

化工数据处理

江 体 乾 编著

化 学 工 业 出 版 社

87.16
188
C-2

芝4丰

化工数据处理

江 体 乾 编著

化学工业出版社

化工数据处理

江 体 乾 编著

化学工业出版社出版

(北京和平里七区十六号楼)

化学工业出版社印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行

开本 $787 \times 1092^{1/32}$ 印张 $19^{1/4}$ 字数438千字印数1-11,000

1984年4月北京第1版1984年4月北京第1次印刷

统一书号15063·3536定价1.95元

本书是一本为化学、化工实验研究工作者编写的参考用书。书中首先系统地介绍了误差理论以及数据分析，在此基础上叙述了建立数学模型时行之有效的图解法、最小二乘法、回归分析法、最优化等方法，并适当介绍了序贯实验设计等内容。书中对每种方法，手算与电算并重，均有例题说明，并且全部算法均附有以ALGOL系统719语言编写的源程序以及使用时的调用程序，以供应用。所有计算机程序均已经过试算。全书共举例一百多个，其中除算法举例外，每章均有结合化工实际的用例若干。

本书适宜作为化学、化工、冶金、轻工、食品、制药、生化、石油、炼焦、材料、热物理、能源等各专业的研究生和大学的教学用书或参考用书，对作学位论文和毕业论文的学生尤为合适。也可供有关的研究所、院以及工厂实验室的研究工作者参考。

主 要 符 号 表

- A——面积, 度量的量
- a——数据, 正态分布的数学期望, 加速度
- C——常系数, 浓度, 热容, 溶解度
- D——扩散系数, 气泡直径
- D——雅可比矩阵
- d——管径, 偏差
- E——活化能, 辐射能量
- F——力, 分布函数, 统计量, 中位秩
- f——力, 摩擦阻力系数
- g——重力加速度
- g——梯度向量
- H——传播后的精确度指标, 亨利常数
- b——精确度指标, 区间长度, 高度
- h——微分模型中观察变量 y 的已知函数形式向量
- K——传质总系数, 比例常数, 稠度系数
- k——传质分系数, 导热系数, 反应速率常数
- k——模型中参数列向量
- L——似然函数
- l——长度, 范围误差
- M——数学期望, 分子量, 数目字 (自然数)
- m——质量、观察变量维数, 竞争模型个数
- N——数据点数
- n——流变指数, 自由度, 自变量维数
- P——概率, 总压力

- P**——参数协方差矩阵
P——基本单位, 分压, 点, 参数维数
Q——剩余平方和, 导出量, 物理量
Q——加权矩阵
q——流体速率
R——气体常数, 复相关系数, 反应速率, 余项
r——相关系数
S——和, 传播后的均方误差
s——剩余均方差
T——温度
t——时间, 学生分布, 微分模型中的自变量
U——回归平方和
u——流体流动速度
V——体积, 变量
V——实验误差协方差矩阵
v——光点速度, 简单物理量
W——重量
w—— x 的一个多项式
X——真值, 变量
x——自变量
x——状态变量列向量
y——因变量或函数
y——观察变量列向量
z——引入的新变量或函数

希腊字母

- α** ——信度, 传热膜系数
 β ——指数
 γ ——或然误差或概差
 Γ ——传播后的或然误差

δ ——残差, 偏差

ϵ ——相对误差, 粗糙度

ϵ ——误差列向量

η ——观察变量模型计算值的列向量

λ ——摩擦阻力系数, 偶然误差

Λ ——敏感性系数矩阵

μ ——流体粘度

ν ——流体动力粘度

π ——无因次数群或准数

ρ ——流体密度

σ ——均方误差或标准误差, 均方差或标准差, 流体表面张力

ϕ ——代表数字“10”

χ^2 —— χ^2 分布

ω ——权或权函数

下标

$i, j, k, l, h, n, q, r, s$

——序号, 次

x, y, z

——坐标序号

d ——分散相的

f ——料液的

g ——气体的

L ——液体的

m ——平均的

o ——小孔的, 原来的

p ——定压的

psu ——拟塑性流体的

T ——温度的

V ——容积的

无因次准数

Eu——欧拉准数, $\frac{\Delta p}{\rho u^2}$

Nu——努塞特准数, $\frac{al}{k}$

Pr——普兰特准数, $\frac{C_p \mu}{k}$

Sc——希密特准数, $\frac{\mu}{\rho D}$

Sh——休伍德准数, $\frac{kl}{D}$

Fr——弗鲁德准数, $\frac{u^2}{gl}$

Re——雷诺准数, $\frac{du\rho}{\mu}$

Re*——广义雷诺准数, $\frac{d^n u^{2-n} \rho}{\mu_{\text{pau}}}$

We——韦伯准数, $\frac{\rho du^2}{\sigma}$

序

本书是在原编“化工实验数据处理方法”讲义的基础上改编而成的。此次改编除保留手算方法外，又将所介绍过的整理实验数据方法，经收集、整理和编制，均配上以 ALGOL 系统 719 语言编写的电子计算机源程序，并且所有这些程序均经试算过，配有算例以及调用程序，以供初学电子计算机的研究人员参考。

编写本书的目的是企图解决化学工程研究中实验数据的误差分析、整理数据以及建立数学模型时所常遇到的困难问题。这些问题在现有的教科书中分散在各处，没有一个系统的叙述，因而使初次接触实验的研究人员不能形成一个统一的概念，他们往往对数据误差不重视、不分析，以致整理数据时有时将准确度扩大到不应有的程度，有时又将实验时辛辛苦苦保持的准确度损失殆尽。很好地解决这些问题，对做毕业论文的各类研究生、大学生以及研究人员是非常重要的。否则，必将事倍功半，甚至掘井九仞，功亏一篑，得不到正确的结果。

因此，本书的内容可概括为预备知识、实验数据的误差理论和误差分析、化工实验数据的拟合方法以及实验设计几大部份。第一章数学模型的来源、第二章概率论及数理统计基本知识以及第五章插值法等构成了第一部份的内容。第三章化工实验数据的误差分析、第四章化工实验精确度的评定构成了第二部份的内容。第六章实验结果的图示法、第七章由实验数据求数学模型是本书的中心，围绕这个中心又必然出现第八章用最

小二乘法拟合实验数据、第九章实验数据的回归分析法、第十章切比雪夫曲线拟合以及第十一章非线性代数模型和常微分模型的参数估计，以确立数学模型。最后，在第十二章中还适当介绍了近年来行之有效的序贯实验设计方法。

在编写过程中承朱中南、戴迎春两同志执笔编写了第十一章及第十二章，对本书增色不少；又承徐伟成教授、吴乙申、黄德成副教授、俞钟铭、张兆奎讲师替编者审阅了部分文稿，提出了宝贵的意见，使本书的质量得以提高；编者对他们均十分感谢。除此之外，对在本书编写过程中所参考的文献的作者或单位均一并致以深切的谢意。

由于编者水平有限，缺点错误在所难免，如蒙赐教，则不胜感谢！

江体乾

1981年5月于上海

目 录

主要符号表

序

第一章 数学模型的来源	1
1-1 引言	1
第一节 数学模型的建立	2
1-2 建立数学模型的通则	2
1-3 局部方程和限定容积的选择	7
第二节 因次分析	10
1-4 数学描述中因次的一致性	10
1-5 π 定理的证明及讨论	15
1-6 准数及准数方程	22
1-7 因次分析的简单估价	30
第三节 实验研究法的重要性	31
1-8 实验在求取化工过程数学模型中的作用	31
参考文献	32
第二章 概率论及数理统计基本知识	33
2-1 引言	33
第一节 概率论基础	33
2-2 概率论的基本概念和定理	33
2-3 随机变量的数字特征——数学期望和方差	40
2-4 正态分布	48
第二节 统计分析	53
2-5 信度、差异显著性、自由度	53
2-6 参数估计及假设检验	58

2-7 χ^2 分布、F分布和t分布	62
2-8 χ^2 分布、F分布和t分布在假设检验中的应用举例	66
参考文献	72
第三章 化工实验数据的误差分析	73
3-1 引言	73
第一节 实验数据中误差的分类和来源	74
3-2 误差的基本定义	74
3-3 误差的分类和来源	78
3-4 真值与平均值	81
3-5 误差的表示法	85
第二节 有效数字、近似值及其在简单运算中的误差	86
3-6 有效数字及其计算规则	86
3-7 近似值及其在简单运算中的误差	90
3-8 算术平均值与均方误差的简便计算	97
第三节 化工实验数据的误差理论	102
3-9 误差理论的基本问题	102
3-10 实验的计算误差与实际误差	115
3-11 误差分析在科学研究中的重要性	115
参考文献	118
第四章 化工实验精确度的评定	119
4-1 引言	119
第一节 高斯误差分布定理	122
4-2 偶然误差的正态分布	122
4-3 测定值的最优概值	129
4-4 精确度指标h与均方误差 σ	132
4-5 有限测定次数时精确度指标h与均方误差 σ 的计算	133
第二节 最大可能误差、或然误差、算术平均值精确度的评价	135
4-6 最大可能误差	135
4-7 或然误差 P	137

4-8	算术平均值的精确度	139
4-9	整理实验数据举例	141
4-10	误差分析在科学研究中的作用	145
第三节	非等精确度测定值的处理	147
4-11	不等权实验数据的平均值	147
4-12	不等权观测值平均值的误差	153
第四节	均方误差、或然误差的传播与数据的取舍	155
4-13	均方误差、或然误差的传播	155
4-14	异常数据的取舍标准	160
	参考文献	166
第五章	插值法	167
5-1	引言	167
第一节	线性插值	168
5-2	线性插值	168
第二节	拉格朗日插值多项式	169
5-3	拉格朗日插值多项式	169
5-4	拉格朗日插值多项式余项的估计	172
5-5	一元拉格朗日插值过程及算例	174
5-6	差商插值多项式	179
5-7	二元拉格朗日插值多项式	183
5-8	二元三点插值过程及算例	187
第三节	埃尔米特插值多项式	190
5-9	埃尔米特插值多项式	190
5-10	两个相邻结点的埃尔米特插值多项式程序及算例	194
第四节	样条插值	196
5-11	样条插值	196
5-12	三次样条函数插值过程	203
5-13	二元三次样条插值过程及算例	206
第五节	插值法在化工上的应用	210
5-14	插值法在化工上的应用举例	210

参考文献	217
第六章 实验结果的图示法	218
6-1 引言	218
第一节 列表表示法	218
6-2 实验数据的初步整理	218
6-3 表中数据的内插与外推法	220
第二节 实验曲线的绘制	224
6-4 作图的方法	224
6-5 坐标轴上的数据和标题	236
6-6 坐标纸的选择	239
第三节 图解平滑	248
6-7 从图上进行平滑	248
参考文献	248
第七章 由实验数据求数学模型	249
7-1 引言	249
第一节 数学模型的来源与选择	250
7-2 数学模型的来源	250
7-3 多项式模型的差分检验	255
7-4 模型的选择——直线化方法	269
7-5 某些函数的典型图形及用例	272
第二节 求定数学模型中系数的方法	279
7-6 用图解法求定系数	279
7-7 用平均值法求定系数	286
7-8 用最小二乘法求定系数	292
7-9 用回归分析法求定系数	296
7-10 各法的比较与选择	300
第三节 数学模型在化学工程研究中应用举例	304
7-11 传质准数方程中常数的求定举例	304
参考文献	314
第八章 用最小二乘法拟合化工实验数据	315

8-1 引言	315
第一节 最小二乘法的数学原理	217
8-2 最小二乘法的基本原理	317
8-3 最小二乘法的数学描述	319
第二节 最小二乘法的运算及误差	325
8-4 基本运算步骤及例题	325
8-5 正规方程的验算	330
8-6 最小二乘法结果的误差	331
第三节 最小二乘法如何在电子计算机上实现	332
8-7 线性代数方程组解法简介	332
8-8 最小二乘法的程序	342
8-9 化工应用举例	346
第四节 最小二乘法的另一个应用	356
8-10 实验数据的平滑化	356
参考文献	366
第九章 实验数据的回归分析法	368
9-1 引言	368
第一节 一元线性回归	369
9-2 回归直线的求法	369
9-3 相关系数及其显著性检验	375
9-4 回归方程的方差分析	378
9-5 可化为线性回归举例	381
第二节 多元线性回归	384
9-6 多元线性回归方程的求法	384
9-7 多元线性回归方程显著性检验	391
9-8 复相关系数与偏相关系数	393
9-9 非线性相关	394
9-10 多元线性回归计算程序介绍	396
第三节 逐次回归分析	401
9-11 “最优”回归方程及其选择	401

9-12	逐次回归的技巧和安排	402
9-13	逐次回归的计算步骤和框图	407
9-14	逐次回归的计算程序和使用说明	409
9-15	化工应用实例	417
	参考文献	436
第十章	切比雪夫曲线拟合及其他	438
10-1	引言	438
第一节	正交多项式最小二乘曲线拟合	439
10-2	正交多项式	439
10-3	正交多项式拟合原理	444
10-4	最小二乘曲线拟合过程、使用说明及算例	446
第二节	切比雪夫曲线拟合	457
10-5	切比雪夫最优拟合多项式概念	457
10-6	切比雪夫曲线拟合算法	462
10-7	切比雪夫拟合过程、使用说明及算例	466
第三节	用多元函数求极值法确定模型中的参数	472
10-8	用多元函数求极值法确定模型中的参数及其在化工上的应用	472
	参考文献	482
第十一章	非线性代数模型和常微分模型的参数估计	483
11-1	引言	483
第一节	参数估计的判别方法	485
11-2	非线性最小二乘估计法	488
11-3	极大似然估计法	491
第二节	非线性代数模型参数估计的算法	496
11-4	用最优化方法进行参数估计	496
11-5	非线性最小二乘法	501
11-6	非线性代数模型参数估计举例	506
第三节	常微分模型参数估计的算法	514
11-7	概述	514

11-8	最速下降法	516
11-9	高斯-牛顿法	520
11-10	拟线性化法	523
11-11	常微分模型算法举例	529
11-12	参数估计的几个具体问题	535
	参考文献	537
第十二章	序贯实验设计	538
12-1	引言	538
第一节	实验设计与序贯实验设计	539
12-2	实验设计的重要性	539
12-3	序贯实验设计的思想与特点	540
第二节	参数估计序贯实验设计	542
12-4	参数估计值的精确性及其影响因素	542
12-5	协方差矩阵 P 的计算	548
12-6	参数估计的序贯实验设计	554
12-7	参数估计序贯实验设计应用举例	558
第三节	模型鉴别的序贯实验设计	564
12-8	传统的模型鉴别方法	564
12-9	模型鉴别序贯实验设计判别式	567
12-10	终止准则及模型鉴别序贯实验设计步骤	571
12-11	模型鉴别序贯实验设计应用举例	576
	参考文献	582
附录 I	高斯定律的推导	583
附录 II	相关系数检验表	587
附录 III	概率积分表	587
附录 IV	χ^2 分布的临界值表	589
附录 V	t 分布的临界值表	590
附录 VI	F 分布的临界值表(信度为0.05, 0.01)	592
附录 VII	公式的图形及其直线化方法	593