Для оценивания расширенной неопределенности можно рассчитать эффективное число степеней свободы для u_Σ по формуле $\nu_{эфф} = (n-1)\,(u_\Sigma/u_A)^4$. Значения $\nu_{эфф}$ будут изменяться от $n-1$ (при $u_A \geq 0{,}4q\sqrt{n}$) до ∞ (при $u_A = 0$).

Выводы. Процедура вычисления среднего арифметического входных величин, выраженных в децибелах, с последующим пересчетом в оценку измеряемой величины дает из-за связывающей их нелинейной зависимости смещенную оценку. Это смещение не будет превышать 10 % при СКО случайной погрешности не более 2 дБ для энергетических и 4 дБ для силовых величин. Если стандартная неопределенность типа А величины, выраженной в децибелах, не превышает 1,8 дБ для энергетических и 3,6 дБ для силовых величин, то относительная погрешность ее оценивания не более 15 %. Если стандартная неопределенность типа В величины, выраженной в децибелах, не превышает 2,8 дБ для энергетических и 5,6 дБ для силовых величин, то относительная погрешность ее оценивания не более 15 %. Представленный алгоритм позволяет рассчитать коэффициент Стьюдента для любого дробного числа степеней свободы. Предложенная формула (7) для аппроксимации зависимости коэффициента Стьюдента от числа степеней свободы имеет относительную погрешность не более ± 1 % в диапазоне изменения ν от 1 до 6. Выражение (9) для вычисления совместной неопределенности, связанной с квантованием измеряемой величины и наблюдаемым рассеиванием результатов измерений, обеспечивает уменьшение неопределенности по сравнению с выражением (8), приведенным в [1], до 2 раз.

Литература

1. **Guide** to the Expression of Uncertainty in Measurement. Geneva: ISO, 1993.

2. **Захаров И. П., Шевченко Н. С.** Особенности оценивания неопределенности измерений при выражении входных величин в децибелах // Системи обробки інформації. 2009. Вип. 5 (79). С. 29—33.

3. **Захаров И. П., Климова Е. А.** Расчет значений коэффициента Стьюдента для дробного числа степеней свободы // Системы обработки информации. 2010. № 4 (85). С. 43—47.

4. **Захаров И. П., Водотыка С. В.** Учет погрешности квантования при оценивании неопределенности результатов измерений с многократными наблюдениями // Системи обробки інформації. 2011. Вип. 8 (98). С. 39—44.

Дата принятия 29.01.2013 г.

53.081.1

О независимости, взаимозаменяемости и логической корреляции случайных переменных в метрологии

В. ВЁГЕР

Физико-технический институт, Берлин, Германия, e-mail: wolfgang.woeger@ptb.de

Представлена байесовская трактовка измерений в условиях повторяемости, которая в конечном итоге сводится к замене (полной) независимости внутри последовательности случайных переменных, генерирующих наблюдения, условной независимостью, означающей наличие скрытой корреляции случайных переменных внутри последовательности. Введено понятие взаимозаменяемой совместной плотности распределения вероятностей для краткого обсуждения связи измерений в условиях повторяемости с центральной теоремой о представлении де Финетти, которая требует использования байесовского подхода.

Ключевые слова: *плотность распределения вероятностей, байесовский подход, корреляция случайных переменных, модель измерения.*

A Bayesian understanding of measurements under repeatability conditions is presented, finally leading to the replacement of (complete) independence within the sequence of random variables generating the observations, with a conditional independence which means a hidden correlation of the random variables in the sequence. The concept of an changeable joint probality densiti function is introduced to briefly discuss the relation of measurements under repeatability conditions to de Finetti's purely mathematical General Representation Theorem that, moreover, calls for a Bayesian approach.

Key words: *probability density function, Bayesian approach, correlation of the random variables, measurement model.*

Неполное знание двух или более величин математически описывается совместной плотностью распределения вероятностей (ПРВ), которая помимо известных математических ожиданий и стандартных отклонений содержит также в качестве дополнительных параметров известные ковариации или коэффициенты корреляции. Здесь ПРВ понимается как математическое выражение уровня знаний, определяемого информацией об изучаемых величинах. Случайную переменную с ПРВ для неизвестной фиксированной величины будем обозначать тем же символом, что и саму величину. Она соотносится с величиной, но ни в коей мере не отождествляется с ней. Из последнего утверждения следует, что ковариация описывает не корреляцию двух величин, а логическую зависимость между знаниями о них. Это означает логическую корреляцию между случайными переменными, соотнесенными с неизвестными фиксированными величинами. Ненулевые ковариация или коэффициент корреляции показывают наличие информации, которая является значимой для уровней знаний об обеих величинах одновременно.

Рассмотрим случай с двумя однородными величинами, измеряемыми независимо двумя разными лабораториями, о которых известно, что их результаты прослеживаются к одному и тому же эталону[1]. Корреляция между соответствующими случайными переменными возникает из-за известной прослеживаемости к общему эталону, а не из-за наблюдаемого статистического поведения пар случайных наблюдений этих двух величин в одном и том же эксперименте. Как и стандартные неопределенности, значимые ковариации не оцениваются статистически, а приписываются или вычисляются с учетом имеющейся информации, включая модель оценивания.

В случае, если какая-либо информация является значимой для одной величины и абсолютно незначимой для другой или наоборот[2], то совместная ПРВ для двух соответствующих переменных раскладывается на произведение двух независимых ПРВ этих переменных. Далее эти величины считают независимыми, хотя правильнее было бы принять, что знание об одной величине не зависит от информации о другой и наоборот. В случае с двумя величинами, одна из которых известна точно, соответствующие ПРВ переменных независимы и поэтому некоррелированны. Дополнительная информация о неточно известной величине незначима для ПРВ (дельта-функции Дирака) точно известной величины.

Совместная ПРВ для двух величин с соответствующими независимыми случайными переменными не имеет ковариации (или коэффициента корреляции), однако обратное утверждение не обязательно является истиной. Если о совместной ПРВ для двух величин известно, что она содержит нулевую ковариацию, это необязательно означает, что ПРВ, соответствующие этим двум величинам, независимы. Совместная ПРВ $g(x, y|I)$ не раскладывается на множители.

Если cov $(X, Y) \neq 0$, то совместная ПРВ для X и Y не раскладывается на множители. В физике для отражения идеи корреляции, обусловленной физическими причиной и следствием, часто рассматривается условная функция ПРВ $g(x|y;\ I) = g(x,\ y|I)/g(y|I)$ для случайных переменных (I — исходная информация). Предполагается, что условная вероятность отражает случайное влияние уже осуществленного измерения Y на результат измерения X. Действительно, такая интерпретация приемлема, например, в случае урны Бернулли с общим числом N черных и белых шаров, извлекаемых без замещения. Каждая попытка, следующая за первой, меняет физические условия в урне определенным образом, что позволяет вычислить, например, условную вероятность для черного шара при M-й попытке, если в первой попытке выпал черный шар (исходным распределением является гипергеометрическое распределение). Однако, если был предоставлен результат M-й попытки без какой-либо дальнейшей информации о предшествовавших попытках, возникает вопрос об условной вероятности появления черного шара при первой попытке. Поскольку M-я попытка не могла влиять на физические условия урны при первой попытке, аргумент о причинно-следственной связи зачастую приводит к мнению об отсутствии корреляции.

Таким образом, ответом на вопрос становится безусловная вероятность появления черного шара при первой попытке. Однако это определенно неверно, что показывает простой пример с урной, в которой на начало эксперимента был только один черный шар. Если в M-й попытке речь идет о черном шаре ($M > 1$), то с уверенностью можно утверждать, что он не был извлечен в первый раз, т. е. условная вероятность равна нулю, а ни в коем случае не $1/N$ при извлечении черного шара в первой попытке. Та же нулевая вероятность возникает при извлечении черного шара в M-й попытке, если он был извлечен в первой попытке. Этот результат очевиден из-за причинно-следственной связи. На самом деле из математической теории вероятностей для гипергеометрического распределения строго следует

$$\Pr(B_i|I) = \Pr(B_k|I),$$

а следовательно,

$$\Pr(B_i|B_k;\ I) = \Pr(B_k|B_i;\ I), \qquad i \neq k. \tag{1}$$

Здесь B_i обозначает черный шар при i-й попытке. Для $i > k$ левая часть равенства (1) — это условная вероятность, выражающая физическую причинность, в то время как правая часть является логическим выводом [1, 2].

Симметрия, отраженная в (1), обусловлена тем, что в эксперименте Бернулли вероятность наблюдения определенной последовательности черных и белых шаров в соответствии с лежащим в его основе гипергеометрическим распределением не зависит от порядка появления белых или черных шаров. На самом деле, распределение последовательности случайных переменных в эксперименте Бернулли — это пример класса распределений с симметричностью, которая носит название «взаимозаменяемость». Взаимозаменяемость, выраженная в совместном распределении последовательности случайных переменных, оказывается, имеет фундаментальное значение не только для общей теории Байеса, но, в особенности, для лучшего понимания типичных видов измерений в метрологии, например, измерений в условиях повторяемости.

Далее кратко изложено введение во взаимозаменяемость на основе измерений в условиях повторяемости. Речь пойдет о недостаточности обычного формального описания такого вида измерений и будет представлено возможное решение. Затем дано формальное определение взаимозаменяемости, которая может рассматриваться как расширение статистической независимости и является основой центральной теоремы о представлении де Финетти [4]. Заключительные комментарии касаются важности понятия взаи-

---

[1] Например, два набора концевых мер, откалиброванные разными лабораториями, каждая из которых использовала концевые меры более высокого уровня, откалиброванные одним и тем же национальным метрологическим институтом при помощи He—Ne/J_2-лазера.

[2] Симметричность природы незначимой информации на самом деле заложена в законах теории вероятности. Из правила умножения и логической тождественности A, $B = B$, A следует, что $\Pr(A)\ \Pr(B|A) = \Pr(B)\ \Pr(A|B)$. Таким образом, если A незначимо для знания о B, т. е. $\Pr(B|A) = \Pr(B)$, тогда $\Pr(A) = \Pr(A|B)$ и, следовательно, B также незначимо для знания об A.

мозаменяемости и теоремы о представлении и их применения.

Наблюдения в условиях повторяемости. Измерения в условиях повторяемости проводятся с целью создания последовательности сходных данных, которые могут быть использованы, чтобы получить информацию об измеряемой величине. Полученные при помощи средства измерений (СИ) N показаний обычно трактуют как реализацию последовательности статистически независимых и одинаково распределенных случайных переменных X_j ($j = 1, ..., N$). Таким образом, совместное распределение последовательности случайных величин имеет вид

$$g_{X_1,...,X_N}\left(x_1, ..., x_N \mid I\right) = \prod_{i=1}^{N} g\left(x_i \mid I\right). \qquad (2)$$

Из такой (маргинальной) независимости следует, что для любого $1 \leq m < N$: ($j = 1, ..., N$) справедливо

$$g\left(x_{m+1}, ..., x_N \mid x_1, ..., x_m; I\right) = g\left(x_{m+1}, ..., x_N \mid I\right).$$

Здесь и далее нижние индексы для символа ПРВ g опущены для удобства.

Это очевидно показывает, что нельзя получить никакой информации о $X_{m+1}, ..., X_N$ из опыта, накопленного для первых m величин. Как следствие, в ситуациях, когда ожидается увеличение объема информации за счет успешного накопления данных, независимая структура совместной ПРВ — выражение (2) — не является пригодной: совместная плотность $g(x_1, ..., x_N|I)$ должна каким-либо образом отражать некоторую зависимость между отдельными случайными переменными для того, чтобы процесс накопления знаний был возможен.

Однако в метрологии всегда присутствуют неизбежные причины (логической) корреляции случайных переменных (или их ПРВ), напрямую не проявляющиеся при наблюдениях. Это систематические эффекты, которые оказывают влияние на показания при каждом повторении эксперимента и описываются ненаблюдаемой константой, например C. Информация о систематических эффектах берется из внешних источников и не может быть получена из наблюдений, хотя они и зависят от этих эффектов. Типичный пример — неточно известный калибровочный коэффициент СИ, который вызывает ненаблюдаемое систематическое смещение, общее для всех наблюдений при повторениях.

Несмотря на то, что в традиционной статистике любая известная или неизвестная константа не имеет вероятностной интерпретации, при байесовском подходе она должна быть включена в соответствующий набор случайных переменных, соотнесенных с величинами, точно неизвестными:

$$g\left(x_1, ..., x_N, c \mid I\right) = g\left(x_1, ..., x_N \mid c; I\right) g\left(c \mid I\right).$$

Маргинализация дает

$$g\left(x_1, ..., x_N \mid I\right) = \int_{\Theta} g\left(x_1, ..., x_N \mid c; I\right) g\left(c \mid I\right) dc. \qquad (3)$$

Выражение (3) имеет общий вид и не может быть непосредственно использовано для получения данных в известных условиях повторяемости, о которых точно известно, что они не влияют друг на друга в ходе эксперимента, т. е. могут рассматриваться как сходные в ходе одного и того же повторяемого эксперимента. Фактически после каждого измерения экспериментальная ситуация возвращается к исходной. Это означает, что все наблюдения, хотя и зависят от значения c величины C, могут обрабатываться как независимые. Может возникнуть соблазн предложить равенство

$$g\left(x_i \mid x_k, c; I\right) = g\left(x_i \mid c; I\right) \quad (i \neq k)$$

или равнозначное

$$g\left(x_1, ..., x_N \mid c; I\right) = \prod_{i=1}^{N} g\left(x_i \mid c; I\right), \qquad (4)$$

которое выражает условную (ограниченную величиной C) независимость случайных переменных [4]. Очевидно, что совместная ПРВ случайных переменных $X_1, ..., X_N$ (3), несмотря на условную независимость, не раскладывается на множители, так что случайные переменные (абсолютно естественным образом) коррелированны. Подставляя (4) в (3), получаем интегральное представление ПРВ для последовательности случайных переменных.

Еще не совсем понятно, адекватно ли такой подход обеспечивает требование сходности. Определение базового критерия сходности, которому должна удовлетворять совместная ПРВ, — это интересный вопрос. И (2), и (4) содержат предложения для возможного критерия.

Взаимозаменяемость. Очевидно, что порядок случайных переменных в (2) или (4), а следовательно, и в (3), не играет никакой роли в совместной ПРВ. Это означает, что после того, как последовательность наблюдений была создана и из нее был взят случайный элемент x_i без знания индекса i, в соответствии с имеющейся информацией не будет возможности расположить это наблюдение в последовательности. Если же такое расположение невозможно, т. е. ни один из индексов i не может быть предпочтительнее остальных, то в последовательности наблюдений или соответствующих случайных переменных присутствует взаимозаменяемость. Такая взаимозаменяемость в последовательности случайных переменных не единственный способ обеспечить сходность, но она оказывается особенно важной при байесовском подходе к формулированию заключений, как будет показано ниже.

Формально взаимозаменяемость [3, 5] выражается через совместную ПРВ, удовлетворяющую равенству

$$g\left(x_1, ..., x_N \mid I\right) = g\left(x_{\pi(1)}, ..., x_{\pi(N)} \mid I\right) \qquad (5)$$

для любой возможной перестановки π индексов $\{1, ..., N\}$. Таким образом, уровень знаний об отдельных величинах одинаков. То же самое верно для пар, троек и т. д. величин. Последовательность случайных переменных называется взаимозаменяемой, если выражение (5) сохраняется для любого подмножества случайных переменных в последовательности.

Простой формальный пример взаимозаменяемости — это двумерная ПРВ Гаусса:

$$g_{X,Y}\left(x, y \mid I\right) = g_{Y,X}\left(y, x \mid I\right) \propto \exp\left[-\frac{1}{2(1-\rho^2)}\left(x^2 + y^2 - 2\rho xy\right)\right],$$

которая демонстрирует взаимозаменяемость для любого ρ и маргинальную независимость только для $\rho = 0$. Последовательности независимых одинаково распределенных переменных, как и условно независимых случайных переменных, обязательно взаимозаменяемы. Далее дадим краткий обзор основных следствий, которые чисто математически вытекают из простого существования взаимозаменяемой последовательности случайных переменных.

Байесовский подход и взаимозаменяемость. Существенный момент, который следует отметить, — все правдоподобные результаты, рассмотренные здесь и относящиеся к измерениям в условиях повторяемости, могут быть строго получены из единственного предположения существования взаимозаменяемой последовательности случайных переменных [5]. С этой точки зрения, измерения в условиях повторяемости могут быть рассмотрены как реализация чисто теоретического результата.

Из предположения о существовании взаимозаменяемой последовательности случайных переменных следует (основная теорема о представлении де Финетти [3, 5]):

A — существование статистической параметрической модели $g(x_i\,|\theta)$, $i = 1, ..., N$ с неизвестным параметром $\theta \in \Theta$, который может быть многомерным;

B — существование ПРВ $g(\theta|I)$ для $\theta \in \Theta$, что

$$g\left(x_1, ..., x_N\,|\,I\right) = \int_\Theta \prod_{i=1}^{N} g\left(x_i\,|\theta\right) g\left(\theta|I\right) d\theta.$$

Если выборка наблюдений признается принадлежащей к взаимозаменяемой последовательности случайных переменных, то она согласно теореме должна быть случайной выборкой из статистической модели с параметром, для которого также существует ПРВ. Далее, эта случайная выборка является реализацией последовательности не маргинально, но условно независимых случайных переменных. Однако фундаментальным положением теоремы является то, что математическое представление требует байесовского формализма, если сходность характеризуется взаимозаменяемостью. Таким образом можно найти апостериорное распределение параметра статистической модели с использованием теоремы Байеса:

$$g\left(\theta|x_1, ..., x_N;\, I\right) \propto \prod_{i=1}^{N} g\left(x_i\,|\theta\right) g\left(\theta|I\right).$$

Более того, можно получить прогноз из условия

$$g\left(x\,|\,x_1, ..., x_N;\, I\right) = \int_\Theta g\left(x\,|\theta\right) g\left(\theta|x_1, ..., x_N;\, I\right) d\theta.$$

Взаимозаменяемость автоматически приводит к зависимости прогноза от уже существующей информации. Теорема часто служит базой для объединения данных из различных связанных источников информации о лежащих в основе взаимозаменяемых случайных переменных. Теорема констатирует существование распределений, но не показывает, как найти ПРВ для параметров статистической модели.

В заключение отметим, что термин «корреляция» в байесовском подходе применяется для выражения связи между уровнями знаний о двух величинах. Даже если известно, что две величины связаны уравнением, действительный уровень знаний об этих величинах не должен опираться на это отношение, так как две ПРВ могли быть построены без явного использования указанного отношения. В этом случае две ПРВ можно считать независимыми. Однако, если ПРВ для одной из величин получена с использованием ПРВ для другой величины, как и информации о соотношении величин и ее форме, то совместная ПРВ явно покажет корреляцию. Например, во время калибровки прибора относительно хорошо изученный эталон применяют, чтобы получить калибровочный коэффициент для прибора на основании его показаний и знания измеряемой величины. Информация о показаниях будет влиять на уровень знаний о калибровочном коэффициенте, так как не существует независимости соответствующих уровней знаний во время калибровки. Однако ситуация полностью меняется, когда применяется калибруемый прибор для измерений неизвестной величины. В этом случае вопрос касается измеряемой величины, а не калибровочного коэффициента. Известная ПРВ для последнего берется из документации по калибровке прибора, которая проходила раньше при условиях, сравнимых с нынешними. Неизвестная измеряемая величина воздействует на фактически наблюдаемые показания, которые не являются значимыми для ПРВ калибровочного коэффициента. Действительно, текущие показания не вносят вклад в информацию о калибровочном коэффициенте, поскольку измеряемая величина неизвестна. Таким образом, существует независимость между случайными переменными, соотнесенными с показанием, и калибровочным коэффициентом.

Итак, численное выражение корреляции, ковариации двух случайных переменных базируется на поставленной задаче и имеющейся информации. Это не стоит понимать, как установленную экспериментальным путем оценку параметра статистической многомерной модели. Другой способ выразить корреляцию случайных переменных (или соответствующих ПРВ) — это использование условной плотности распределения вероятностей. Она выражает не только корреляцию, обусловленную причинно-следственными связями, но также и корреляцию, возникающую в силу логического вывода.

Случайные переменные, которые не являются независимыми (полностью или маргинально), будут коррелированными. В метрологии часто измерения в условиях повторяемости проводят для того, чтобы получить сходные данные, которые более или менее независимы одно от другого в рамках условий измерительного процесса. Такие измерения должны описываться последовательностью случайных переменных, которые, с одной стороны, одинаково распределены, а с другой — не являются маргинально независимыми. Существующая корреляция обусловлена присутствием общего ненаблюдаемого или скрытого систематического эффекта, обусловленного физическими условиями измерительного процесса (включая свойства используемых СИ, как, например, их действующая калибровка).

Таким образом, было показано, что внутренняя ненаблюдаемая корреляция в последовательности случайных переменных математически строго выводится из совместной ПРВ, которая вместо маргинальной независимости случайных переменных демонстрирует более общую взаимозаменяемость последовательности случайных переменных. Любое конечное взаимозаменяемое подмножество наблюдений — это выборка условно независимых случайных величин из статистической модели, для которой ПРВ неизвестных параметров существует. Очевидно, что измерения в условиях повторяемости можно рассматривать как реализацию этой математической абстракции.

Однако важно отметить, что математический формализм нуждается в существовании распределения вероятности для параметров статистической модели, из которой извлекается взаимозаменяемая выборка. Итак, математический подход требует введения байесовского подхода, включая применение теоремы Байеса, но не может помочь при установлении адекватных распределений вероятностей для этих параметров.

Литература

1. **Jaynes E. T.** Probability Theory: The Logic of Science. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2003.

2. **Jaynes E. T.** Clearing up Mysteries — The Original Goal, in Maximum-Entropy and Bayesian Methods / Ed. J. Skilling. Dordrecht: Kluwer, 1989. P. 1.

3. **Bernardo J. M., Smith A. F. M.** Bayesian Theory Chichester: John Wiley & Sons, Ltd, 2000.

4. **Dawid A. P.** Conditional independence in statistical theory // J. Roy. Statist. Soc. 1979. V.B 41. P. 1—31.

5. **Finetti B. de.** Theory of Probability Chichester: John Wiley & Sons, Ltd, 1974.

Дата принятия 10.01.2013 г.

НАНОМЕТРОЛОГИЯ

006.78

Стандартные образцы пространственных характеристик наноструктур на основе аморфных многослойных покрытий

А. С. БАТУРИН*, В. С. БОРМАШОВ*, М. А. ЕРМАКОВА*, Е. А. МОРОЗОВА*, С. А. МОРОЗОВ*, Е. В. КОРОСТЫЛЕВ*, С. С. ЗАРУБИН*, А. М. МАРКЕЕВ*, П. А. ТОДУА**

** Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия, e-mail: baturin@mail.mipt.ru*
*** Научно-исследовательский центр по изучению свойств поверхности и вакуума, Москва, Россия*

Представлены результаты разработки стандартных образцов СПАМ-20 и СПАМ-100 пространственных характеристик наноструктур на основе периодических многослойных покрытий Al_2O_3/TiO_2, предназначенных для контроля точности измерений и аттестации методик выполнения измерений, основанных на методе рентгеновской рефлектометрии. Рассмотрены метрологические характеристики указанных стандартных образцов.

Ключевые слова: *стандартные образцы пространственных характеристик, рентгеновская рефлектометрия, многослойные пленки, метод атомно-слоевого осаждения.*

The results of development of certified reference materials of nanostructures spatial characteristics based on multilayer periodic Al_2O_3/TiO_2 coatings intended for X-Ray reflectometry measuring techniques accuracy control and measurement procedures certification are presented. The metrological characteristics of developed certified reference materials are considered.

Key words: *certified reference materials of spatial characteristics, X-Ray reflectometry, multilayer films, ALD.*

В настоящее время в России расширяется производство наноразмерных функциональных покрытий (термозащитных, радио- и светоотражающих, сверхпрочных и др.), а также гетероструктур для светоизлучателей и фотоприемников волоконно-оптических линий связи [1]. Функциональные покрытия обычно представляют однослойные или многослойные пленки нанометровой толщины на поверхностях изделий.

Пространственные и функциональные характеристики многослойных наноразмерных покрытий определяющим образом влияют на эксплуатационные параметры изделий нанотехнологий. Метрологическое обеспечение измерений этих характеристик является актуальной задачей для развития нанотехнологий с точки зрения контроля и повышения качества продукции наноиндустрии. В него входит разработка методик выполнения измерений (МВИ) и стандартных образцов (СО) для аттестации этих методик и контроля точности измерений.

В качестве методов исследования тонкопленочных наноразмерных покрытий широко применяют оптические и рентгеновские методы, такие как рентгеновская и оптичес-