

“十一五”国家重点图书
化学工程与技术丛书

化工实验设计 与数据处理

主编 曹贵平 朱中南 戴迎春



华东理工大学出版社
EAST CHINA UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY PRESS

图书在版编目(CIP)数据

化工实验设计与数据处理/曹贵平,朱中南,戴迎春主编. —上海:
华东理工大学出版社,2009.2

(化学工程与技术丛书)

ISBN 978-7-5628-2464-0

I. 化... II. 曹... III. ①化学工程—化工实验—设计②化学工程—
化工实验—数据处理 IV. TQ016

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2008)第 208545 号

“十一五”国家重点图书

化学工程与技术丛书

化工实验设计与数据处理

.....

主 编 / 曹贵平 朱中南 戴迎春

责任编辑 / 陈新征

责任校对 / 金慧娟

封面设计 / 陆丽君

出版发行 / 华东理工大学出版社

地 址:上海市梅陇路 130 号,200237

电 话:(021)64250306(营销部)

传 真:(021)64252707

网 址:www.hdlgpress.com.cn

印 刷 / 上海展强印刷有限公司

开 本 / 787mm×1092mm 1/16

印 张 / 15.25

字 数 / 346 千字

版 次 / 2009 年 2 月第 1 版

印 次 / 2009 年 2 月第 1 次

印 数 / 1—3050 册

书 号 / ISBN 978-7-5628-2464-0/TQ·138

定 价 / 39.00 元

(本书如有印装质量问题,请到出版社营销部调换。)

序

华东理工大学出版社经过长期调查研究后,决定组织编写并出版一套“化学工程与技术”学科的相关教学用丛书,多位在各自领域学有所长并对研究生培养工作有丰富经验的学者参加编写。

对于华东理工大学出版社的决定,我非常赞同。我本人是研究生毕业,从20世纪70年代末起,一直在指导研究生,包括授课及指导论文,我的主要工作都与研究生培养有关。加上报纸杂志的报道中多认为我国在研究生培养方面尚显不足,我也经常在思考如何提高研究生培养质量的问题。对此常感到有些话想说,只是没有适当的场合去说而已。因此当出版社的编辑们要我为丛书作序时,我便欣然从命,以便借此说上几句。

1. 关于教学用书(简称教材)

教材对研究生教学是重要的,好的教材显然十分有利于学生学习和掌握相关的专业知识,此外还可以作为学生在学完课程后的案头参考书。

也有一些非常优秀的教授在教学过程中不规定使用固定教材,他们在课堂上主要讲授思想和方法,或即使使用教材,讲课时也完全不局限于教材内容,然后要求学生在课后通过自学、做习题、讨论、找材料、做笔记等多种形式掌握知识。这种教学方式对于一部分学习主动、基础较好的学生,可能十分有利,但也许会使另一些学生感到困难,甚至抱怨连连。关键是看这些学生是否有克服困难,通过努力争取学习主动的决心。

2. 关于例题和习题

例题的重要性丝毫不逊于理论知识。正确的方法应是有目的地讲解例题:一个例题解决一类问题,引导多方面的思路,并培养学生举一反三的能力。

我要特别强调的是习题的作用,使学生巩固、掌握知识和运用学到的方法只是起码的要求,习题的功能应被看作是对学生潜在创造力的培养,以及在面对困难时应有的心理准备。这里说的当然不是指我们常见的这些只需稍稍复习就可以依样画瓢式的习题,而是指学生初看不知如何下手的那一类。当学生要做这类习题时他们不得不去认真复习和思考,相互讨论,查找文献,才能解答。他们会认为这些习题很“难”,但也就是这种“难”,可以培养学生的能力。

我们不是经常在说要培养学生的创新能力么?显然,单靠说是不够的。创新应成为一种习惯,它只可能日积月累,潜移默化地养成。做“难”题确实要克服不少困难,但这正好是一种对今后工作中创新能力的磨炼,也必会形成一种能解决困难问题的心理准备。这是一个师生需要共同认识的问题。对教师,有“敢”或“不敢”布置“难”题的问题;对学生,有对

“难”题迎难而上还是尽量规避的不同态度。学生遇到“难”题而又千方百计地去解答,这实际上是为将来在工作中解决“难”题做准备。

3. 关于方法论教学

教师在教学过程中应突出重点、启发式、重概念,等等,大家都已熟知。但如何具体把握教学中涉及的有限知识,上升到方法论的高度,无疑是十分重要的。

方法论者,简而言之,就是在面对一个具体问题时把所具备的知识实施并应用的理念、思想和方法。教材的性质决定了它能给予你的可能是学科的一般原理,但如何根据你所要解决的问题的具体要求,恰如其分地用好你已具备的知识,尚有相当距离。例如,我们能列举对一个过程产生影响的诸多因素,但对某一特定条件,这些因素中可能只有少数是主导的,其余的可能分别在另一些条件下起主导作用。举例来说,一个多相反应系统,如是反应速率很低的慢反应,那时相际传质可并不重要,研究工作可不必拘泥于此;反之,对于快速反应,传质可能成为控制因素,反应本身退居次要。你首先应弄清对象特点,根据你的知识,作出正确判别。这样的工作方法愈早养成愈好,而课程学习正是培养这种能力的良好机会。

4. 关于知识的交融

人们解决一个问题,常会说“用化学的知识”,或是“用物理的知识”,等等。我认为对一位训练有素的专家而言,他可能在解决问题的时候已说不清使用的是哪方面的知识,因为各种知识在他的头脑中已融为一体,不分彼此了。如果在学习某一课程时能广泛联系和思考已学过的课程和已掌握的知识,对于掌握知识和灵活地运用知识必有好处。如果不得说太远,那么在“化学工程与技术”这一学科领域内的各个分支,应尽可能去做到这种知识的交融。下面我举几方面的例子:

(1) 一个传热过程,热量从热流体经过器壁传向冷流体。如一侧的传热系数很大,另一侧的很小,在不考虑器壁热阻时要提高总传热系数,必须提高传热系数小一侧流体的传热系数,而进一步提高传热系数大一侧流体的传热系数,效果必不明显。这一例子对于学过“化工原理”的学生几乎是尽人皆知的。

(2) 设计一个由10个部件组成的产品。如在正常使用条件下其中9个部件的使用寿命为2年,一个部件为1年,则在一年后整个产品就不能使用。解决的办法应是,或把这9个2年部件降级为1年部件,或把这个1年部件用更好的工艺和材料制成2年部件,使整个产品的各部件几乎在同时报废。这一机械设计原则已成为一个设计常识。

(3) 一个连续生产流程经过一定时间运行后需要停工“检修”,进行设备清理及更换一些零部件,等等,再开始下一周期运行。在一个生产周期内,所有的生产环节必然遵循这一运行周期进行规划,催化剂也应在检修期间更换。在生产过程中催化剂会逐步失活,为弥补活性下降,通常的方法是提高反应器操作温度。然而,温度提高更促进了催化剂失活。如在运行周期内由于催化剂失活而温度提高过快,则活性损失过多,可使正常操作难以进行;如在运行周期内温度提高缓慢,在检修时催化剂虽尚有余力,但也不得不更换,这也是另一种浪费。最好的策略是规划好温度提高的序列,使催化剂能力在运行中充分发挥效能,在检修时达到催化剂的经济使用的极限。这实际上是系统学的基本议题。


上述三者涉及对象虽不同,但都说明了一个观点:系统的观点。这一观点显然在任何场

合都是适用的,尽管对象可能会有千差万别。

知识的交融需要教师的引导和学生的主动参与。应提倡对所学的各种知识和方法的细嚼慢咽,反复体会,提倡广泛联想,认真论证。现代科学,无处不体现交叉和联想。在学习中千万不应把所学课程孤立起来,在研究生学习阶段注意这一点,必能终身受益。

研究生课程可能是多数学生一生中最后的系统课程学习(博士生的课程往往很少)。学到一些专业知识,通过了考试,得到几个学分,这只是最起码的教学要求。谁都知道,多数学生的目标远非仅此而已。研究生课程的重要性绝不亚于完成论文,应十分珍惜这段时间的学习。利用课程学习更好地掌握知识,需要师生的共同努力。为此,我谨利用为本书写序的机会,奉上这几句可有可无的话,仅供使用本书的师生们参考,也希望本丛书能为同学们在掌握知识、掌握方法方面有所贡献。

中国工程院院士



前 言

过程模型化是化工过程研究和开发中重要的方法。通过模型化工作可以实现小试成果的直接放大,其中一个成功的例子是二十世纪八十年代华东理工大学所做的丁烯氧化脱氢制备丁二烯过程,通过模型化方法,由实验室小试成果一次直接实现一万倍工业装置放大。

由于其在工业过程放大中的重要作用,当时我校在研究生教学体系中增设了《化工数据处理与实验设计》这门课程。同时,朱中南教授和戴迎春教授主持编著了《化工数据处理与实验设计》课程讲义。1989年该讲义由烃加工出版社出版,在后续的教学和科研中发挥着重要的作用。但由于教材中涉及大量的数学方程,当时尚无计算机电子排版技术,其中字母、符号等编排错误较多,目前该版本教材已无出售。随着电子计算机技术的发展,汇编语言如 Fortran, Matlab 等的出现,使得原教材中采用 Algol 语言编写的程序已不再使用。在朱中南教授的主持下,在上海市研究生教育专项经费和华东理工大学研究生教育基金的资助下,编写了《数据处理与实验设计电子教材和通用软件》,2002年由中石化出版社出版,该版以计算程序软件形式体现。

化学工程学科不断与其他学科交叉,研究向介观和微观深入,很多过程现象需要借助模型化方法从理论上进行解释,更加体现该课程在学生课程体系中的重要性。

随着研究生的扩招,各高校课程体系存在一定差异,同时有一部分跨专业生源,在教学过程中深深感到急需一本教材供学生学习使用。虽然对于研究生课程是否需要使用教材,各方面持有不同的看法,但就编者而言,对于目前课时数缩减,研究生来源广泛的情况,一本合适的教材还是非常有必要的,不仅学生在课后学习有所参考,便于梳理全课程脉络,也便于教师在课堂上讲授、扩充更多信息,对于教学质量的提高将会有很好的促进。对于科研人员而言,在科研工作中有一本合适的参考书,也会有很好的帮助。

鉴于此,欣逢我校出版社着眼于高层次化工人才培养的需要,组织编写“化学工程与技术丛书”,足见其长远的眼光,将《化工实验设计与数据处理》纳入这套丛书的编写计划,因此有了读者所见的这本书。

本书的编写过程中得到方方面面的支持和帮助,鲁习文教授提出了很多的宝贵意见和建议,大连理工大学张秋明教授也对本书提出了宝贵意见和建议。在课程教学过程中,得到了研究生院的大力支持。在成稿过程中,研究生盖玉国、白伟民、崔晓怡、陶士英、孙朝阳、杨琳琳参与了稿件的文字输入、图形绘制等处理工作,在此作者一并表示

衷心的感谢。

由于学识浅薄,时间仓促,编写中难免存在不妥之处,读者在使用过程中如发现其中的错误,尚望见谅,并热忱希望不吝指正。

曹贵平
于华东理工大学徐汇校区
2009年1月

内 容 提 要

本书主要介绍了误差方差分析和区间估计、线性代数模型参数估计及方差分析方法；非线性模型参数估计及方差分析；基于线性代数模型的回归正交实验设计；基于非线性模型的序贯实验设计等内容。为便于读者在实际学习、工作中应用，在阐述过程中尽可能采用化学工程及其相关学科的专业语言，避免采用过多的纯数学语言，所列举的例子主要来自于实际科研中。

本书既可作为高等院校化工相关专业研究生和高年级本科生的教材，也可作为相关专业工程技术人员的参考书。

“十一五”国家重点图书·化学工程与技术丛书·

化学工程与技术研究生教学用书——系列书目

书名	主编
高等化工热力学	刘洪来
高等分离工程	徐南平
高等传递过程	戴于策
反应器模型化与分析	周兴贵
过程系统工程	姚平经
工业催化导论	卢冠忠
化工实验设计与数据处理	曹贵平 朱中南 戴迎春
催化剂表征	王幸宜
表面化学	包信和

目 录

绪 论	1
第 1 章 实验测定值的误差估计	4
1.1 概述	4
1.2 误差来源	4
1.3 实验误差的分类	5
1.3.1 随机误差	5
1.3.2 过失误差	8
1.3.3 系统误差	8
1.4 实验测定误差方差的估计方法	10
1.4.1 M 次重复测定样本误差方差	10
1.4.2 平行测定的方差公式	11
1.4.3 不同重复测定次数的误差方差	12
1.5 实验测定值的表示方法	13
1.5.1 误差方差已知时实验测定值的表示方法	13
1.5.2 误差方差未知时实验测定值的表示方法	14
1.6 随机误差方差的传递	15
1.6.1 线性函数误差方差的传递	16
1.6.2 非线性函数误差方差的传递	18
1.7 数值计算中应注意的问题	19
本章主要符号说明	29
第 2 章 线性代数模型的回归分析方法	30
2.1 概述	30
2.1.1 线性代数模型的特点	30
2.1.2 回归分析方法——黑箱法	35
2.2 线性代数模型参数的最小二乘估计法	37
2.3 参数估计值的数学期望和方差	40
2.3.1 最小二乘估计值 $\hat{\mathbf{b}}$ 的数学期望	40

2.3.2 最小二乘估计值 \hat{b} 的方差	40
2.4 回归方程的显著性检验	45
2.5 回归系数的显著性检验	51
2.6 逐步回归分析法	59
2.7 预测和控制	70
本章主要符号说明	74
第3章 非线性模型的参数估计方法	75
3.1 概述	75
3.2 模型通式	75
3.2.1 非线性代数模型通式	75
3.2.2 常微分模型或偏微分模型通式	77
3.3 参数估计的目标函数	80
3.3.1 最小二乘目标函数	81
3.3.2 最大似然估计	83
3.4 非线性代数模型的最小二乘估计方法	87
3.5 常微分模型参数估计方法	91
3.6 用最优化方法解决参数估计问题	94
3.6.1 最速下降法	95
3.6.2 牛顿法	99
3.6.3 单纯形法(直接搜索法)	101
3.7 参数估计的几个具体问题	105
3.8 参数估计值的置信域	107
3.9 参数估计应用举例	112
本章主要符号说明	129
第4章 回归正交实验设计	130
4.1 概述	130
4.2 一次回归正交实验设计所处理的模型	130
4.3 一次回归正交实验设计的基本思想	133
4.4 一次回归正交实验设计步骤	136
4.4.1 实验条件变量的线性变换	136
4.4.2 选择适当的二水平正交表	137
4.4.3 回归计算与方差分析	141
4.4.4 一次回归方程的线性检验	146
4.5 一次回归正交实验设计的应用	147
4.6 二次回归正交实验设计	153

4.6.1 二次回归正交实验设计所处理的模型	153
4.6.2 组合实验设计	153
4.6.3 二次回归正交实验设计的正交性	156
4.7 二次回归正交实验设计步骤	160
4.8 二次回归正交实验设计举例	164
4.9 梯度寻优	169
本章主要符号说明	184
第5章 序贯实验设计	185
5.1 概述	185
5.2 参数估计的序贯实验设计	189
5.3 参数估计的序贯实验设计举例	194
5.4 模型筛选的序贯实验设计	200
5.5 模型筛选的序贯实验设计举例	205
本章主要符号说明	210
参考文献	211
附 录	212

绪 论

最近的 10 多年来,化学工程在学科上不断与其他学科交叉、融合,在研究尺度上,不断由宏观尺度向介观和微观尺度深入,取得了一系列重大的成果。很多工作需要借助大型精密仪器的辅助,测试成本越来越高。如何通过少量的测试即可获得大量有用的信息是研究者最为关心的,因此,需要有合理、有效的实验设计方法来指导科研工作。同时,模型化方法作为化学工程学科研究工作中重要的方法,其作用显得更加重要,通过过程数学模型,可以从理论上回答实验中发现的现象。模型参数的获得和模型参数的精确度是模型化工作中的关键问题,主要依赖于实验数据的准确性和实验点的合理布置,前者依赖于测试仪器的精密程度,后者则依赖于合理的实验设计方法。

在化学工程及其相关学科的人才培养过程中,科学的课程体系的设置显得尤为重要。虽然化学工程学科的科研工作由宏观走向介观和微观,实际生产中大宗化学品主要由大型企业来完成,中小企业转向精细化学品、特种化学品的生产,但化学工程的基础知识和基本方法依然发挥着非常重要的作用(Cussler E L, Moggridge G D. *Chemical Product Design*. New York: Cambridge University Press, 2001.)。对于化学工程及其相关学科的大学生、研究生来说,其课程可以分为几个层次。一是基础知识,这些知识包括“高等数学”、“普通物理”、“普通化学”、“无机化学”、“有机化学”和“分析化学”,一般在大学一、二年级完成。二是专业基础知识,这些知识主要通过“物理化学”、“化工原理”等课程的学习来获得,一般在大学二、三年级完成。三是专业知识,主要有“化学反应工程”、“传递原理”、“化工热力学”等课程,一般在大三、大四和研究生一年级完成。“化学反应工程”回答化学反应中的动力学问题及其各类反应器原理和特征。“传递原理”回答在化工过程中在有、无化学反应存在时物质的传递、热量的传递的基本原理。“化工热力学”则从热力学角度回答化工过程中发生的各种平衡问题和相行为。四是稍高层次的知识,比前三者要专、深,也可以说是第三层次课程的进一步运用,一般在大四和研究生阶段完成。这些知识包括“分离工程”、“化工流体力学”等。“分离工程”主要以化工热力学为基础,利用化工热力学知识来解决物质的分离及其分离方法,如精馏、吸收、萃取、干燥、吸附、结晶,无不用到化工热力学的知识,当然,一些新分离技术的出现,如膜分离、分子精馏、超滤、反渗透等,除需要借助其他专业知识外,依然需要化工热力学知识。化工流体力学则主要解决各类流体设备中流体的流动。流动的流体是物料输送的前提,是各类反应器、分离设备中进行传质和传热的基础。

以上各个层次课程,特别是第三、第四层次课程中,无不时刻与数学模型息息相关。换言之,数学模型作为基本方法支撑着这些课程。化学反应工程中的化学动力学模型,各种化学反应器模型等均需要借助于数学模型来进行分析。传递原理、化工热力学则几乎是借助于各种类型的数学方程来解析其原理。因此,为了更好地学习化学工程及其相关学科的课程,这些专业的学生需要具备良好的数学知识,如数理统计、线性代数、矩阵理论、微分方程

方法、最优化方法等,需要掌握化工实验设计与数据处理方法,以便对各类模型方程有很好的理解和运用。然而,我们在教学过程中发现,由于学生专业的不同,研究生生源不同,各专业、各大学课程体系设置不尽相同,并非所有学生都具备良好的数学基础。本教材试图解决这一问题,让尚不完全具备上述基础知识的学生或工作人员能够在学习、工作中掌握实验设计方法和数学模型方法的实际应用,让具备上述数学知识的学生或工作人员能够更好地促进其学习或工作。

从另外一个角度看,以上所说的模型不管形式多么复杂,但都包含三个要素,即:自变量、因变量和模型参数。对于机理模型或半经验模型,因变量与自变量之间的函数关系是对过程机理、特征分析得到的,模型参数则表达了或部分表达了过程的本质,具有明确的物理意义或具有一定的物理意义。对于经验模型,则将过程视为“黑箱”,建立因变量与自变量之间的多项式关系,其中亦包含了模型参数,这些模型参数一般没有明确的物理意义,但却是非常有用的,如凝胶渗透色谱中的标准曲线是分子量与流出时间之间的多项式,通过该多项式测得的试剂样品中的流出时间即可得到分子量及其分布,然后依据 Mark-Howink 方程即可得实际聚合物样品的分子量及其分布。不管是机理模型还是经验模型,模型参数的获得都是基于实验的,实验的精度、实验点在其自变量空间的布置直接影响到模型参数的精度。学生在其毕业论文工作中,在今后的科研工作中,乃至企业生产中需要掌握实验设计方法和数据处理方法。

在近 20 年内,化学工业中无论是大型装置还是小型精细化学品的生产装置,对其自动化控制程度都提出了很高的要求,以便稳定、高效地生产出产品。化工装置的复杂自动化要求有机器人、遥感装置、自适应控制系统。这些意味着需要将表征化工过程特征的数学模型引入控制系统,以此实现自动化控制、稳定化生产、降低生产成本。可以说,理论模型运用得越好,自动控制程度则越高。显然,大型工业装置的自适应装置所要求的快速、精确模型,不仅取决于实验数据的精度,还取决于自变量在其空间的布置。合理的布点,可以大幅度提高模型参数的估计的精度,而且可以消除模型参数之间的相关性。

在实验设计方法中,主要有正交实验设计、均匀实验设计、回归正交实验设计、序贯实验设计等。正交实验设计、均匀实验设计主要针对自变量范围已给定的情况下的实验设计,可以大大地减少实验工作量,特别是均匀实验设计在自变量数目多的时候更显出其减少实验工作量的优势,然而当用于过程优化时,由于自变量范围已经给定,得到的最优点往往落在自变量的上限或下限上,使得优化工作需要重新进行。

回归正交实验设计是基于线性代数模型的实验设计方法,可以大幅度减少实验工作量,提高模型参数的估计精度,消除模型参数的相关性,在用于过程优化时可快速获得最优域,且不受自变量区间限制。

序贯实验设计是基于非线性模型的实验设计方法,同样可大幅度减少实验工作量,提高模型参数的精度,由于机理模型的参数具有明显的物理意义,因此得到高精度的模型参数可有效地解释实验现象,对于可能同时存在的多个模型可以进行有效地筛选。

由于正交实验设计、均匀实验设计方法都有相应的著作进行论述,本教材不再重复这部分内容,本教材主要阐述:线性代数模型参数估计及方差分析方法;基于线性代数模型的回

归正交实验设计;非线性模型参数估计及方差分析;基于非线性模型的序贯实验设计。在阐述上述内容时,离不开实验数据,凡实验都存在误差,因此在本教材第1章用一定的篇幅介绍误差方差分析和区间估计。为便于读者在实际学习、工作中应用,在阐述过程中尽可能采用化学工程及其相关学科的专业语言,避免采用过多的纯数学语言,所列举的例子主要来自于实际科研中。

本教材注重实际应用,虽然涉及诸多的数学基础知识,但在学习过程中读者可将主要注意力放在教材所涉及的各种方法的具体应用上,即重在掌握各种方法的基本原理,具体步骤以及如何灵活应用。

第 1 章 实验测定值的误差估计

1.1 概述

化工数学模型的建立主要基于实验所取得的实验数据。数学模型参数值的准确度以及模型能否便于鉴别,与实验测定值的误差密切相关。为了估计模型参数和鉴别模型,需要估计测定量的误差。反之,为了使模型参数估计值达到一定的准确度,便于模型鉴别,又对测定量的误差提出了一定的要求。为此,需要根据误差理论确定合理的测定方案,选择相应精度的仪器、仪表等。

任何实验测定值均存在误差,实验误差总存在于一切科学实验之中,它是普遍、客观存在的。研究误差的目的并非是将误差减小到不能再小的程度,而是将实验误差从实验数据中剥离下来,通过实验数据的分析,得出过程的本质规律以及预测目标值可能波动的范围,换言之,研究误差是为了减小或消除误差对规律认识的干扰。唯如此,只要误差不影响研究者科学地作出结论,即使误差较大的实验数据也是可以接受的,无需去无谓地减小实验误差。

同时,研究实验测定值也是为了预测。一般说来,实验误差越大,与结果值相对应的预测值的范围就越宽。诚然,小的误差能使研究结果具有更大的意义,往往能排除多个不同假设中的某一个,使之趋近正确的结论。

1.2 误差来源

过程模型化过程中,误差是不可避免的。引起误差的原因很多,主要有以下几种。

模型误差

数学模型只是对实际问题的一种近似描述,因而它与实际问题之间必然存在误差,这种误差称为“模型误差”。

实验误差

数学模型中总包含一些变量,它们的值往往是由实验观测得到的。实验观测是不可能绝对准确的,由此产生的误差称为“实验误差”。

截断误差

一般数学问题常常难以求出精确解,需要简化为较易求解的问题,以简化问题的解作为原问题的解的近似,这样由于简化问题所引起的误差称为“方法误差”,或称“截断误差”,如:

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \dots + \frac{(-1)^n x^{2n}}{(2n)!} + \dots \quad (1-1)$$

当 $|x|$ 很小时,可以用 $1 - x^2/2$ 作为 $\cos x$ 近似值。由交错级数收敛的 Leibniz 准则,它的截断误差的绝对值不超过 $x^4/24$ 。

舍入误差

在计算过程中往往要对数字进行舍入,如受机器字长的限制,无穷小数和位数很多的数必须舍入成一定的位数,这样产生的误差称为“舍入误差”。

1.3 实验误差的分类

若令被测物理量的客观真值为 y^* , 测定值为 y , 则实验测定值的绝对误差 $\delta \equiv y - y^*$, 相对误差 $e \equiv \delta/y^*$ 。由于真值在一般情况下是未知的, 所以, 常用最大绝对误差表达实验误差大小, 或用 $e = \delta/y$ 作为相对误差的近似值, 当有多次重复测量值时, 可用平均值 \bar{y} 来近似代替真值 y^* , 则 $e = \delta/\bar{y}$ 。产生误差的原因是极其复杂的, 不同的因素导致误差的性质也不同。实验误差按其性质可分为三大类: 随机误差, 过失误差(粗差)和系统误差。

1.3.1 随机误差

在相同的实验条件下, 多次测定同一物理量时, 误差绝对值时大时小, 符号时正时负, 这类误差称为随机误差。随机误差因其产生原因不详, 也就无法控制, 不能从实验中消除。它的特点是单个测定无规律性, 而多次重复测定可减小误差。尽管它无法控制, 不能消除, 但服从统计规律, 可以估计随机误差的大小。随机误差可以表示为

$$\delta_j = y_j - \bar{y} \quad (1-2)$$

讨论随机误差特性之前, 先来观察一组实验数据, 见表 1-1。这是对某一已知含量(真值)为 3.01 mg/g 的矿物进行 150 次测定, 并将其数据按间隔 $\Delta x_1 = 0.01$ 分成 14 个区间, 计算落在各个区间内的次数和频率。

表 1-1 某矿物含量测定的实验数据表

区间序号 j	中心值 $y_j / (\text{mg} \cdot \text{g}^{-1})$	误差 $\delta_j / (\text{mg} \cdot \text{g}^{-1})$	次数 n_j	频率 $n_j/M / (\%)$
1	2.95	-0.06	4	8/3
2	2.96	-0.05	6	4
3	2.97	-0.04	6	4
4	2.98	-0.03	11	22/3
5	2.99	-0.02	14	28/3
6	3.00	-0.01	20	40/3
7	3.01	0.00	24	16
8	3.02	0.01	17	34/3
9	3.03	0.02	12	8
10	3.04	0.03	12	8
11	3.05	0.04	10	20/3
12	3.06	0.05	8	16/3
13	3.07	0.06	4	8/3
14	3.08	0.07	2	4/3

从上述数据中可以总结出随机误差有一定的规律性。