

УДК 631.81.033

ВОЗМОЖНОСТЬ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ МЕТОДА БУТСТРЭПА ДЛЯ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ ВЕГЕТАЦИОННОГО ОПЫТА

В. А. ДЕМЕНТЬЕВ, И. Г. ЗАХАРОВА

(Кафедра агрономической и биологической химии и кафедра физики)

Выяснялась возможность применения методов математической статистики, основанных на интенсивном использовании компьютеров при анализе результатов вегетационных опытов. Сравнивали метод бутстрэпа и схему дисперсионного анализа при использовании данных о влиянии микроэлементов на развитие сои и люцерны. Показано, что метод бутстрэпа и схема дисперсионного анализа дают сопоставимые результаты в условиях малых выборок вегетационного опыта. В некоторых случаях метод бутстрэпа более чувствителен к статистическим свойствам отдельных вариантов опыта, поскольку он не связан с принадлежностью данных опыта к нормальному закону распределения.

В агрохимических исследованиях данные вегетационного опыта принято обрабатывать по схеме дисперсионного анализа с целью выявления наименьшей существенной разности между вариантами. Эта схема подробно разработана и представлена в работе [1], откуда нами заимствованы термины и обозначения.

Известно [2], что в основе дисперсионного анализа лежат два очень сильных допущения: данные по каждому варианту опыта считаются выборкой из нормальной совокупности; дисперсии совокупностей одинаковы для всех вариантов. На самом деле эти допущения являются статистическими гипотезами, которые следовало бы проверять, прежде чем пользоваться результатами анализа. Однако для вегетационного опыта характерна крайняя малочисленность выборок, что обрекает на неудачу любую попытку серьезной проверки указанных гипотез в пределах данного опыта и в пределах построений классической

статистики, основанных на законе больших чисел. Поэтому исследователь всегда подвергается некоторому риску получить, исходя из результатов дисперсионного анализа, неадекватные выводы о величине НСР.

В последние годы появились неклассические методы статистики, основанные на интенсивном использовании компьютеров, что позволяет увеличить репрезентативность опытных выборок. Данные методы совершенно свободны от каких-либо априорных предположений относительно статистических свойств исследуемой опытной выборки. Большие числа фигурируют и в этих методах, но они возникают не в результате проведения многочисленных опытов, а в процессе тщательного осмотра малой выборки под различными углами зрения. В итоге из малой выборки извлекается максимум статистической информации. Представляется целесообразным проверить применимость таких неклассических мето-

дов к немногочисленным данным вегетационного опыта. В настоящем сообщении представлены результаты тестирования метода бутстрэпа на материале собственного вегетационного опыта. Сравниваются данные, полученные по методу бутстрэпа и дисперсионного анализа.

При использовании метода бутстрэпа [3] в компьютер вводится опытная выборка N результатов измерения величины X — повторностей опыта. Обычно N — малое число (не более 10). Компьютер, пользуясь генератором случайных чисел, выхватывает N раз какие-то числа основной выборки и создает вспомогательную выборку тоже из N чисел. Вспомогательная выборка похожа на опытную, поскольку она состоит только из полученных в эксперименте величин. Отличные вспомогательной выборки состоит в том, что некоторые величины из основной выборки могут попасть в нее неоднократно, а какие-то могут случайно и не попасть. Для вспомогательной выборки компьютер обычным образом находит и запоминает среднее значение. Далее таким же образом формируются новые многочисленные вспомогательные выборки и для них находится совокупность средних значений. Получается случайная выборка средних значений, которая может быть весьма большой, поэтому к ней возможно применение законов больших чисел. В частности, построенная по данной выборке гистограмма средних значений дает полное представление о статистических свойствах опытной выборки. В работе [3] показано, что с ростом N моменты гистограммы асимптотически сходятся к моментам того статистического распределения, которому следует генеральная выборка результатов измерений X . Следовательно, найденное по гистограмме среднее

значение X_{cp} из всех выборочных средних сходится к математическому ожиданию величины X . Среднеквадратическое отклонение величины X_{cp} , найденное по гистограмме, сходится к стандартному отклонению генеральной выборки, чем можно воспользоваться для оценки точности определения X_{cp} . Но проще непосредственно по гистограмме оценить доверительный интервал для величины X_{cp} с заданной вероятностью выхода неизвестной истинной величины математического ожидания X за границы этого интервала.

Однако неясно, каковы свойства выборки средних значений X_{cp} бутстрэпа при малых N . Этот вопрос не может быть прояснен с помощью теоретических методов. Для того чтобы судить о надежности оценок бутстрэпа при анализе выборок с малыми N , необходимо проведение сравнительного испытания метода бутстрэпа и дисперсионного анализа на относительно обширном экспериментальном материале. Этому вопросу и посвящено настоящее сообщение.

В качестве тестовых экспериментальных данных использованы результаты вегетационных опытов [4]. Данные каждого вегетационного опыта подвергались обработке двумя методами. С этой целью нами написаны две программы для компьютера IBM PC/AT на языке BASIC. Первая программа позволяет реализовать схему дисперсионного анализа, развитую для случая вегетационного опыта и полностью нерендомизированного полевого опыта [1]. Нами эта схема была дополнена результатами автоматической проверки выполнения F-критерия Фишера — для уровня значимости 5 % и автоматическим поиском коэффициента Стьюдента

для вычисления $НСР_{05}$, чтобы избежать будущих пользователей программы от необходимости поиска значений F_{05} и t_{05} по соответствующим таблицам. В программе также автоматически выявляются те варианты опыта, которые нельзя считать существенно различимыми по критерию $НСР_{05}$. Вторая программа для каждого варианта вегетационного опыта строит гистограмму распределения X_{cp} по методу бутстрэпа и предлагает исследователю по гистограмме выбрать доверительный интервал для измеренной величины на уровне значимости 5%. Обработав таким образом все варианты данного опыта, программа автоматически выявляет те варианты, которые нельзя считать существенно различимыми по критерию перекрытия доверительных интервалов. Конечной целью нашего сравнительного исследования являются наблюдения за числом неразличимых вариантов в каждом опыте по результатам работы обеих программ и анализ возможных причин расхождений.

Из [4] взяты данные вегетационных опытов, в которых изучалось влияние микроэлементов на накопление сухой массы растениями сои и люцерны. Во всех опытах было по 4 повторности ($N=4$), число вариантов варьировало от 4 до 8. Изучалось влияние микроэлементов, входящих в питательную смесь, и обработки семян микроэлементами на накопление сухой массы растениями. В каждом опыте определялась отдельно масса надземной части и корневых растений в фазу бутонизация — цветение и в фазу зеленых бобов. Результаты опытов сведены в 12 таблиц [4]. В настоящей работе математической обработке были подвергнуты данные всех таблиц независимо друг от друга с помощью описанных выше программ.

Сравнительное испытание двух статистических методов при малом количестве повторностей показало, что средние значения измеряемой величины урожайности, полученные при использовании программ дисперсионного анализа и бутстрэпа, совпадают в пределах 0,5%. В 8 таблицах из 12 оба метода позволили выявить одинаковые совокупности статистически неразличимых средних значений. В 3 таблицах с помощью метода бутстрэпа установлено несколько большее число статистически неразличимых средних значений, чем путем дисперсионного анализа. В 1 таблице при использовании метода бутстрэпа найдена различимой 1 пара значений, в случае применения метода дисперсионного анализа она признана неразличимой. Сопоставление приведенных в табл. 1 и 2 исходных данных и результатов обработки при использовании двух программ показало их противоречивость. Ниже приводится гистограмма средних значений из 100 выборок бутстрэпа для варианта 3 (табл. 2). Фигурными скобками обозначены отброшенные значения, количество которых по гистограмме составляет 5% к числу всех выборок бутстрэпа. Звездочки означают выборку бутстрэпа со средним значением, попадающим в указанный интервал. На этом примере видно, как формируется доверительный интервал по методу бутстрэпа.

По нашему мнению, изредка возникающие небольшие расхождения в выводах, полученных при использовании двух методов статистического анализа, о неразличимости результатов измерений легко объясняются различными критериями различимости результатов. В дисперсионном анализе величина $НСР$ является усредненной характеристикой остаточной дисперсии по всем повторностям и всем вариантам

Накопление сухой массы корней сои (г/сосуд) в фазу бутонизация — цветение

Вариант опыта	Повторность			
	1	2	3	4
1. Полная питательная смесь (ППС)	1,9	2,6	2,3	1,5
2. ППС+ обработка семян	4,9	4,1	3,8	4,7
3. » без Zn	1,2	2,0	2,3	1,3
4. То же+ обработка семян Zn	2,4	3,2	2,1	2,9
5. ППС+ » » Cu	3,7	3,3	4,0	4,4
6. » без Cu	2,1	1,6	1,0	1,3
7. То же+ обработка семян Cu	3,2	4,0	3,2	3,8
8. ППС+ » » Mo	4,0	3,8	3,2	2,8

Результаты работы программы дисперсионного анализа:

X_{mean} in variants

$i=1$ $X_{\text{mean}}=2,075$

$i=2$ $X_{\text{mean}}=4,375$

$i=3$ $X_{\text{mean}}=1,70$

$i=4$ $X_{\text{mean}}=2,65$

$i=5$ $X_{\text{mean}}=3,85$

$i=6$ $X_{\text{mean}}=1,50$

$i=7$ $X_{\text{mean}}=3,55$

$i=8$ $X_{\text{mean}}=3,45$

$C_v=37,57$; $C_p=0,49$; $C_v=31,78$; $C_z=5,30$

Dispersion of variants $S_v^2=4,5$ Freedom degrees=7

Residual dispersion $S^2=0,22$ Freedom degrees=24

Fisher criterion is passed with $q<5\%$

$S_d=0,33$

Multiply S_d by Student coefficient to obtain HCP_{05}

$HCP_{05}=0,68$

$i=1$ $j=3$ $X_{\text{means}} 2,075$ a. 1,7 fall into HCP_{05}

$i=1$ $j=4$ $X_{\text{means}} 2,075$ a. 2,65 » » »

$i=1$ $j=6$ $X_{\text{means}} 2,075$ a. 1,5 » » »

$i=2$ $j=5$ $X_{\text{means}} 4,375$ a. 3,85 » » »

$i=5$ $j=7$ $X_{\text{means}} 3,85$ a. 3,55 » » »

$i=5$ $j=8$ $X_{\text{means}} 3,85$ a. 3,45 » » »

$i=7$ $j=8$ $X_{\text{means}} 3,55$ a. 3,45 » » »

Результаты работы программы бутстрэпа:

	X_{mean}	X_{min}	X_{max}
$i=1$	2,05	1,68	2,35
$i=2$	4,38	3,89	4,8
$i=3$	1,69	1,39	2,14
$i=4$	2,62	2,18	2,94
$i=5$	3,83	3,40	4,23
$i=6$	1,48	1,08	1,90
$i=7$	3,57	3,33	3,93
$i=8$	3,43	2,9	3,89
$i=1$ $j=3$	overlapping	2,05 a. 1,69	
$i=1$ $j=4$	»	2,05 a. 2,62	
$i=1$ $j=6$	»	2,05 a. 1,48	
$i=2$ $j=5$	»	4,38 a. 3,83	
$i=2$ $j=7$	»	4,38 a. 3,57	
$i=2$ $j=8$	»	4,38 a. 3,43	
$i=3$ $j=6$	»	1,69 a. 1,48	
$i=4$ $j=8$	»	2,62 a. 3,43	
$i=5$ $j=7$	»	3,83 a. 3,57	
$i=5$ $j=8$	»	3,83 a. 3,43	
$i=7$ $j=8$	»	3,57 a. 3,43	

Таблица 2

Накопление сухой массы корней люцерны (г/сосуд) в фазу зеленых бобов

Вариант опыта	Повторность			
	1	2	3	4
1. Полная питательная смесь (ППС)	7,0	6,9	7,9	7,7
2. ППС+обработка семян Mo	9,6	9,0	9,3	10,2
3. »+ » » Co	10,2	10,8	10,0	9,9

Результаты работы программы дисперсионного анализа:

X_{mean} in variants
 $i=1$ $X_{\text{mean}}=7,37$
 $i=2$ $X_{\text{mean}}=9,52$
 $i=3$ $X_{\text{mean}}=10,22$
 $C_v=19,66$; $C_p=0,24$; $C_v=17,64$; $C_z=1,77$
 Dispersion of variants $S_v^2=8,82$. Freedom degrees=2
 Residual dispersion $S^2=0,19$. Freedom degrees=9
 Fisher criterion is passed with $q<5\%$
 $S_d=0,31$
 Multiply S_d by Student coefficient to obtain HCP_{05}
 $HCP_{05}=0,71$
 $i=2$ $j=3$ X_{means} 9,52 а. 10,22 fall into HCP_{05}

Результаты работы программы бутстрэпа:

	X_{mean}	X_{min}	X_{max}
$i=1$	7,37	6,93	7,7
$i=2$	9,48	9,08	9,8
$i=3$	10,22	9,89	10,53

**Гистограмма средних значений
100 выборков бутстрэпа
(вариант 3, табл. 2)**

$Juar=3$

$i=1$ $x=10,2$
 $i=2$ $x=10,8$
 $i=3$ $x=10,0$
 $i=4$ $x=9,9$

Histogram of 100 bootstrap samplings

9,89	9,96	6	*****
9,96	10,02	5	*****
10,03	10,08	17	*****
10,09	10,15	5	*****
10,15	10,21	19	*****
10,21	10,27	13	*****
10,28	10,33	8	*****
10,34	10,40	8	*****
10,40	10,46	9	*****
10,40	10,53	5	*****
10,53	10,58	1	*
10,59	10,65	2	** =5%
10,65	10,71	2	**

$X_{\text{mean}}=10,22$ $X_{\text{min}}=9,89$ $X_{\text{max}}=10,53$

опыта. В методе бутстрэпа доверительные интервалы для средних значений каждого варианта опыта строятся индивидуально с учетом дисперсии повторностей только данного опыта. Отсюда ясно, что в последнем случае критерий различимости результатов более тонкий. С методологической точки зрения это важно не только в количественном, но и в качественном отношении, так как сложная природа биологических объектов даже в однофакторном эксперименте может обусловить различную вариабельность разных вариантов опыта. Метод бутстрэпа позволяет выявить эти различия вариабельности, а в дисперсионном анализе они по необходимости нивелируются в силу исходного предположения о равенстве дисперсий во всех вариан-

тах опыта. Таким образом, метод бутстрэпа может оказаться ценным дополнением к классическим схемам статистической обработки результатов вегетационного опыта.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Доспехов Б. А.* Планирование полевого опыта и статистическая обработка его данных.— М.: Колос, 1972.— 2. *Душин — Барковский И. В., Смирнов Н. В.* Теория вероятностей и математическая статистика в технике.— М.: Гостехиздат,

1955.— 3. *Диаконис П., Эфрон Б.* Статистические методы с интенсивным использованием ЭВМ.— В мире науки, 1983, вып. 7, с. 60—73.— 4. *Захарова И. Г.* Влияние микроэлементов цинка, меди, молибдена и кобальта на симбиотическую фиксацию молекулярного азота атмосферы и продуктивность сои и люцерны.— Автореф. канд. дис. М., 1985.

*Статья поступила
15 апреля 1991 г.*

SUMMARY

The possibility to apply methods of mathematical statistics based on the use of computers to analyse the results of greenhouse experiments was ascertained. Bootstrap method was compared with the scheme of dispersion analysis by using the data on the effect of microelements on development of soya and alfalfa. It is shown that bootstrap method and the scheme of dispersion analysis produce comparable results with small samplings of greenhouse experiment. In some cases bootstrap is more sensitive to statistical properties of certain variants of the experiment, as it is not connected with being the data of the experiment to the standard law of distribution.