

Агаянц И.М.

# АЗЫ СТАТИСТИКИ В МИРЕ ХИМИИ



## ОБРАБОТКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

НОТ

Агаянц И.М.

АЗЫ СТАТИСТИКИ  
В МИРЕ ХИМИИ:  
ОБРАБОТКА  
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ  
ДАННЫХ

ИЗДАТЕЛЬСТВО



НАУЧНЫЕ ОСНОВЫ и ТЕХНОЛОГИИ

Санкт-Петербург, 2015

**УДК 66-9.001.4/.5:65.012.2**

**ББК 22.18**

**A23**

**Агаянц И.М.**

**A23 Азы статистики в мире химии: Обработка экспериментальных данных** – СПб.: Научные основы и технологии, 2015. — 618 с., ил.

ISBN 978-5-91703-044-9

Книга на примере анализа эластомерных систем и процессов их формирования иллюстрирует возможности использования статистических методов при обработке экспериментальных данных. Представлены общие понятия статистической обработки экспериментальных данных. Рассмотрены некоторые программные продукты, которые можно рекомендовать для их обработки. Систематически анализируются методы обработки данных и планирования эксперимента с использованием современных программных средств. Книга предназначена для специалистов, заинтересованных в использовании статистических методов в научной и производственной деятельности, а также для аспирантов и студентов технических вузов.

**УДК 66-9.001.4/.5:65.012.2**

**ББК 22.18**

Печатается по решению редакционного совета Московского государственного университета тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова.

Все права защищены. Никакая часть данной книги не может быть воспроизведена в какой бы то ни было форме без письменного разрешения владельцев авторских прав.

ISBN 978-5-91703-044-9

© Агаянц И.М., 2014

© Изд-во «Научные основы и технологии», 2015

# Содержание

Предисловие . . . . .	7
Глава 1. Теория эксперимента и мир резины . . . . .	8
Литература . . . . .	27
<b>Глава 2. Описание некоторых программных продуктов, предназначенных для обработки экспериментальных данных . . . . .</b>	<b>28</b>
2.1. Программы <i>Table Curve 2D</i> И <i>Table Curve 3D</i> . . . . .	28
2.1.1. Ввод данных. . . . .	28
2.1.2. Характеристика моделей, которые могут быть получены с использованием программы <i>TABLE CURVE 2D</i> . . . . .	33
2.1.3. Характеристика моделей, которые могут быть получены с использованием программы <i>Table Curve 3D</i> . . . . .	37
2.1.4. <i>Table Curve 2D</i> . Выбор моделей и их статистический анализ . . . . .	40
2.1.5. <i>Table Curve 3D</i> . Выбор моделей и их статистический анализ. . . . .	53
2.2. Математический пакет <i>MATLAB</i> . . . . .	59
2.2.1. Графический интерфейс пользователя . . . . .	60
2.2.2. Построение графиков функций, зависящих от одной переменной. . . . .	62
2.2.3. Построение графиков функций, зависящих от двух переменных . . . . .	66
2.2.4. Решение многофакторных задач . . . . .	68
Литература . . . . .	72
<b>Глава 3. Первичная статистическая обработка опытных данных . . . . .</b>	<b>74</b>
3.1. Ошибка . . . . .	74
3.2. Вычисление основных статистик . . . . .	78

3.3. Исключение грубых промахов. . . . .	91
3.4. Проверка принадлежности выборки нормальному распределению. . . . .	97
3.5. Проверка однородности дисперсий. . . . .	102
3.6. Проверка различия средних значений. . . . .	108
Литература . . . . .	114
<b>Глава 4. Эмпирические формулы. . . . .</b>	<b>117</b>
Литература . . . . .	155
<b>Глава 5. Выбор параметров оптимизации и факторов. . . . .</b>	<b>158</b>
5.1. Выделение существенных переменных на основе априорной информации . . . . .	159
5.2. Экспериментально-статистические методы выделения существенных переменных. . . . .	176
5.2.1. Полный факторный эксперимент . . . . .	177
5.2.2. Дробные реплики . . . . .	194
5.3. Выбор факторов на основе отсеивающего эксперимента . . . . .	217
Литература . . . . .	224
<b>Глава 6. Дисперсионный анализ. . . . .</b>	<b>226</b>
6.1. Однофакторный дисперсионный анализ . . . . .	227
6.2. Двухфакторный дисперсионный анализ . . . . .	237
6.3. Многофакторный дисперсионный анализ . . . . .	247
6.4. Планирование эксперимента в условиях временного дрейфа . . . . .	271
Литература . . . . .	276
<b>Глава 7. Корреляционный анализ. . . . .</b>	<b>279</b>
7.1. Парная корреляция. . . . .	280
7.2. Множественная корреляция . . . . .	299
7.3. Ковариационный анализ . . . . .	312
Литература . . . . .	321
<b>Глава 8. Оптимизация . . . . .</b>	<b>324</b>
8.1. Выбор параметров оптимизации . . . . .	324

8.2. Поисковые методы экспериментальной оптимизации . . . . .	334
8.2.1. Одномерный поиск . . . . .	334
8.2.2. Многомерный поиск . . . . .	342
8.3. Планирование экстремальных экспериментов в промышленных условиях. . . . .	361
8.4. Линейное программирование . . . . .	368
8.5. Контрольные наблюдения . . . . .	379
Литература . . . . .	395
<b>Глава 9. Описание почти стационарной области . . . . .</b>	<b>398</b>
9.1. Проблема оптимальности планов . . . . .	399
9.2. Анализ некоторых разновидностей планов второго порядка . . . . .	406
9.3. Применение современных программных продуктов для анализа почти стационарной области . . . . .	415
9.4. Построение диаграмм состав–свойство . . . . .	461
9.5. Анализ стабильности значений зависимой переменной . . . . .	478
Литература . . . . .	487
<b>Глава 10. Анализ случайных полей и процессов . . . . .</b>	<b>490</b>
10.1. Некоторые подходы при проведении морфологических исследований резин . . . . .	490
10.2. Моделирование процессов теплообмена при изготовлении резиновых изделий с использованием математического аппарата теории случайных процессов . . . . .	507
Литература . . . . .	528
<b>Глава 11. Топология и теория графов как инструменты экспериментатора . . . . .</b>	<b>530</b>
11.1. Классификация двумерных сечений поверхности отклика . . . . .	530
11.2. Классификация диаграмм состав–свойство . . . . .	541
11.3. Возможности использования тополого-графовых подходов при интерпретации экспериментальных результатов . . . . .	550
Литература . . . . .	580
<b>Заключение. . . . .</b>	<b>581</b>

<b>Приложения</b> . . . . .	587
1. Статистические таблицы . . . . .	587
2. Основные команды <i>MatLab</i> . . . . .	602
Элементарные функции . . . . .	602
Управление средой, файлами и переменными . . . . .	603
Операторы и специальные символы . . . . .	603
Логические функции. . . . .	606
Программирование . . . . .	606
Специальные математические функции. . . . .	609
Решение различных математических задач. . . . .	609
Графика и визуализация данных . . . . .	610
Оформление графиков. . . . .	611
Словарь терминов . . . . .	612
Литература . . . . .	618