К АВТОРАМ ЖУРНАЛА «РАСТИТЕЛЬНЫЕ РЕСУРСЫ». О НЕОБХОДИМОСТИ СОБЛЮДЕНИЯ ПРАВИЛ ОКРУГЛЕНИЯ ЧИСЕЛ ПРИ ПРЕДСТАВЛЕНИИ РЕЗУЛЬТАТОВ

© ***И. Г. Зенкевич***

Практика редактирования статей, поступающих в журнал «Растительные ресурсы», показывает, что, к сожалению, заметной части из них присущи проблемы с представлением чисел, обусловленные несоблюдением правил округления результатов определений. Если единичные ошибки такого рода устранить еще относительно несложно, то необходимость исправления больших массивов табличных данных чаще всего приводит к возврату статьи авторам на доработку.

Ни в коей мере не хочу утверждать, что проблемы корректного представления результатов измерений касаются только журнала «Растительные ресурсы». Эта проблема существует во многих журналах всех стран мира. Попытка найти выход из сложившейся ситуации и обусловливает цель настоящей публикации.

Итак, в результате серии n измерений некоторой величины (x), было вычислено ее среднее значение < > и получена оценка погрешности, в качестве которой чаще всего используют стандартную ошибку S :

$$\bar{x} = \frac{\sum x_i}{n} \qquad (1)$$

$$S_{x\bar{x}} \approx \sqrt{\frac{\sum\left(\bar{x} - x_i\right)^2}{n-1}} \qquad (2)$$

Окончательный результат не просто представляют в виде < > ± , но перед этим оба числа подлежат округлению до необходимого числа значащих цифр. Значащие цифры числа – это все цифры, начиная с первой слева, отличной от нуля, до последней справа, в правильности которой нет сомнений. Значащие цифры справа могут быть нулями, например, в числе 42 две значащие цифры, в числе 42.0 – три, а в числе 42.00 – четыре. Таким образом, ***округление*** представляет собой ***отбрасывание незначащих цифр*** с правой стороны числа до некоторого разряда с возможным изменением цифр в этом разряде.

Следует обратить внимание, что в формуле для среднего арифметического значения указан знак точного равенства, тогда как в соотношении (2) – приближенного. Стандартную ошибку можно принять равным правой части формулы (2) только в пределе при n $\to \infty$ и при условии нормального симметричного распределения ошибок измерений. Естественно, что в реальных условиях число измерений не может быть чрезмерно большим, а нормальность распределения ошибок требует специальной проверки, которую проводят только в исключительных случаях. Что же касается симметричности распределения ошибок, то несложная модификация стандартной статистической обработки данных (вычисление не одного значения , а двух, независимо характеризующих разброс данных в б**о**льшую и меньшую стороны от средней величины) (Зенкевич, 1998) показывает, что большинство выборок данных, с которыми приходится иметь дело в реальной аналитической практике, асимметричны. Следовательно, при небольших значениях n уравнение (2) дает ***приближенные оценки*** стандартных ошибок и именно так к ним следует относиться.

Именно значения стандартных ошибок определяют число значащих цифр, которое необходимо оставить в окончательном представлении средней величины < > после ее округления. Если, например, стандартная ошибка некоторого числа равна 4.72, то есть в результате измерений ненадежны уже единицы, то указание в нем десятых и, тем более, сотых долей, не просто противоречит здравому смыслу, а совершенно некорректно. Стандартную ошибку в данном случае следует округлить и принять равным пяти. Можно заметить, что нет ничего противозаконного в записи стандартной ошибки, например, в виде ± 0.0; это просто означает, что его значение, меньшее 0.05, округлено до предыдущего разряда числа.

После этих ключевых утверждений можно перейти к изложению собственно правил округления результатов измерений.

1. Погрешность результата измерений указывают всего ***с одной значащей цифрой***, если первая из них равна 3 или более. ***Допускается указание двух значащих цифр*** в погрешности, если первая из них равна 1 или 2 (дополнительный комментарий: «допускается» не означает необходимо, так что одной значащей цифрой погрешности можно ограничиться во всех случаях).
2. Результат измерений ***округляют до того же разряда числа***, который соответствует либо единственному, либо второму разряду округленного значения погрешности. Если десятичная дробь оканчивается нулями, то нули обычно отбрасывают, даже если они являются значащими цифрами.
3. Если цифра старшего из отбрасываемых разрядов меньше пяти, то оставляемые цифры не изменяются. Лишние цифры в целой части чисел заменяют нулями, а в десятичных дробях отбрасывают.

4. Если цифра старшего из отбрасываемых разрядов больше или равна 5, но за ней следуют отличные от нуля цифры, то последнюю оставляемую цифру увеличивают на единицу.
5. Если отбрасываемая цифра равна 5, а следующие за ней цифры неизвестны или нули, то последнюю сохраняемую цифру числа не изменяют, если она четная и увеличивают на единицу, если она нечетная.
6. Округление чисел производят однократно, последовательное округление в несколько стадий недопустимо.
7. Любое округление неизбежно приводит к появлению добавочной погрешности результатов, поэтому ***округление производят только в окончательном ответе***. Все промежуточные вычисления принято проводить с 1–2 лишними (запасными) значащими цифрами для предотвращения накопления погрешностей, обусловленных округлением чисел.
8. Если приводимые значения представляют собой не окончательные, а промежуточные результаты, необходимые для последующих вычислений, то ***запасные значащие цифры в них должны быть сохранены обязательно***. Это относится, например, к коэффициентам регрессионных уравнений, когда результаты вычислений с применением таких уравнений подлежат округлению, а значения их коэффициентов – нет.

Итак, допустим, что в результате вычислений среднего значения и соответствующей ему стандартной ошибки получилось число 437.54 ± 4.72, которое необходимо представить в соответствии с указанными выше правилами округления. При этом ***некорректных форм*** представления этого числа ***может быть много***, тогда как ***правильная – всего одна***:

Примеры неверной записи результата	Правильный вариант
437.54 ± 4.7	
437.54 ± 5	
437.5 ± 4.72	**438 ± 5**
437.5 ± 4.7	
438 ± 4.72	
438 ± 4.7	

Если рассмотреть то же число 437.54, которое характеризуется в десять раз большей стандартной ошибкой, например 437.54 ± 47.22, то для него результат округления будет иным:

Примеры неверной записи результата	Правильный вариант
437.54 ± 47.2	**440 ± 50**
437.54 ± 47	
437.5 ± 47.22	
437.5 ± 47.2	
437.5 ± 50	
438 ± 47.22	
438 ± 47.2	
438 ± 47	
440 ± 47.22	
440 ± 47.2	
440 ± 47	

Если же стандартная ошибка возрастет еще в десять раз, например 437.54 ± 472.29, то, в полном соответствии с правилами округления, результат должен быть представлен в виде **400 ± 500**. В этом случае он становится статистически незначимым, поскольку, если стандартная ошибка превышает среднее значение, последнее должно быть приравнено нулю.

В дополнение к перечисленным выше правилам округления чисел можно указать еще одно. Результаты арифметических действий с приближенными числами не могут содержать большее количество значащих цифр, чем их минимальное количество в исходных числах, что может быть проиллюстрировано следующими примерами:

437.54 + 261 ≈ 699 (но не 698.54);

437.54 + 350 ≈ 790 (но не 787);

437.54 + 400 ≈ 800 (но не 837 или 840)

437.54 × 1.2 ≈ 530 (но не 525.05, 525.0 или 525);

437.54 / 15 ≈ 29 (но не 29.17 или 29.2);

4 / 7 ≈ 0.6 (но 4.0 / 7.0 ≈ 0.57, а 4.00 / 7.00 ≈ 0.571)

Если же значения коэффициентов не являются приближенными числами, а представляют собой точные величины (например, 2/3, π = 3.14159…, e = 2.71828…, и т.д.), то они не влияют на число значащих цифр в результатах.

Кроме того, существует правило, ограничивающее число значащих цифр в числах, в силу различных обстоятельств, приводимых без стандартных ошибок. Например, при элементном анализе органических соединений до настоящего времени принято ограничиваться всего двумя параллельными определениями, статистическая обработка которых, естественно, невозможна (главной причиной этого является трудоемкость таких определений). Результаты единичных измерений также принято указывать до первой ненадежной цифры, которую в этом случае уже нельзя выявить по значениям стандартных ошибок. В подобных случаях число значащих цифр в результатах должно быть согласовано с общими представлениями о точности (воспроизводимости) тех экспериментальных методов, с помощью которых были выполнены рассматриваемые измерения. Например, известно, что воспроизводимость измерения площадей хроматографических пиков на современных приборах имеет порядок ± 1–5 % отн. (для минорных компонентов – больше). Следовательно, ни в каком случае результаты хроматографических измерений не могут быть представлены более чем с двумя, максимум с тремя значащими цифрами. Например, содержание α-пинена в составе эфирных масел может составлять 55 %, 13.1 % или 0.34 %, но не 54.9 %, 13.11 % или 0.337 %. Это утверждение относится практически ко всем хроматографическим методам, несмотря на то, что площади пиков, регистрируемых современными устройствами обработки хроматографической информации, могут содержать 6–8 значащих цифр и для округления результатов вычислений с использованием таких данных до необходимых двух требуется известная «психологическая» подготовка. Представления о том, что чем больше значащих цифр указано в результатах, тем они точнее, относятся к удивительно распространенным, но принципиально неверны.

Настоящее краткое сообщение не предусматривает исчерпывающе полного списка литературы по рассматриваемому вопросу, но некоторые доступные источники все-таки следует указать. Математические аспекты округления чисел рассмотрены в известном справочнике (Бронштейн, Семендяев, 1986), но гораздо более информативным оказывается поиск необходимой информации в сети Интернет (можно использовать, например, Google, ключевые слова «правила округления»). Три ссылки (Ошибочная точность…, Правила округления…, Правила округления) приведены в списке литературы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Б р о н ш т е й н И. Н., С е м е н д я е в К. А. Справочник по математике для инженеров и учащихся втузов. М., 1986. С. 131.

З е н к е в и ч И. Г. Модификация параметра «стандартное отклонение» для выявления и характеристики асимметричных выборок данных. // Вестн. СПбГУ. Сер. физ.-хим. 1998. Вып. 2. С. 84–90.

О ш и б о ч н а я т о ч н о с т ь (абитуриенту на заметку). http://nauka.relis.ru/33/0203/33203024.htm (дата обращения март 2009).

П р а в и л а о к р у г л е н и я. Дистанционное обучение. http://do.rksi.ru.library/courses/chm/ch01s03.dbk (дата обращения март 2009).

П р а в и л а о к р у г л е н и я. http://www.sainfo.ru/units/info.php?t=101 (дата обращения март 2009).

Химический факультет
Санкт-Петербургского
государственного университета
izenkevich@mail15.com

Поступило 1 V 2009