实验数据的处理方法

- 列表法
- 图示法
- 回归分析法

在化工原理实验数据处理中，常用的三种表达方式

列表法

将实验数据列成表格以表示各变量间的关系。这通常是数据整理的第一步，为标绘曲线图或整理成方程式打下基础。

图示法

将实验数据在坐标纸上绘成曲线，直观而清晰地表达出个变量之间的相互关系，分析极值点、转折点、变化率及其他特性，便于比较，还可以根据曲线求出相应的方程式；某些精确的图形还可以用于不知数学表达式的情况下进行图解积分和微分。

回归分析法

利用最小二乘法对实验数据进行统计处理得出最大限度符合实验数据的拟合方程式，并判定拟合方程式的有效性，这种拟合方程式有利于用计算机应用。

实验数据的列表法

将实验直接测定的一组数据，或根据测量值计算得到的一组数据，按照其自变量和因变量的关系以一定的顺序列出数据表，即为列表法。在拟定记录表格时应注意的下列问题：

- 测量单位应在名称栏中标明，不要和数据写在一起。
- 同一直列的数据必须真实地反映仪表的精确度。即数字写法应注意有效数字的位数，每行之间的小数点对齐。
- 对于数量级很大或很小的数，在名称栏中乘以适当的倍数。例如Re =25000，用科学记数法表示Re=2.5×10^4。列表时，项目名称写为：$Re\times10^{-4}$，数据表中数字则写为2.5。
- 整理数据时，应尽可能将一些计算中始终不变的物理量归纳为常数，避免重复计算。
- 在记录表格下边，要求附以计算示例，表明各项之间的关系，以便于阅读或进行校核。

实验数据的图示法

- 上述列表法，一般难见到数据的规律性。故常常需要将实验结果用图形表示出来。
- 过程中应遵循一些基本原则，否则得不到预期结果，甚至会导致错误的结论。
- 下面是一些作图的基本原则：

1、坐标纸的选择

根据变量间的函数关系，选定一种坐标纸：直角坐标纸，半对数坐标纸和双对数坐标纸等。

➔符合方程式 $y=kx+b$的数据，在直角坐标系上是一条直线。

➔符合方程式 $y=k^{ax}$ 的数据，在半对数坐标系上是一条直线。

➔符合方程式 $y=ax^{m}$ 的数据，在双对数坐标系上是一条直线。

➔当变量多于两个时，如$y=f(x,z)$，在作图时，先固定一个变量，例如使z 固定，求出y—x关系，这样可得每个z 值下的一组图线。

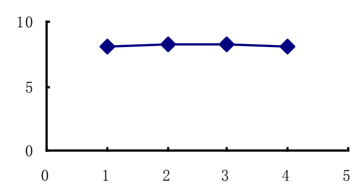
➔例如在作填料吸收塔的流体力学特性测定时，就是采用此标绘方法，即相应于各喷淋量L，在双对数坐标纸上标出空塔流速u 和填料层压降Δp的关系图线。

2. 坐标分度

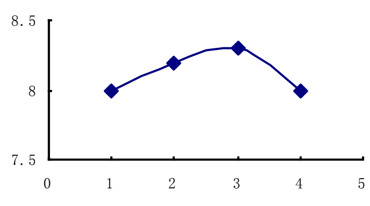
习惯上，一般取独立变量为 x 轴，因变量为y 轴，在两轴侧要标明变量名称，符号和单位。

- 坐标分度的选择，要反映出实验数据的有效数字位数，即与被标的数值精度一致，分度的选择还应使数据容易读取。
- 坐标的比例尺选择不当，会使图形失真，有时甚至会掩盖一些实验的真实情况。例如：某组实验数据为：

x	1.0	2.0	3.0	4.0
y	8.0	8.2	8.3	8.0



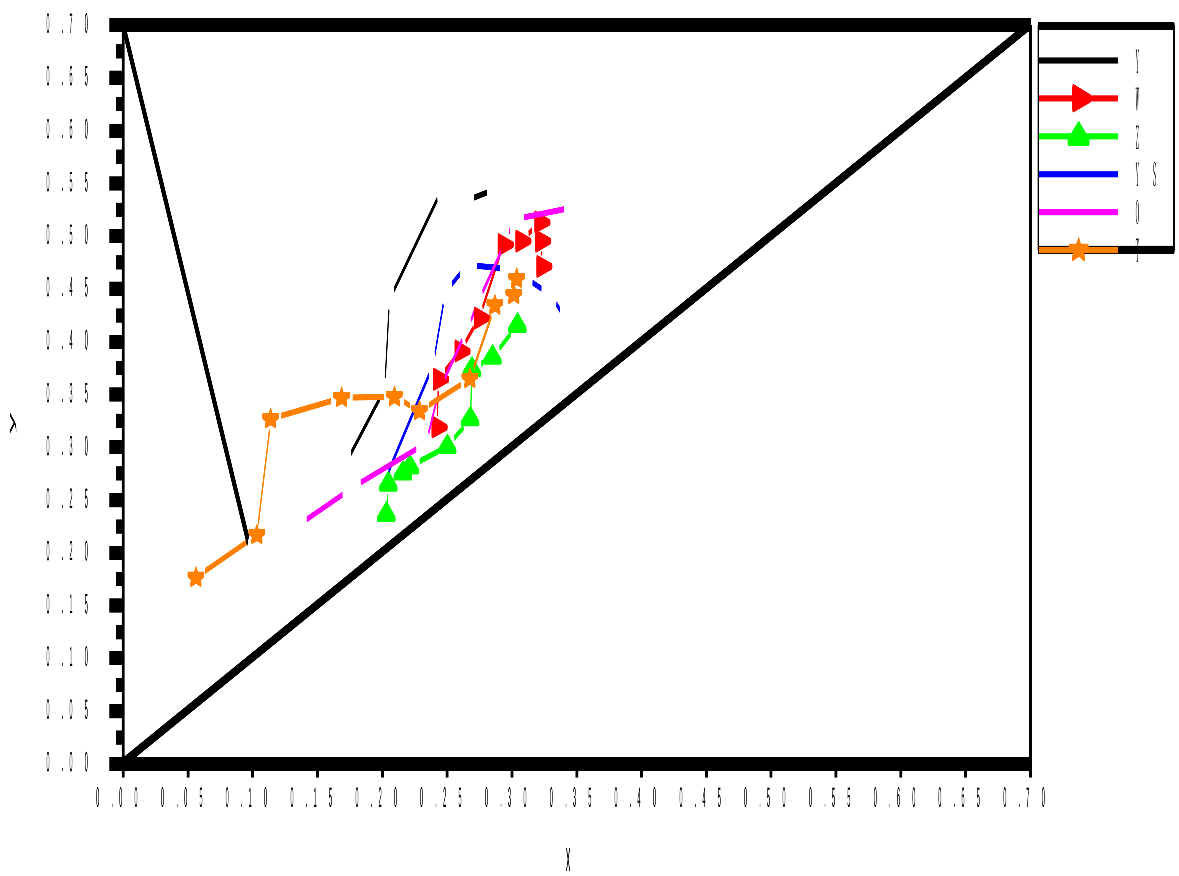
(a)



(b)

- 分度值不一定从零开始，以使所得图形能占满全幅坐标纸，匀称居中，避免图形偏于一侧。

3. 在一张坐标纸上，同时标绘几组测量值或计算数据，用不同符号（如:■, ▲, ●，*等）加以区别。



4．对数标绘

◆对数坐标轴上的值是真数。

◆对数坐标原点为$x=1, y=1$，而不是零。

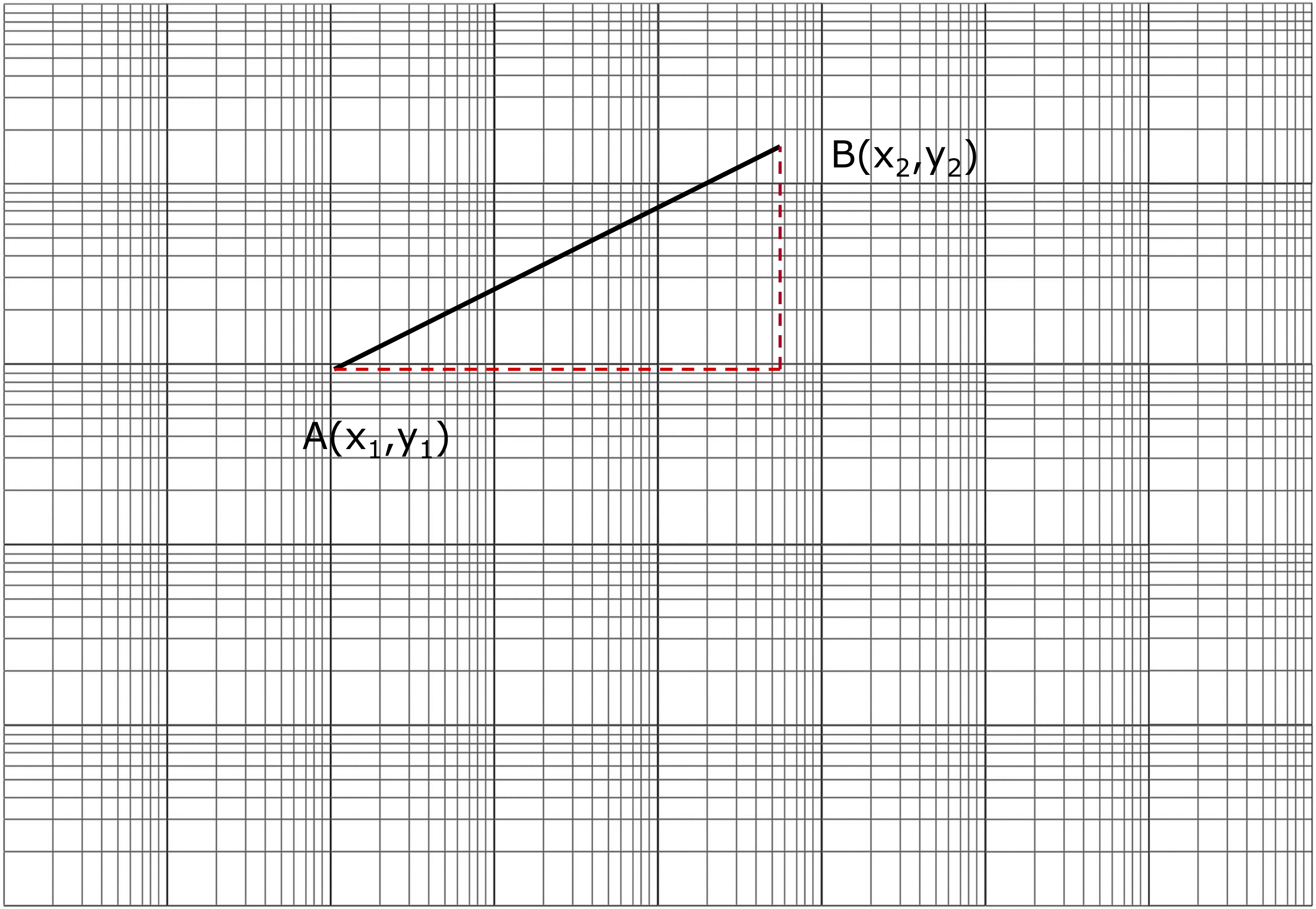
◆由于 0.01,0.1,1,10,100等数的对数，分别为-2,-1,0,1,2等，所以在对数坐标纸上，每一数量级的距离是相等的。

对数表

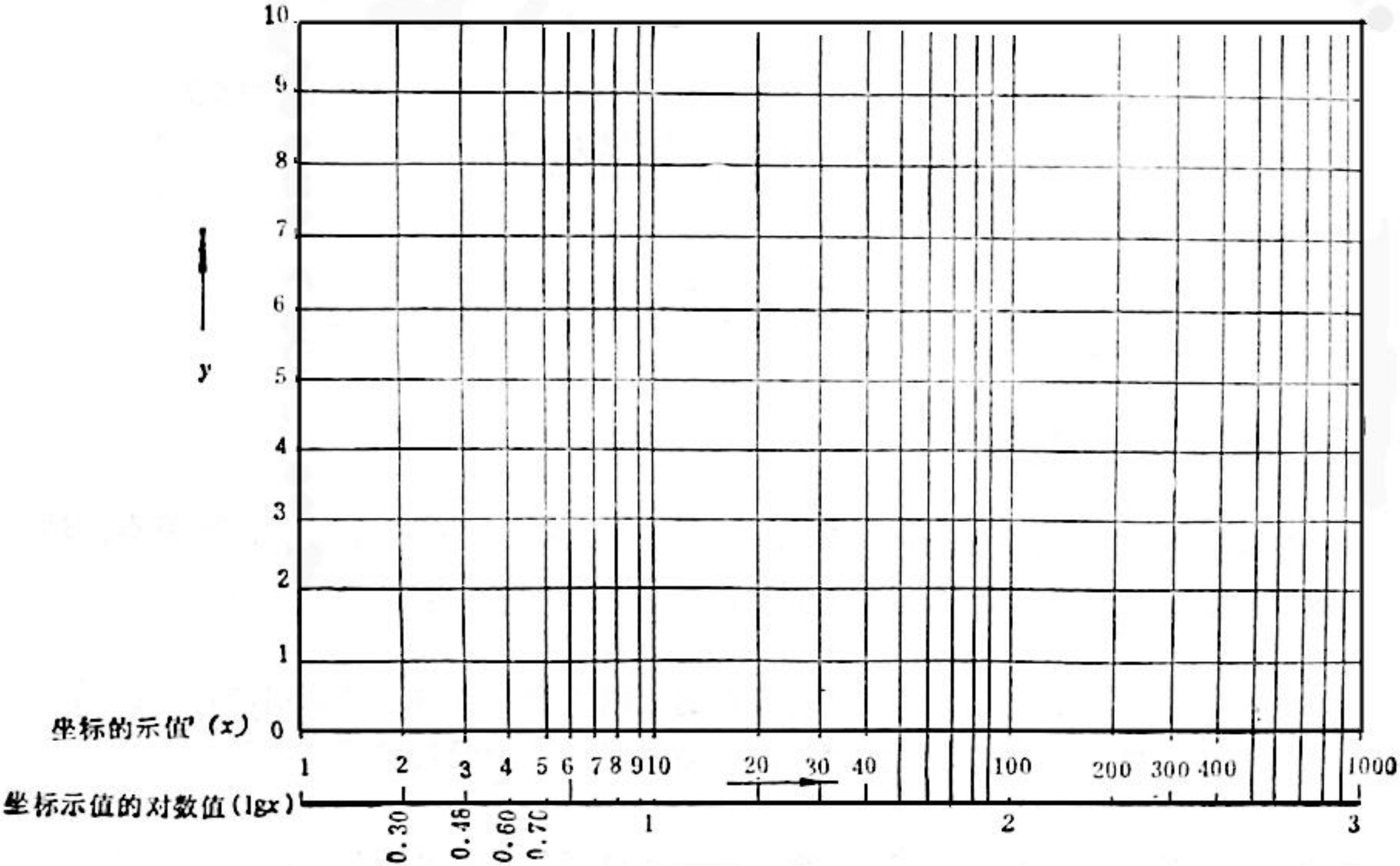
lg1	lg2	lg3	lg4	lg5	lg6	lg7	lg8	lg9	（lg10）
0	0.30	0.48	0.60	0.70	0.78	0.85	0.90	0.95	1.0
lg10	lg20	lg30	lg40	lg50	lg60	lg70	lg80	lg90	（lg100）
0＋lg10 =1	0.30+lg10 =1.30	0.48+lg10 =1.48	0.60+lg10 =1.60	0.70+lg10 =1.70	0.78+lg10 =1.78	0.85+lg10 =1.85	0.90+lg10 =1.90	0.95+lg10 =1.95	1.0+lg10 =2
lg100	lg200	lg300	lg400	lg500	lg600	lg700	lg800	lg900	（lg1000）
0+lg100 =2	0.30+lg100 =2.30	0.48+lg100 =2.48	0.60lg100 =2.60	0.70+lg100 =2.70	0.78+lg100 =2.78	0.85+lg100 =2.85	0.90+lg100 =2.90	0.95+lg100 =2.95	1.0+lg100 =3
……	……	……	……	……	……	……	……	……	……

相邻对数lg1、lg10、lg100、lg1000、……及lg2、lg20、lg200、lg2000、……等差值为1

双对数坐标示意图



单对数坐标



10
9
8
7
6
5
4
3
2
1
0
y
坐标的示值（x）
1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 20 30 40 100 200 300 400 1000
坐标示值的对数值（lgx）
0.30 0.48 0.60 0.70 1 2 3

应用对数坐标需注意：

- 对数坐标上求取斜率的方法，与直角坐标上的求法不同。因为在对数坐标上标度的数值是真数而不是对数。
- 双对数坐标系上直线的斜率，需要用对数值来计算，或者直接用尺子在坐标纸上量取线段长度求取，**如上图中所示AB线的斜率**

$$k=\frac{\Delta y}{\Delta x}=\frac{\lg y_2-\lg y_1}{\lg x_2-\lg x_1}$$

式中：Δy与Δx的数值，即为用尺子测量而得线段长度。

- 双对数坐标上，直线与纵轴相交处的y值，即为方程$y=ax^k$中的a值。若所绘的直线在图面上不能与纵轴相交，则可在直线上任取一组数据x和y，代入原方程$y=ax^k$中，计算求得a值。

实验数据的方程表示法

❖为工程计算的方便，通常需将实验数据或计算结果用数学方程或经验公式的形式表示出来。

❖在化学工程中，经验公式通常都表示成无因次的数群或准数关系。通常遇到的问题是如何确定公式中的常数和系数。

❖经验公式或准数关系数中的常数和系数的求法很多。最常用的是图解法和最小二乘法。

图解法回归法

❖凡属于直角坐标系上可直接标绘出一条直线的，很容易求得直线方程的常数和系数。

❖凡能经过适当变换后能绘成直线时，也可用图解法求已知方程的常数和系数。

最小二乘法

- 在图解时，坐标纸上标点会有误差，而根据点的分布确定直线位置时，具有人为性，因此用图解法确定直线斜率及截距常常不够准确。
- 准确的方法是最小二乘法。它的原理是：最佳的直线就是能使各数据点同回归线方程求出值的偏差的平方和为最小。也就是落在该直线一定范围的数据点其概率为最大。

最小二乘法的推导

已知N个实验数据点（x_1,y_1）(x_2,y_2) …(x_N,y_N)

设最佳线形函数关系式为 $y=b_0+b_1x_0$，则根据此式

N组x值可计算出各对应的N组y*值

$$y_1^*=b_0+b_1x_1$$

$$y_2^*=b_0+b_1x_2$$

……………

$$y_N^*=b_0+b_1x_N$$

而实测时，每个x值所对应的值为$y_1,y_2,\ldots,y_N$，所以

每组实验值与对应计算值y^* 的偏差δ应为

$$\delta_1 = y_1 - y_1^* = y_1 - (b_0 + b_1 x_1)$$

$$\delta_2 = y_2 - y_2^* = y_2 - (b_0 + b_1 x_2)$$

…………………………

$$\delta_N = y_N - y_N^* = y_N - (b_0 + b_1 x_N)$$

按照最小二乘法原理，测量值与真值之间的偏差平方和为最小

$\sum_{i=1}^{N} \delta_i^2$ 为最小的必要条件：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\left(\sum \delta_i^2\right)}{\partial b_0} = 0 \\ \dfrac{\partial\left(\sum \delta_i^2\right)}{\partial b_1} = 0 \end{cases}$$

展开可得

$$\frac{\partial\left(\sum \delta_i^2\right)}{\partial b_0} = -2[y_1 - (b_0 + b_1 x_1)] - 2[y_2 - (b_0 + b_1 x_2)] - \cdots - 2[y_N - (b_0 + b_1 x_N)] = 0$$

$$\frac{\partial\left(\sum \delta_i^2\right)}{\partial b_1} = -2x_1[y_1 - (b_0 + b_1 x_1)] - 2x_2[y_2 - (b_0 + b_1 x_2)] - \cdots - 2x_N[y_N - (b_0 + b_1 x_N)] = 0$$

写成和式

$$\sum_{i=1}^{N} y_i - N b_0 - b_1 \sum_{i=1}^{N} x_i = 0$$

$$\sum_{i=1}^{N} x_i y_i - b_0 \sum_{i=1}^{N} x_i - b_1 \sum_{i=1}^{N} x_i^2 = 0$$

联立解得：

$$b_0 = \frac{\sum x_i y_i \cdot \sum x_i - \sum y_i \cdot \sum x_i^2}{\left(\sum x_i\right)^2 - N\sum x_i^2}$$

$$b_1 = \frac{\sum x_i \cdot \sum y_i - N\sum x_i y_i}{\left(\sum x_i\right)^2 - N\sum x_i^2}$$

由此求得的直线方程：$y=b_0+b_1x$ 即为实验点的关联式。