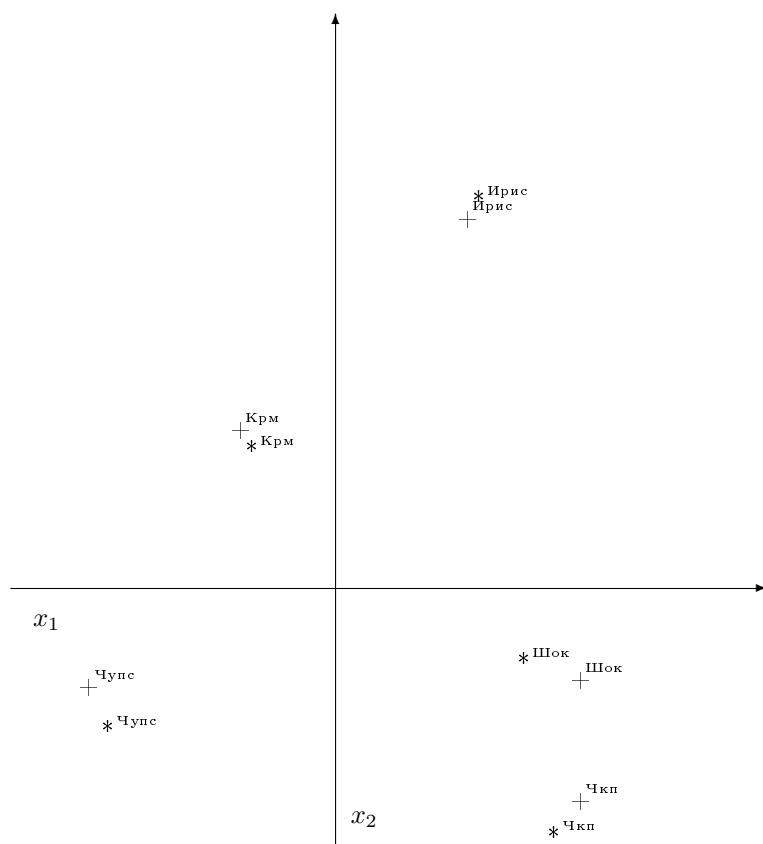
Значение стресса равно 0,192. Продолжаем расчет тем же способом. После третьей итерации стресс становится равным 0,164, затем 0,061 а после пятой 0,029. Это уже меньше обычного уровня ошибки в 0,05 и такой результат можно считать удовлетворительным. Окончательно

Координаты после пятой итерации (финальная конфигурация)

|          |        |        |
|----------|--------|--------|
| Чупачупс | -0,781 | -0,289 |
| Шокол    | 0,490  | -0,254 |
| Карамель | -0,404 | 0,393  |
| Ириска   | 0,192  | 0,948  |
| Чокопай  | 0,502  | -0,575 |

Изобразим результаты на диаграмме.

Стартовая конфигурация (\*) и финальная конфигурация (+)



# Литература

- [1] О.Ю.Ермолаев Математическая статистика для психологов. - М.: Московский психолого-социальный институт: Флинта, 2003.- 336 с.
- [2] Е.Ю.Артемьева, Е.М.Мартынов. Вероятностные методы в психологии.- М.:МГУ, 1975. - 206 с.
- [3] С.А.Айвазян, В.М.Бухштабер, И.С.Енуков, Л.Д.Мешалкин Прикладная статистика: Классификация и снижение размерности. - М.:Финансы и статистика, 1989. - 607 с.
- [4] Л.Н.Болшев, Н.В.Смирнов - Таблицы математической статистики - М.:Наука, 1983. - 416 с.
- [5] Л.Ф.Бурлачук, С.М.Морозов Словарь-справочник по психологической диагностике.- Киев: Наукова думка, 1989. - 200 с.
- [6] М.Дейвисон - Многомерное шкалирование: методы наглядного представления данных. - М.:Финансы и статистика, 1988.- 254 с.
- [7] В.С.Дронов Основы математики (избранные главы). - Барнаул: Изд-во АГУ, 1998 - 95 с.
- [8] П.Мюллер, П.Нойман, Р.Штурм - Таблицы по математической статистике. - М.:Финансы и статистика, 1987. - 278 с.