НАУЧНОЕ ПРИБОРОСТРОЕНИЕ, 1996, том 6, № 1-2, с.54-58

ОРИГИНАЛЬНЫЕ СТАТЬИ

УДК 519.233.5

КОМПЛЕКСНЫЙ КРИТЕРИЙ ЛИНЕЙНОСТИ ЗАВИСИМОСТИ Y=F(X) В ЗАДАЧАХ ПРИБОРОСТРОЕНИЯ

© 1996, А.Л. Булянница

Институт Аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург

Поступила в редакцию 22.03.96

Работа посвящена разработке и выбору критерия линейности функциональной зависимости Y=F(x). Новые критерии линейности, выраженные в виде "функционала качества", позволяют учитывать некоторую информацию, представляемую коэффициентом корреляции r и критерием Фишера F.

Введение

Одним из важнейших требований к прибору, наряду с высокой чувствительностью определения, низким пределом обнаружения, быстрым откликом, стабильностью и воспроизводимостью сигнала является линейная калибровочная характеристика (в работе [1] ее называют линейным динамическим диапазоном).

Оценке линейности зависимости Y=F(X) посвящено множество работ, в том числе [2—7]. Основным признанным способом оценивания линейности является регрессионный (с использованием статистического критерия Фишера — F-критерия). F-критерий позволяет оценить доверительную вероятность гипотезы о форме функциональной связи между величинами Y и X. В частности, эта связь может быть линейной. Однако, следует учесть, что высокая доверительная вероятность гипотезы о линейности зависимости Y = F(X) и сильная линейная связь Y и X — понятия не эквивалентные.

В качестве характеристики силы связи случайных величин Y и X можно использовать выборочный коэффициент корреляции r. В [5, 6] указано, что r может характеризовать близость зависимости Y = F(X) к линейной. Однако, отклонение r от (±1) может быть вызвано как нелинейностью связи Y и X, так и большой неопределенностью (разбросом Y, соответствующих одинаковым X). Очевидно, что, тем самым, r фиксирует суммарное влияние как случайности, так и нелинейности связи, что делает невозможным однозначную интерпретацию результата и восстановления по r степени нелинейности связи Y и X. С точки зрения [5], указанное свойство не препятствует использованию r совместно с F-критерием для оценки линейности Y = F(X). В [7] высказывается противоположная точка зрения о невозможности использования r даже в качестве грубого теста на линейность. Тем не менее, так как и r, и F по-своему характеризуют степень нелинейности связи Y и X, необходимо использовать всю информацию о характере зависимости Y и X, предоставленную обеими указанными величинами.

Отсутствие общепризнанной методики оценки линейности, выражающееся, в первую очередь, в полярных точках зрения на возможность применения корреляционного критерия r [5, 7] требует дополнительного изучения r и F-критериев применительно к линейной зависимости Y = F(X) с наиболее распространенными нелинейными искажениями.

Таким образом, целью работы является исследование корреляционного r и регрессионного (F) критериев линейности применительно к наиболее распространенным видам нелинейной зависимости Y = F(X) и формирование комплексного критерия линейности.

Постановка задачи

В качестве исследуемой на линейность функции Y = F(x) используются три наиболее распространенных нелинейных зависимости:

— квадратичная ($Y = X + a \cdot X^2$);

— гармоническая ($Y = X + k \cdot \sin(2\pi X)$);

— дуга угловой величины φ_0.

* Работа выполнялась при частичной поддержке по гранту по исследованиям в области "Фундаментальные проблемы охраны окружающей среды и экологии человека". Госком РФ по высшему образованию 1996-1997 г.

Случайная величина X задается как $X_i = i/N$, где N — общее число точек измерения. Каждому X из интервала [0,1] соответствует ровно M значений Y_{ij} (i=1,N; j=1,M), характеризующихся средним значением $\overline{Y_i}$ и дисперсией σ_i^2.

Исследование критериев линейности предполагает получение выражений для r и F в зависимости от параметров нелинейности зависимости Y = F(X) (a, k, φ_0) и от характеристик случайности (N, M, σ_i^2).

Исследование корреляционного критерия линейности

Оценка значения выборочного коэффициента корреляции r для трех описанных ранее видов нелинейной зависимости Y = F(X) производится с использованием [8]. Обозначив среднюю дисперсию измерений за σ^2, можно получить значение r для квадратичной функции:

$$r_1 = \frac{1 + a(N+1)/N}{\sqrt{\frac{12(M-1)N^2}{M(N^2-1)}\sigma^2 + 1 + 2a\frac{N+1}{N} + a^2\frac{(2N+1)(8N+11)}{15N^2}}}, \quad (1)$$

Оценка r для гармонической функции имеет схожий вид:

$$r_2 = \frac{1 - 6k\,\mathrm{ctg}(\pi/(N-1))/(N+1)}{\sqrt{\frac{12(M-1)N^2}{M(N^2-1)}\sigma^2 + 1 - \frac{12}{N+1}k\cdot \mathrm{ctg}\frac{\pi}{N-1} + 6\frac{N}{N+1}k^2}}, \quad (2)$$

Для третьего вида функции Y = F(X), значения X_i и $\overline{Y_i}$ принимают значения $X_i = \cos[\varphi_0(i-1)/(N-1)]$, $\overline{Y_i} = \sin[\varphi_0(i-1)/(N-1)]$. В этом случае выражение для r принимает достаточно сложную форму:

$$r_3 = \frac{\mu \sin(\varphi_0(N+1)/N)}{\sqrt{\left(N^2-\varepsilon^2\right)^2 - \mu^2\cos^2\left(\varphi_0\frac{N+1}{N}\right) + \frac{2(M-1)}{M}\left[\left(N^2-\varepsilon^2\right) + \mu\cos\left(\varphi_0\frac{N+1}{N}\right)\right]}} \quad (3)$$

где: $\varepsilon = \sin(\varphi_0/2)/\sin(\varphi_0/2N)$,

$\mu = \varepsilon\,[N\cos(\varphi_0/2)/\cos(\varphi_0/2N) - \varepsilon]$.

На основе анализа формул (1) — (3) можно сделать следующие выводы:

1) во всех случаях, по мере роста σ^2 коэффициент корреляции r уменьшается по модулю;максимум r по σ реализуется при тривиальном условии $\sigma = 0$;

2) зависимость r от a (или k), т.е. от величин, характеризующих интенсивность нелинейного слагаемого, несимметрична;

3) при σ^2 отличном от нуля, максимум r по a (или k) реализуется не при условии отсутствия нелинейного слагаемого (a = 0 или k = 0), а при нетривиальных значениях a (k), зависящих от σ^2;

4) значение r = ±1 реализуется только при отсутствии нелинейных слагаемых (a = 0, k = 0) и при нулевой дисперсии измерений σ^2, что полностью соответствует мнению, выраженному в [6, стр.396 — 403];

5) при достаточно большой дискретности измерений (достаточно больших N) оценки (1) — (3) слабо зависят от N, т.е. от выбора X_i;

6) при $\sigma^2 = 0$ и N = 2 для всех трех видов нелинейной зависимости Y = F(X) r = ±1, т.к. через две точки всегда можно провести прямую.

В дальнейшем подробнее рассмотрим случай, когда σ^2 — мало, т.е. вклад слагаемого с σ^2 пренебрежимо мал по сравнению со слагаемыми, связанными с нелинейностью Y = F(X). В этом случае рассматривается влияние на коэффициент корреляции исключительно слагаемых, связанных с нелинейностью.

Выражения (1) и (2) при этом упрощаются и при $N \to \infty$ примут вид:

$$r_1 \approx \frac{1 + a}{\sqrt{(1+a)^2 + a^2/15}} \quad \text{и}$$

$$r_2 \approx \frac{1 - 6k/\pi}{\sqrt{1 - 12k/\pi + 6k^2}} \quad (4)$$

Для исследования коэффициента корреляции r элемента дуги φ_0 при условии $\sigma^2 \approx 0$ подробнее рассмотрим два предельных случая:

1) малая дуга ($\varphi_0 \approx 0$);

2) высокая дискретность разбиения дуги ($N \to \infty$).

В первом случае (3) преобразуется к виду:

$$r_3 \approx \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{N^2-4}{15(N+1)^2}}}. \quad (5)$$

При достаточно больших N (5) стремится к (-0,9682), а при малых N r_3 достаточно близко к (-1). Таким образом, при недостаточном разбиении дуги ее элемент может быть ошибочно принят за отрезок прямой.

В случае $N \to \infty$ значение r зависит от параметра дуги U, определяемого как

$$U = \frac{\sin(\varphi_0/2)}{\varphi_0/2} .$$

В этом случае (3) примет вид:

$$r_3 \approx - \frac{\sin(\varphi_0)}{\sqrt{\left(\frac{1 - U^2}{U(U - \cos^2(\varphi_0/2))}\right)^2 - \cos^2(\varphi_0)}} . \qquad (6)$$

При N порядка 5 — 7 дуга угловой величины не более 20° может считаться малой, о чем говорит близость оценок (5) и (6).

Исследование регрессионного критерия линейности

Регрессионный критерий линейности построен на основе критерия Фишера, и его применение для оценки линейности зависимости $Y = F(x)$ подробно описано в [2 — 7]. В случае, если Y_{ij} являются нормально распределенными случайными величинами, F подчиняется распределению Фишера с (N-2) и (M-1) N степенями свободы. При этом, по значению F можно оценить доверительную вероятность Q принятия гипотезы о линейности функции $Y = F(x)$. В противном случае, F просто является некоторой количественной характеристикой функции $Y = F(x)$.

Для трех рассмотренных выше видов нелинейной функции $Y = F(x)$ оценки величины F определяются выражениями:

$$F_1 = \frac{M(N + 2)(N^2 - 1)}{180N^3} \cdot \frac{a^2}{\sigma^2} ,$$

$$F_2 = \frac{M(N - 1)}{2(N - 2)} \left(1 - \frac{6\mathrm{ctg}^2(\pi/(N - 1))}{N(N + 1)}\right) \frac{k^2}{\sigma^2} , \qquad (7)$$

$$F_3 = \frac{M}{2N(N - 2)} \cdot \frac{(N^2 - \varepsilon^2)^2 + \mu^2}{(N2 - \varepsilon^2 + \mu\cos(\varphi_0(N + 1)/N))\sigma^2}$$

Анализ выражений (7) позволяет сделать следующие основные выводы:

1) минимум F (наибольшая доверительная вероятность принятия гипотезы о линейности $Y = F(x)$) реализуется при a=0 (k=0) независимо от дисперсии σ^2;

2) F симметричен относительно a=0 (k=0);

3) F инвариантен относительно комплекса a/σ (или k/σ), который можно интерпретировать как приведенное к единичной дисперсии нелинейное слагаемое;

4) при фиксированном N F возрастает с ростом φ_0;

5) малые значения F могут объясняться, в частности, относительно большими значениями σ^2, а не малостью a, k или φ_0.

Таким образом, исследование корреляционного и регрессионного критериев линейности показали, что каждый из них характеризует линейность зависимости $Y=F(x)$ как с точки зрения наличия нелинейного слагаемого (a, k, φ_0), так и с точки зрения разброса результатов (через σ^2). Однако, при этом, характер зависимости r и F от a, k и φ_0 существенно различный, а от σ^2 — противоположный.

Выберем одинаковые зависимости $Y = F(x)$ всех трех видов (квадратичную, гармоническую и элемент дуги), рассмотрим по два измерения с разными дисперсиями σ_1^2 и σ_2^2 и оценим линейность зависимости с помощью корреляционного и регрессионного критериев.

Будем считать: $N = 6$, $M = 4$, $\sigma_1^2 = 0{,}001$ и $\sigma_2^2 = 0{,}002$. (Воспользуемся выражениями (1) — (7).

Пример 1. $Y = X+0{,}4\ X^2$ ($a = 0{,}4$)

$r_1 = 0{,}9957$; $r_2 = 0{,}9936$; $F_1 = 4{,}609$; $F_2 = 2{,}305$.

Пример 2. $Y = X+0{,}05\ \sin(2\pi X)$ ($k = 0{,}05$)

$r_1 = 0{,}9896$; $r_2 = 0{,}9846$; $F_1 = 4{,}559$; $F_2 = 2{,}279$.

Пример 3. Дуга угловой величины $\varphi_0 = 30°$

$r_1 = -0{,}9580$; $r_2 = -0{,}9411$; $F_1 = 698{,}8$; $F_2 = 349{,}4$.

Во всех примерах корреляционный критерий r объявляет более линейной зависимость с меньшей дисперсией (σ_1^2), но согласно регрессионному критерию F при этом доверительная вероятность принятия гипотезы о линейности связи X и Y меньше (т.к. величина F — больше).

Вместе с тем, очевидно, что каждый из обоих исходных критериев линейности по-своему учитывает вклад нелинейных слагаемых и влияние разброса измерений Y_{ij}. Поэтому, следует сформировать комплексный критерий линейности, сочетающий свойства как корреляционного, так и регрессионного критериев и способный работать в тех же условиях проведения измерений, что и исходные.

Искомым комплексным критерием линейности является функционал качества H, введенный как:

$$H = 10^6(1 - r^2)^2 + \omega^2(M - 1)F , \qquad (8)$$

где ω^2 — весовая функция. Наиболее линейной из нескольких сравниваемых зависимостей будет та, которая обеспечит наименьшее значение функционала качества H. (При M=1 критерий Фишера методически неприменим. Функционал качества H сводится, в этом случае, к корреляционному критерию, т.к. min H эквивалентен max).

Подбор весовой функции осуществляется на предварительной стадии (стадия "обучения") на основании экспертной оценки.

Эксперимент

В работе [9] описан сенсор, реагирующий на присутствие ионов Cu^{2+}. Откликом сенсора является изменение пропускания чувствительногоэлемента. В [9] показано, что информативным параметром P является тангенс угла наклона прямой $d_j = q + P(t_j)^{1/2}$, где d_j — отклик чувствительного элемента в момент времени t_j. Оценивание P проводилось с помощью метода наименьших квадратов (МНК) по всем измерениям до момента $t_1 = 180$ или $t_2 = 300$ с при различных концентрациях Cu^{2+} в диапазоне от $2 \cdot 10^{-5}$ до $1 \cdot 10^{-3}$ М/л.

На основании полученных оценок P были построены две калибровочные зависимости сенсора, представленные на рис.1. Параметры калибровочных характеристик даны в таблице 1. (M — число измерений величины P для каждой концентрации, N — число

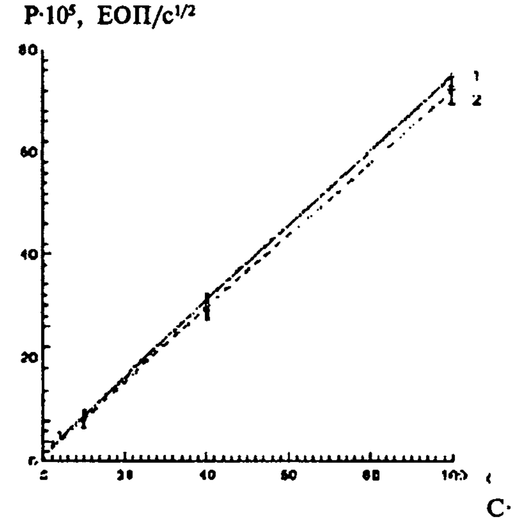

Рис.1. Калибровочные характеристики сенсора
1 - при времени измерения 180 сек,
2 - при времени измерения 300 сек.

концентраций, M = 3, N = 5). Можно сделать вывод о близости обеих калибровочных характеристик к линейной, действительно, описывающие их уравнения, полученные с помощью МНК имеют вид:

$P_1 = 10^{-3}(1{,}66 + 0{,}732 \cdot 10^5 C_{cu})$,
$P_2 = 10^{-3}(1{,}25 + 0{,}706 \cdot 10^5 C_{cu})$.

Произведя оценивание выборочного коэффициента корреляции r для обеих зависимостей, получим $r_1 = 0{,}99989$ и $r_2 = 0{,}99908$. Согласно данному критерию, обе характеристики обладают очень сильной линейной связью P и C, первая из них — более сильная.

Оценки по критерию Фишера равны $F_1=3{,}126$ и $F_2=2{,}674$ для первой и второй зависимостей соответственно. При принятии гипотезы о нормальном законе распределения измерений информативного параметра P, величины F_1 и F_2 удовлетворяют распределению Фишера с 3 и 10 степенями свободы. В этом случае F_1 и F_2 соответствуют доверительные вероятности 7 и 11%. Данная оценка говорит о большей достоверности принятия гипотезы о линейности для второй зависимости. Однако, следует отметить, что дисперсии измерений P равны $0{,}17 \cdot 10^{-4}$ и $1{,}41 \cdot 10^{-4}$. Таким образом, малость F_2 по отношению к F_1 отчасти может быть объяснена существенным увеличением дисперсии измерений.

Воспользуемся комплексным критерием линейности (8), согласно которого $H_1 = 0{,}0484 + 6{,}252\,\omega^2$ и $H_2 = 3{,}3827 + 5{,}348\,\omega^2$. Очевидно, что в зависимости от весовой функции можно получить разные результаты:

при $\omega^2 = 3{,}00$ $H_1 = 18{,}80$; $H_2 = 19{,}43$ $(H_1 < H_2)$;
при $\omega^2 = 3{,}69$ $H_1 = 23{,}11$; $H_2 = 23{,}11$ $(H_1 = H_2)$;
при $\omega^2 = 4{,}00$ $H_1 = 25{,}06$; $H_2 = 24{,}77$ $(H_1 > H_2)$.

Следовательно, для получения однозначной оценки следует предварительно выбрать весовую функцию ω^2.

Обсуждение результатов

Комплексный критерий линейности (8) призван учесть свойства как корреляционного, так и регрессионного критериев линейности.

Использованию данного критерия должно предшествовать его "обучение", состоящее в выборе весовой функции ω^2. Этот выбор осуществляется на основании экспертной оценки. При этом искомая весовая функция должна обеспечивать выбор наиболее линейной зависимости из нескольких предложенных.

Первое слагаемое (8) растет с ростом σ^2 (при этом r^2 отдаляется от 1) и потому может трактоваться как штраф за снижение точности измерения. Второе слагаемое, характеризующее приведенную к единичной дисперсии интенсивность нелинейных слагаемых функции $Y = F(x)$, убывает с ростом σ^2, что связано с возрастанием неопределенности положения каждой из точек анализируемой зависимости.

В случае высоких требований к точности каждого измерения, когда повышение линейности через снижение F не может компенсировать даже незначительного роста σ^2 (в случаях сравнительно больших σ^2) — весовая функция ω^2 должна быть

Таблица 1
Зависимость информативного параметра P от концентрации ионов Cu^{2+}

$C \cdot 10^5$, М/л	$t_1 = 180°$ C		$t_2 = 300°$ C	
	$P \cdot 10^3$	$\sigma \cdot 10^3$	$P \cdot 10^3$	$\sigma \cdot 10^3$
2	2,89	0,03	2,82	0,14
4	4,38	0,07	4,47	0,05
10	9,4	0,3	8,44	0,28
40	31	0,7	28,4	1,1
100	74,8	0,5	72,3	2,4

малой. В рассмотренном эксперименте именно такой случай, и ω^2 не следует выбирать более 3,0.

В случае малых σ^2 возможная нелинейность зависимости Y = F(x) связана, главным образом, с наличием нелинейных слагаемых в Y, и весовую функцию ω^2 следует увеличить, сделав второе слагаемое в (8) доминирующим.

Процесс "обучения" (определения ω^2) должен производиться в тех же условиях, что и измерение, т.е. при одном и том же значении M.

Выводы

1. Получены выражения для выборочного коэффициента корреляции r и критерия Фишера F и их асимптотические оценки для трех наиболее распространенных видов искажений линейной зависимости (квадратичной, гармонической и дуговой).

2. Показано, что для некоторых зависимостей повышение вероятности принятия гипотезы о линейном характере связи Y =F (x) может быть обусловлено большим элементом случайности, а не малостью нелинейных слагаемых. Таким образом, для анализа нелинейности Y=F(x) необходимо комплексное применение регрессионного и корреляционного критериев, соответственно определяющих доверие к гипотезе о линейности связи Y и X и доверие к результатам измерений.

3. Сформирован комплексный критерий линейности в форме функционала качества (8), содержащий взвешенные значения корреляционного и регрессионного критериев, позволяющий оценивать линейность зависимости Y = F(x) при произвольном выборе точек измерения (значений N и M), в том числе, и в случае однократных измерений (M=1).

Список литературы:

1. *Корыта И., Штулик К.* Ионоселективные электроды. Пер. с чешск. - М: Мир, - 1989. -272 с.

2. *Большев Л.Н., Смирнов Н.В.* Таблицы математической статистики, -М: Наука, -1983. -416 с.

3. *Мидгли Д.,Торренс К.* Потенциометрический анализ воды,-М: Мир,-1980. 517 с.

4. *Румшинский Л.В.* Элементы теории вероятностей,-М:Наука,-1966.-176 с.

5. *Пустыльник Е.И.* Статистические методы анализа и обработки наблюдений, - М: Наука, -1968. -288 с.

6. *Кендалл М., Стьюарт А.* Статистические выводы и связи, -М.: Наука, 1973. -900 с.

7. Analytical Methods Committee // Analyst, 1994. -Vol.119. -P.2363

8. *Рыжик И.М.* Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений, -М.,Л.: Гостехиздат, -1943. -400 с.

9. *Kurochkin V.E., Makarova E.D.* Reflectance Spectrophotometry of Plasticied membranes for the Design of Fast Chemosensors //Analytical Communications, - March 1996, V.33.

COMPLEX LINEARITY CRITERION FOR THE RELATIONSHIP Y=F(X) IN INSTRUMENT ENGINEERING APPLICATIONS

A.L.Bulyanitsa
Institute for Analytical Instrumentation RAS

The work is devoted to the development and selection of the linearity criterion for the functional relationship Y=F(X). The new linearity criteria, expressed in "functional of quality" form, allow one to take into account some information, represented by the correlation's coefficient r and the Fisher criterion F.