

误差分析在化工检测数据质量控制中的应用探讨

堵莎莎 郭静娅* 郭丽惠 刘美玲 买娟

多氟多新材料股份有限公司 河南 焦作 454000

摘要：误差分析是保障化工检测数据可靠性的核心手段，其核心是明确误差分类、识别误差来源，通过科学方法实现误差的量化、控制与校正。系统误差、随机误差与粗大误差在化工检测中普遍存在，源于样品、仪器、人员、环境等多方面因素，分别影响检测结果的准确度、精密度与真实性。通过误差分析可优化数据采集流程、完善数据处理方法、验证检测方法适用性、实现误差动态监控及评估数据不确定度，全方位提升化工检测数据质量，为化工生产、质量判定及决策制定提供可靠的数据支撑，助力化工行业高质量发展。

关键词：误差分析；化工检测；数据质量控制；检测精度；系统误差

引言：化工检测数据的准确性与可靠性直接关系到生产安全、产品质量及行业规范发展，而误差作为检测过程中不可避免的客观存在，其影响贯穿检测全流程，若缺乏科学的误差分析与控制，易导致数据失真，引发生产隐患与决策失误。当前化工检测流程复杂，误差来源多样且影响机制各异，传统质量控制方式难以全面覆盖各类误差管控需求。基于此，深入探讨误差分析在化工检测数据质量控制中的应用，明确误差特性、梳理应用路径，对优化质量控制体系、提升检测数据可信度具有重要现实意义，下文将围绕相关内容展开详细探讨。

1 化工检测中的误差理论基础与分类

误差是检测结果与真实值之间的差异，其存在具有客观性与普遍性，而误差分析的首要任务是明确误差的本质与分类。在化工检测中，根据误差产生的原因及表现特征，可将其分为系统误差、随机误差与粗大误差三大类。系统误差由检测系统固有的缺陷引起，具有确定性与方向性，如仪器校准偏差、试剂纯度不足、检测方法理论缺陷等，其特点是在相同条件下重复检测时误差数值保持恒定或按规律变化，可通过校准、方法优化等手段进行修正。随机误差则源于检测过程中不可控的微小随机因素，如环境温度的微小波动、仪器噪声、操作人员读数的偶然差异等，其数值大小与方向呈现随机分布，遵循统计规律，通常通过增加平行测定次数、采用统计方法（如标准偏差计算）来评估与控制。粗大误差

于异常值，由操作失误、仪器故障等突发性因素导致，其数值远偏离正常范围，需通过数据审核与统计检验（如格拉布斯检验法）进行识别与剔除。

化工检测的复杂性决定了误差来源的多样性。从检测流程来看，误差可产生于样品采集阶段（如代表性不足、采样容器污染）、样品前处理阶段（如萃取效率波动、消解不完全）、仪器分析阶段（如检测器灵敏度漂移、色谱柱老化）及数据处理阶段（如计算模型近似、有效数字取舍不当）。不同类型的误差对数据质量的影响机制存在差异：系统误差直接导致数据整体偏离真实值，影响检测结果的准确度；随机误差则影响数据的分散程度，决定检测结果的精密度；粗大误差则可能导致个别数据严重失真，干扰对整体数据趋势的判断。因此，在化工检测数据质量控制中，需针对不同类型误差的特性，建立差异化的识别、评估与控制策略，为后续的误差校正与数据可靠性提升奠定理论基础^[1]。

2 化工检测中误差的来源与影响因素分析

2.1 样品相关误差

样品质量直接决定检测结果可靠性，误差主要来自采样与前处理阶段。采样时，化工物料空间分布不均、时间动态变化，若采样点、采样量、采样工具选择不当，会导致样品缺乏代表性；采样容器材质、清洁度不佳，也会因吸附、中和等作用引入误差。样品前处理是误差积累关键，溶解、萃取等操作中，方法缺陷或执行偏差会导致目标物回收率波动、待测组分损失；基质中干扰组分未有效去除，会直接影响检测信号准确性。

2.2 仪器与设备误差

检测仪器性能与校准情况直接影响误差水平，分为

通讯作者：郭静娅，1991年3月，女，河南省焦作市，汉族，本科，研究方向：分析测试方法与检测质量控制研究，574370135@qq.com

固有误差与使用误差。固有误差由仪器设计、制造缺陷导致，具有稳定性，可通过定期校准补偿；使用误差与操作维护相关，传感器老化、进样针堵塞等会降低检测精度，复杂运行环境加速部件损耗，维护不当会增加误差风险。此外，设备配套连接泄漏、死体积过大、信号传输不稳定，以及校准标准失效、方法不规范等，都会导致检测数据偏差^[2]。

2.3 操作与人员误差

操作人员专业技能与规范性是重要影响因素，误差表现为操作偏差与主观判断失误。样品称量、滴定等人工操作中，人员熟练程度、注意力等差异会引发误差；对检测方法理解偏差、操作步骤简化，会影响结果重复性与准确性。同时，人员责任心不足导致的数据记录偏差、仪器状态检查疏漏，也是误差的潜在来源。

2.4 环境与干扰因素误差

环境参数波动是随机误差主要来源，温度、湿度等变化会影响样品性质、仪器性能及化学反应过程，降低检测精度。此外，实验环境中的交叉污染，如样品飞溅、挥发性物质扩散、仪器残留污染等，会引入外来组分干扰结果。尤其在痕量分析中，环境干扰影响显著，需通过严格分区、洁净环境及空白实验等控制误差。

3 误差分析在化工检测数据质量控制中的关键应用

3.1 基于误差分析的数据采集过程优化

数据采集是检测流程的起点，误差分析可指导采样方案与仪器操作参数的优化，从源头降低误差引入。在采样阶段，通过误差分析识别代表性不足的风险，可针对性设计采样方案：如对于多相化工物料，采用分层随机采样法提高样品代表性；对于动态反应过程，根据反应动力学特征确定采样时间间隔，避免因时间偏差导致数据失真。同时，通过对采样工具、容器材质及保存条件的误差评估，选择最适采样设备，如针对易挥发有机样品采用密封顶空采样瓶，针对强腐蚀性样品选用聚四氟乙烯容器，以减少样品损失与污染误差。

在仪器分析阶段，误差分析可指导仪器操作参数的优化设置。通过实验设计方法（如正交实验、响应面法），识别对检测结果影响显著的仪器参数（如色谱柱温度、载气流速、检测器电压等），并确定其最优水平范围，降低参数波动导致的随机误差。例如，在气相色谱分析中，通过系统评估柱温程序对目标峰分离度与保留时间稳定性的影响，优化升温速率与恒温时间，减少因峰重叠或保留时间漂移引入的定量误差。此外，误差分析还可指导仪器校准周期的制定：通过长期监测仪器

误差随时间的变化趋势，确定合理的校准间隔，避免因仪器漂移累积导致的系统误差超标^[3]。

3.2 误差量化与数据处理方法优化

误差量化是评估数据可靠性的基础，通过统计方法对检测数据中的误差进行定量表征，为数据有效性判断提供依据。在化工检测中，常用的误差量化指标包括绝对误差、相对误差、标准偏差、相对标准偏差（RSD）、不确定度等。其中，标准偏差与 RSD 主要用于评估随机误差的大小，反映数据的精密度；不确定度则综合考虑系统误差与随机误差，全面表征检测结果的可信区间。通过对平行测定数据的统计分析，计算上述指标，可量化检测过程的误差水平，如当 RSD 超过方法规定限值时，提示随机误差过大，需检查仪器稳定性或操作规范性。

误差分析还可优化数据处理过程，减少计算环节引入的误差。在数据处理中，有效数字的取舍、修约规则的执行、异常值的识别与处理等均可能引入误差。基于误差传递理论，可评估数据处理步骤对最终结果误差的影响，例如，在多步骤计算中，中间结果的有效数字保留不足会导致误差累积，需根据各步骤的误差大小合理确定有效数字位数。对于异常值处理，通过误差分析选择适宜的统计检验方法（如 Q 检验法、狄克逊检验法），在剔除粗大误差的同时避免误判，确保数据的真实性。此外，利用误差分析指导数据校正模型的建立，如通过校准曲线的线性回归分析，评估模型拟合误差，选择最优拟合方式（如加权最小二乘法），提高定量结果的准确性。

3.3 检测方法验证与适用性评估

误差分析是检测方法验证的核心内容，通过评估方法的准确度、精密度、检出限、线性范围等性能指标，判断方法是否适用于特定化工检测需求。准确度反映方法消除系统误差的能力，通常通过与标准方法比对、加标回收率实验或使用标准物质测定等方式进行评估，误差分析可量化测定结果与真实值的偏离程度，如加标回收率在 80%-120%（视检测对象而定）通常被认为准确度可接受。精密度评估则通过重复性（同一人员、同一仪器、短时间内多次测定）与中间精密度（不同人员、不同仪器、不同时间测定）实验，计算 RSD，评估方法的随机误差水平，例如，对于常量分析，重复性 RSD 一般要求小于 2%。

误差分析还可指导检测方法的优化与改进。通过识别方法中误差贡献较大的环节（如前处理效率低、仪器

响应不稳定),针对性改进操作步骤或更换关键试剂/仪器,降低误差水平。例如,在高效液相色谱分析中,若发现目标峰拖尾导致积分误差较大,可通过调整流动相 pH 值或更换色谱柱类型改善峰形,减少系统误差。此外,对于复杂基质的化工样品,误差分析可帮助评估基质效应对检测结果的影响,通过基质匹配校准、内标法等手段消除基质干扰误差,提升方法的适用性^[4]。

3.4 质量控制图在误差监控中的应用

质量控制图是基于误差分析的动态监控工具,通过统计规律识别检测过程中的异常波动,实现对误差的实时控制。在化工检测中,常用的质量控制图包括均值-极差(X-R)控制图、均值-标准差(X-S)控制图及累积和(CUSUM)控制图等。其基本原理是通过对控制样品(如标准物质、质控样)的长期重复测定,建立误差的统计控制限(如 $\pm 3\sigma$),当检测结果超出控制限时,提示检测过程可能存在异常误差(如仪器故障、试剂失效、操作失误),需及时排查原因并采取纠正措施。

质量控制图的应用可实现误差的早期预警与趋势分析。例如,在连续监测某化工产品中关键组分含量时,若控制图中数据点呈现系统性上升或下降趋势,即使未超出控制限,也可能提示仪器灵敏度漂移或标准溶液降解等潜在误差来源,需提前进行校准或更换试剂。此外,通过对不同检测项目质量控制图的综合分析,可识别实验室整体误差水平的变化趋势,为仪器维护计划制定、人员培训重点及方法改进方向提供数据支持,形成持续改进的质量控制闭环。

3.5 不确定度评估与数据可靠性表达

不确定度是表征合理赋予被测量之值的分散性与测量结果相联系的参数,其评估是误差分析在数据质量控制中的高级应用,可全面反映检测过程中各类误差对结果的综合影响。在化工检测中,不确定度评估需系统识别所有可能的误差来源(如天平称量误差、容量器具校准误差、仪器测量误差、重复性误差等),通过数学模型量化各误差分量的标准不确定度,再按方和根法合成

得到扩展不确定度,最终以“测量结果 $\pm$ 扩展不确定度”的形式表达数据,使检测结果的可靠性具有明确的量化依据。

不确定度评估的应用可提升数据的可比性与决策价值。例如,在化工产品质量判定中,若某组分的测定结果为 $5.2\% \pm 0.3\%$ ($k=2$),而标准限值为 5.0% ,则考虑不确定度后,实际结果可能低于标准限值,需结合不确定度进行科学判定,避免因忽略误差导致误判。此外,不确定度评估还可指导检测资源的优化配置:通过识别对合成不确定度贡献最大的误差分量(如前处理回收率的不确定度),可优先改进该环节的操作方法或设备性能,以最经济的方式降低整体不确定度,提升数据质量^[5]。

结束语:误差分析在化工检测数据质量控制中发挥着不可替代的作用,贯穿检测全流程,为数据质量提升提供了科学的理论支撑与实践路径。通过明确误差分类与来源,借助误差分析可实现数据采集优化、数据处理完善、检测方法验证、误差动态监控及不确定度评估,有效管控各类误差对检测数据的影响,显著提升数据的准确性、精密度与可靠性。误差分析的合理应用,不仅完善了化工检测质量控制体系,也为化工行业规范生产、科学决策提供了保障,未来需结合行业发展需求,持续优化误差分析方法,推动化工检测数据质量控制水平不断提升。

参考文献

- [1] 李允,段业宽.误差分析在化工检测数据质量控制中的应用探讨[J].实验室检测,2025,3(23):286-288.
- [2] 薛梅.化工环境监测数据质量控制方法分析[J].化工管理,2025(20):61-63.
- [3] 章平,王胜利,王爽.产品检验检测中计量误差分析与控制策略[J].中国质量监管,2025(4):100-101.
- [4] 蒋兴华.数据分析技术在石油化工检测工作中的应用[J].石油石化物资采购,2024(18):106-108.
- [5] 张世元,陈茜,李柯影.石油化工分析检验实验室的质量控制与管理优化[J].化工管理,2026(2):13-16.