

# 冶金试验研究方法

陈建设 主编

YEJIN SHIYAN YANJIU FANGFA



冶金工业出版社

# 冶金试验研究方法

陈建设 主编

北 京

冶金工业出版社

2005

## 内 容 简 介

本书共分11章,包括如何进行误差分析与数据处理,科技文献检索方法,试验设计的方法,化学平衡、相平衡及固体电解质电池的相关知识,进行冶金试验研究的相关方法(包括温场获得与测量技术、真空技术、气体净化与气氛控制、冶金粉体与熔体的性质测定技术),常用的现代物理测试方法及如何进行科技论文写作。附录为教学及进行冶金试验研究所需要的资料和数据。

本书可以使冶金工程专业的本科生了解试验研究工作的程序,掌握试验方法和技能,培养学生分析和解决冶金工程实际问题的能力。本书也可供冶金科研及生产单位的工程技术人员参考。

### 图书在版编目(CIP)数据

冶金试验研究方法/陈建设主编. —北京:冶金工业出版社,  
2005.10

ISBN 7-5024-3825-4

I. 冶… II. 陈… III. 冶金—试验—研究方法 IV. TF-33

中国版本图书馆CIP数据核字(2005)第100581号

出版人 曹胜利(北京沙滩嵩祝院北巷39号,邮编100009)

责任编辑 郭庚辰 美术编辑 李 心

责任校对 侯 璐 李文彦 责任印制 牛晓波

北京兴华印刷厂印刷;冶金工业出版社发行;各地新华书店经销

2005年10月第1版,2005年10月第1次印刷

787mm×1092mm 1/16;18.5印张;489千字;285页;1-3000册

29.00元

冶金工业出版社发行部 电话:(010)64044283 传真:(010)64027893

冶金书店 地址:北京东四西大街46号(100711) 电话:(010)65289081

(本社图书如有印装质量问题,本社发行部负责退换)

# 前 言

为适应教学改革及学科建设的需要,按照一级学科“冶金工程”专业构思,在多年教学实践的基础上,我们编写了“冶金试验研究方法”,以满足冶金工程专业本科生的教学要求。编写本教材的目的是使冶金工程专业本科生了解试验研究工作的程序,掌握试验方法和技能,培养学生分析和解决冶金工程实际问题的能力,使科研工作事半功倍。除课堂教学外,本书还是冶金工程专业学生进行毕业论文的主要参考资料。本书同时可供冶金科研及生产单位的工程技术人员使用。

全书共分11章:第1章介绍如何进行误差分析与数据处理,第2章介绍科技文献检索方法,第3章介绍了试验设计的方法,第4章、第5章介绍了化学平衡、相平衡及固体电解质电池的相关知识,第6章至第9章介绍了进行冶金试验研究的相关方法,包括温场获得与测量技术、真空技术、气体净化与气氛控制、冶金粉体与熔体的性质测定技术,第10章、第11章则分别介绍了常用的现代物理测试方法及如何进行科技论文写作。附录为教学及进行冶金试验研究所需的资料和数据。

东北大学陈建设任本书主编并编写第1章、第3章、第7章及附录,付贵勤编写第2章、第6章,黄振奇编写第4章、第5章及第11章,张勤编写第8章、第9章及第10章。

本书在编写过程中,得到了魏绪钧教授、李广田教授的指导与帮助,朱苗勇教授、刘奎仁教授提出了宝贵意见,在此表示衷心的感谢。

本书由东北大学资助出版。在编写过程中,参考了国内外有关书籍和资料,参阅了其中的一些内容和实例,在此对这些图书或资料的作者表示感谢。

本书涉及的内容较广,由于编者水平有限,书中不足之处,恳请读者批评指正。

编 者

2005年4月

# 目 录

绪 论 .....	1
<b>1 误差分析与数据处理</b> .....	<b>6</b>
1.1 代表值及误差 .....	6
1.2 可疑观测值的舍弃 .....	9
1.3 间接测量中误差的传递 .....	12
1.4 试验数据的表示方法 .....	14
思考题与习题 .....	21
<b>2 科技文献检索</b> .....	<b>23</b>
2.1 科技文献的种类及检索方法 .....	23
2.2 大型检索工具指南 .....	28
2.3 专利检索 .....	42
2.4 特种文献检索 .....	46
2.5 其他数据库 .....	49
思考题与习题 .....	53
<b>3 试验设计</b> .....	<b>54</b>
3.1 优选试验设计 .....	54
3.2 正交试验设计 .....	55
3.3 回归正交试验设计 .....	65
3.4 混料回归试验设计 .....	73
思考题与习题 .....	79
<b>4 化学平衡与相平衡</b> .....	<b>81</b>
4.1 化合物稳定性的判据— $\Delta G^\ominus$ .....	81
4.2 化合物的位图 .....	82
4.3 相平衡一般原理 .....	91
思考题与习题 .....	105
<b>5 固体电解质电池及其应用</b> .....	<b>107</b>
5.1 固体电解质 .....	107
5.2 氧化物固体电解质的制备 .....	109
5.3 氧化物固体电解质电池的工作原理 .....	111

5.4	固体电解质的电子导电 .....	113
5.5	固体电解质电子导电性的实验测定 .....	115
5.6	固体电解质传感器的类型 .....	117
5.7	固体电解质电池应用 .....	120
	思考题与习题 .....	125
<b>6</b>	<b>温场获得与测量</b> .....	<b>126</b>
6.1	低温场的获得 .....	126
6.2	实验室中恒温的获得及应用 .....	128
6.3	高温场的获得 .....	128
6.4	温度测量与控制 .....	140
6.5	耐火及保温材料 .....	152
	思考题与习题 .....	160
<b>7</b>	<b>真空技术</b> .....	<b>162</b>
7.1	概述 .....	162
7.2	真空的获得及设备 .....	163
7.3	真空系统 .....	167
7.4	真空测量 .....	171
7.5	真空检漏 .....	174
	思考题与习题 .....	178
<b>8</b>	<b>气体净化及气氛控制</b> .....	<b>179</b>
8.1	几种常用气体的特征及其制取方法 .....	179
8.2	常用气体的净化方法及气体净化剂 .....	186
8.3	混合气体的配制 .....	190
8.4	气体流量的测定 .....	191
8.5	气体的储存及安全使用 .....	193
	思考题与习题 .....	194
<b>9</b>	<b>粉体熔体物性检测</b> .....	<b>195</b>
9.1	试样的制取 .....	195
9.2	粉体物性测定 .....	195
9.3	熔体物性测定 .....	212
	思考题与习题 .....	224
<b>10</b>	<b>现代检测技术</b> .....	<b>226</b>
10.1	X 射线衍射分析 .....	226
10.2	透射电子显微镜 .....	232
10.3	扫描电子显微镜 .....	233

---

10.4 X 射线光电子能谱仪 .....	235
10.5 电子探针 X 射线显微分析 .....	238
思考题与习题 .....	240
<b>11 科技论文写作 .....</b>	<b>242</b>
11.1 科技论文的种类和基本要求 .....	242
11.2 科技论文的基本格式及写作方法 .....	243
11.3 科技英语论文写作 .....	252
<b>附 录 .....</b>	<b>263</b>
附录 A $F$ 分布表、 $t$ 分布表及相关系数检验表 .....	263
附录 B 网络资源、搜索引擎 .....	269
附录 C 常用正交表 .....	273
附录 D 几种常用标准热电偶分度表 .....	276
<b>参考文献 .....</b>	<b>285</b>

# 绪 论

## A 实验是检验科学真理的标准和鉴定新观念的准绳

科学是从实验中发展起来的。没有对自然界的观察和实验就没有科学，也就不能发展科学。许多科学上的新发现都是在实验中产生的，如电磁感应现象，是法拉第在实验中发现的；作为现代原子能源基础的原子核裂变是在 1938 年底在实验工作中发现的；先有半导体的实验研究，后来才有晶体管，再后来才发展出集成电路等等。

认识来源于实践，实验是科学实践。实验是在受控制的条件下对现象和某些过程的观察。这样对被观测的对象和所研究的问题可以研究得很清楚，能够得出正确的结论。要把一个问题研究清楚，常常要进行多次实验。实验既是掌握理论的重要环节，又是将所掌握的知识应用于实际的桥梁。由此可以看出实验对科学发展的重要作用。

高等学校的学生，基本任务是学习，毕业后为经济建设服务，必须把基础打好。打基础是为了将来从事研究工作，从事创造性的劳动。学生就应在打基础中学会实验研究，在实验研究中打好基础。通过实验研究可以使已学过的概念掌握得更为牢固，可以培养洞察力和迅速抓住事物本质的能力，可以培养从事科学实验的严肃态度和严密的作风，可以学会从事科学研究的本领，养成用实验方法研究科学问题的习惯。著名物理学家卢瑟福培养的研究生中先后有 11 人获得诺贝尔奖，另外还有两名他曾经的助手也获得诺贝尔奖。他培养人才的一个重要特点是，从实验出发，理论和实验相结合。他认为：实验是检验真理的标准和鉴定新观念的准绳。他有句名言：“一个勇敢的实验不可怀疑地证明了一个伟大的成果。”

科学研究是经济建设中极其重要的一环，在校学生必须打好实验研究的基础。研究方法的学习是其中一个环节。通过研究方法的学习，可以学到参加实验研究的本领；通过参加实验研究，从中得到锻炼，增长才干，为以后的科学研究打好基础。

## B 冶金试验研究工作的阶段划分

科学研究基本上可以归纳为三类，即基础研究、应用研究和发展研究。

**基础研究：**是进步的源泉。主要是为了弄清和理解所要研究对象的内在规律，一般不考虑实际应用问题。

**应用研究：**主要是以使用为目的，探索科学知识具体应用的可能性。

**发展研究：**是将科学技术知识最终变为生产的实验过程。发展研究技术上接近成熟，因此设计要求严格，选题必须慎重，否则就会造成较大的损失。

试验研究工作的步骤，取决于其类型、目的与要求。对于理论性的研究课题，实验室所用的设备、方法即可满足要求。对于直接用于生产实践的课题，需将试验规模逐渐扩大，以获取指导设计和生产的可靠数据。为此，其研究工作，按其规模由小到大，分为若干阶段。试验过程可分为实验室试验阶段、扩大实验室试验阶段和半工业试验阶段。各阶段特点如下。



### a 实验室试验阶段

实验室试验主要是解决技术上的可行性问题,属于探索性质。其基本任务是对几种可能的方法进行试验,分析比较,确定最优方案及获取相应试验数据。

实验室试验是后续扩大实验室试验及半工业试验的基础。但是,由于实验室试验是分批进行的,各因素之间的交互作用、各环节的相互影响往往不能充分暴露出来。导致所得数据与实际相比可能会有较大出入,因而有必要按实验室试验阶段提供的数据资料,逐渐扩大试验规模,使其尽量接近于生产实际。

一般说来,实验室所得数据只提供了技术上的可行性,不能作为指导生产及进行设计的依据,因此还需进行扩大试验及半工业试验。

### b 扩大实验室试验阶段

扩大实验室试验是介于实验室试验和半工业性试验之间的一种中间试验,是在实验室试验的基础上进行的。其主要目的是进一步肯定实验室试验的结果和取得接近半工业试验的各项指标。在研究内容比较简单的情况下,扩大实验室试验可代替半工业试验,其研究结果可直接用于生产。在大多数情况下,扩大实验室试验是为了查明在实验室规模下不能肯定的一些重要条件,因而扩大实验室试验仍起着初步研究的作用,所取得数据依旧不能作为指导生产和进行设计的依据。

与实验室试验相比,扩大实验室试验,大部或全部是连续操作,比较接近工业生产的要求;其规模较大,运行时间较长;各环节之间的相互影响暴露得较充分,试验结果的可靠性更高。而且原材料消耗较大,费用较高,加之参加人员较多,故需精心组织,密切配合,协同工作。

扩大实验室试验要求对产物(包括中间产物)进行系统科学的取样和分析化验,对所使用的原材料要做详细的统计记录,对物料平衡、热平衡、主要设备能力事先要进行估算。扩大实验室试验所取得的数据应能满足半工业试验要求。

### c 半工业试验阶段

半工业试验的主要任务是克服在扩大实验室试验中发现的不稳定现象,经长时间运转验证所用设备的适应性和相互之间的配合性,获得工业生产规模下的物料平衡与热平衡数据,进一步肯定产品的质量和各项技术经济指标。同时借以计算单位生产成本。初步制定出操作规程,查明劳动条件并制定出劳动保护及环境保护等措施,为设计提供必需的资料等。

半工业试验,一般是针对新技术、新工艺进行的,其规模因具体情况而定。半工业试验规模应达到扩大实验室试验的500~1000倍。

半工业试验的设备应为生产设备的雏形或一个生产单位的雏形,要求操作连续化、机械化或自动化。

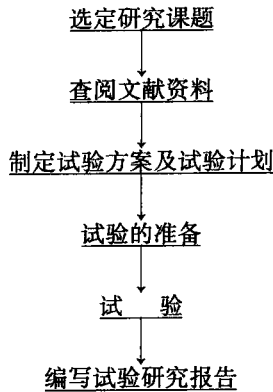
通过半工业试验,应能帮助解决将来生产上所有可能碰到的问题,为工业设计积累必要的数据库。

## C 冶金试验研究工作的程序

在实验室试验阶段,一般可按下页所示程序进行。

事实上,该程序在不同程度上是相互重叠和交叉的。有的课题在文献工作之后并不能立即确定试验方案,而是对几个可能方案首先进行探索性试验,经比较后再确定其中的一个方案。有的课题由于可供借鉴的经验和知识较多,一开始就能确定试验方案。文献资料工作只是为了制定较细的试验计划,有时则是在试验进行过程中,还需要查阅文献,借以分析研究某些具体

问题。



由于试验过程中各程序间的交叉重叠,使得各程序的时间很难预先确定,通常设备是决定试验方法的重要因素。在一般情况下,文献工作、试验准备和正式试验所占的时间较多。文献工作占用的时间多少,与研究的内容及对工作熟练的程度有关。

#### a 选定研究课题

选题是进行科学研究的第一步,它直接影响着研究工作能否完成以及该项研究工作有无价值,是具有重大意义的事情。选题的一般原则是为生产服务,理论与实践相结合。在选题方向上,既要研究解决目前和长远的生产实践中提出的各种科学理论与技术课题,又要走到生产实践前面,更加深入地进行理论研究,揭示自然规律,为生产开辟新的途径。

#### b 文献资料工作

文献资料工作是进行试验研究的一项基本功。查阅文献资料可以从前人工作的经验和教训中得到启迪,从而更好地安排研究计划。研究者通过文献资料工作,可以了解有关问题的发展历史、现状及动向,确定研究方向,提出科学预见;了解别人的科学构思,从中得到启发,以形成和完善新的概念;了解和借鉴别人成功的经验,并在其基础上有所创新,有所提高;了解别人失败的教训,少走弯路,减少人力、物力和时间的浪费。

#### c 制订试验方案及试验计划

制定试验方案是试验研究的关键环节。在文献工作的基础上,对各种可能的方案要进行分析比较,最终确定一个最佳方案。在方案的比较、选择过程中,一般遵循如下原则:

在进行基础理论研究时,需采用先进的设备及试验手段,以获取准确可靠的信息。

在进行实用性课题研究时,选择方案的基本原则是:(1)技术上先进可行;(2)经济上合理;(3)不造成环境污染;(4)试验过程安全。

试验研究计划是根据试验方案制定的,其作用和目的,就是使试验方案的内容和要求得以付诸实施。制定试验研究计划应包括下列主要内容:

(1) 前言。包括试验题目(包括小题目)名称、目的要求、欲解决的问题及要达到的目标、采用的方法及措施等。

(2) 试验总表。可用流程图的形式,将试验过程的全部内容(各项指标,试验条件和波动范围)列于表中。

(3) 试验进度安排。将试验分为若干阶段,根据试验内容,按日期安排试验进度。

(4) 物料清单。根据试验总表,计算出所需物料及试剂的用量、规格、等级、物理性质、化学成分及特殊要求等,对矿物原料(熔剂、试料等)还需说明来源、产地、组成等。需要

自制的试剂，要订出制备计划及制备方法，并说明在何处进行。

(5) 设备仪器清单。对试验研究所用的设备、仪器及其备用配件，以图表形式列出名称、规格和数量，特殊情况要予以说明。

(6) 化验分析。试验研究中的化验分析，物理检测要在计划总表中估计出工作总量。如需其他专业人员协作，应明确提出要求，且任务要具体；若是自己进行化验或检验，则应就其方法，所需设备、仪器、试剂等做出详细计划。

#### d 试验准备

准备工作一般包括技术准备、物料准备、设备装配及调试、化验分析工作的配合及科研人员的训练等几个方面。

#### e 试验

试验是研究的中心环节，它决定科学研究的质量。科研人员应具有严谨的科学态度、精细准确的作风、熟练的操作技能。在整个试验过程中要求研究人员：

(1) 根据试验条件及设备制定整个试验工作进行的步骤，明确仪器、设备的使用方法。并在试验过程中严格按照操作程序进行。

(2) 认真操作，仔细观察试验中的各种现象，要细心分析，如实记录。

(3) 做好原始记录。对所有试验资料、数据都要编号、记录，所有的记录应清晰、完整、准确。

#### f 编写试验研究报告

试验结束后，应及时分析试验数据及归纳总结，得出试验结论，并以报告的形式概括。试验报告应包括课题的来源、研究的目的意义，试验所用的仪器设备、原料、实验方法，实验结果与分析和结论等。

### D 研究工作者的基本素质

作为一个研究工作者应该努力使自己具备下列基本素质：

(1) 事业心，即对科学事业的热爱和献身精神。没有对所从事的事业的高度热忱和对科学真理近乎“狂热”的追求，是不可能做出成就的。在通往科学研究成功的道路上布满了荆棘和各种难以想像的障碍，没有克服困难的勇气，没有坚定的信念，没有不达目的誓不罢休的精神，绝不会从智慧之树上摘下成功的果实。

(2) 强烈的和难以满足的好奇心。科学上的好奇心表现在对自然现象背后的原因有浓厚的兴趣和强烈的追求。这是研究工作者所必备的心理素质之一。对所出现的特殊现象不惊奇，不兴奋，而是麻木不仁，无动于衷，就失去一个研究人员应有的进取心。

(3) 高度的洞察力、理解力和灵活运用已有知识的能力。洞察力即善于拨开现象的迷雾，迅速抓住事物本质的能力。这种能力的获得不仅与所掌握的专业知识丰富程度有关，而且与平时的思想修养和思考习惯有关。学习并掌握辩证唯物主义观点对于提高观察事物的洞察力是有益且必要的。所谓理解力就是将外部的现象同自己的知识、经验加以比较，迅速对号的思维过程。兴趣广泛和喜欢学习本专业以外的知识的人常有较强的理解力。至于灵活运用已有的知识，就是驾驭知识，为解释某个问题，解决某项任务，使知识在头脑中重新组合的能力。善于联想和寻求类比有助于提高这种能力。

(4) 勤奋的工作态度和坚忍不拔的精神。科研工作是一项艰苦的劳动，不仅需要付出必要的体力劳动，尤其要付出极大的脑力劳动。因此必须投入非常的精力和进行韧性的战斗，才会有所收获。非常之人，做非常之事，出非常之力，才能有非常之功。

(5) 丰富的想像力。想像是科学的翅膀，是研究工作者一个很宝贵的素质。想像力丰富的人常常能够在经验和论据不足的情况下，提出各种各样的假说。虽然想像不等于论证，假说也不等于理论，但思想上的自由驰骋在许多情况下能为科学研究提供很有价值的追踪线索。

(6) 怀疑精神。人类对自然界的认识史就是不断怀疑、不断探索的历史。怀疑精神主要表现在不为传统观念所束缚，敢于对那些传统的东西抱批判的态度。科学史上每一次重大的科学技术进展都是对传统思想的挑战。

# 1 误差分析与数据处理

冶金生产和科学试验中，测得的数据只能达到一定程度的准确性。但对准确性的要求在不同的情况下则有所不同，既不能盲目追求过高造成人力和物力的浪费，也不能过低而造成测得数据没有价值，所以对准确性的要求必须适当。进行试验时，首先要了解试验所能达到的精度和产生误差的主要因素，试验以后要科学地分析和处理数据的误差，这对试验水平的提高有一定的指导作用。通过了解误差的种类、产生原因和性质可以抓住提高准确度的关键，通过误差分析可以寻求较合适的试验方法和选择合适的仪器设备。

## 1.1 代表值及误差

冶金试验中，测量得到的数值并不完全一样，而是一组数值的集合。处理这些试验测定值时，必须从数值集合中求出一个代表值，使其能代表所测得的一组数值。代表值在数据处理中是很重要的，且经常碰到。

冶金试验中，由于工具不准、方法不完善等各种因素的影响，会导致测量结果失真，这种失真就称为误差。一切试验结果都有误差，误差自始至终存在于所有科学试验中，因此必须对测得的数据进行处理，并用一定的方法表示出试验误差的大小。

### 1.1.1 代表值

代表值有中位值和平均值。其中中位值是将所测定的数值按其大小顺序排列，取位于正中间的数值，这是取代表值最简单的方法。

平均值有算术平均值、均方根平均值、几何平均值等，在冶金试验中常用算术平均值作为代表值。

设  $x_1, x_2, \dots, x_n$  代表各次观测值， $n$  代表观测次数，则算术平均值  $\bar{x}$  的计算式：

$$\bar{x} = \frac{x_1 + x_2 + \dots + x_n}{n} = \frac{\sum x_i}{n} \quad (1-1)$$

### 1.1.2 误差及误差分类

对于数值集合分布性质特征，常用离散度表示，它是说明以平均值为中心，数值是怎样分布的。如图 1-1 所示，当分布曲线形成幅度很窄的陡峭尖峰时（曲线 a），表示大部分数值都集中在平均值附近，则离散度小；相反，曲线形成平缓的突起时（曲线 b），表示数值分布在较宽的范围内，离散度大。对离散度的表示方法，一般用偏差表示，指观测值与平均值之差，通常所说的误差是指观测值与真值（观测次数无限多时求得的平均值）之差。习惯上常将二者混用而不加区别。

误差有不同的分类方法，就其性质和产生的原

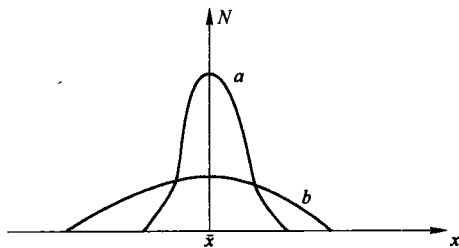


图 1-1 数值分布图

因, 可将误差分为系统误差、随机误差和过失误差三种。

### 1.1.2.1 系统误差

系统误差是由于仪表未经校正、测量方法不当、化学试剂纯度不够或观测者的习惯与偏见等而产生的。它恒偏于一个方向, 数值的大小按一定规律变化或者固定不变, 它决定了测量结果的准确性。单纯靠增加测量次数不能消除系统误差。只有对上述原因分别加以考虑, 采用不同的实验技术或不同的实验方法, 改变试验条件, 调换仪器和试验人员, 提高化学试剂纯度等, 才能确定有无系统误差的存在, 并设法消除或使之减小。单凭一种方法, 所得结果往往不是十分可靠的。

### 1.1.2.2 随机误差

测量中如果消除了引起系统误差的因素, 而所测数据仍在末位或末两位有差别, 称这类误差为随机误差。

随机误差有时大、有时小、有时正、有时负, 方向不一定。产生这些波动的原因, 是因为有某些无法控制的偶然因素影响的结果。如测量仪器灵敏度的有限性, 温度、压力等无法控制的微小变化等都是引起随机误差的因素。随机误差产生的原因一般不详, 因而无法控制, 但用同一仪器在同样条件下, 对一个物理量做多次测量, 若观测次数足够多, 则可发现随机误差完全服从统计规律, 这种规律可用图 1-2 的曲线表示。此曲线称为误差正态分布曲线, 曲线的函数形式为:

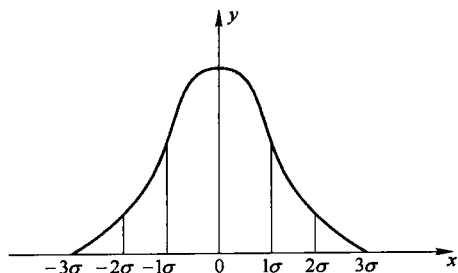


图 1-2 误差正态分布图

$$y = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$$

或

$$y = \frac{h}{\sqrt{\pi}} e^{-h^2 x^2}$$

式中  $h$  称为精密度指数,  $\sigma$  为标准误差。  $h$  与  $\sigma$  的关系式为:

$$h = \frac{1}{\sqrt{2}\sigma}$$

由图 1-2 可以看出, 误差小的数据比误差大的数据出现的几率大, 故误差出现的几率与误差大小有关。由于正态分布曲线以  $y$  轴对称, 因此数值大小相同, 符号相反的正、负误差出现的几率近乎相等。当没有系统误差时, 无限多次测量结果的平均值可以代表真值, 其标准误差为  $\sigma$ 。由数理统计可以得出, 误差在  $\pm\sigma$  内出现的几率为 68.3%; 在  $\pm 2\sigma$  内出现的几率为 95.5%; 在  $\pm 3\sigma$  内出现的几率为 99.7%。可见, 误差超过  $\pm 3\sigma$  出现的几率只有不到 0.3%, 因此当多次重复测量中个别数据误差的绝对值大于  $3\sigma$  时, 这个数值可以舍弃。

### 1.1.2.3 过失误差

过失误差是一种与事实不相符的误差, 主要是由于粗心大意或操作不正确等原因所引起, 如读错刻度、记录错误、计算错误等。此类误差无规律可循, 只要多加注意、细心操作就可避免。

### 1.1.3 误差表示与计算

误差的大小一般用绝对误差或相对误差来表示。绝对误差与被观测对象的大小无关, 以

$\pm x$ 表示；相对误差与被观测对象的大小有关，以 $\pm x\%$ 表示。绝对误差有平均误差、标准误差与方差。

### 1.1.3.1 平均误差 ( $\delta$ )

平均误差是测量值 $x_i$ 与平均值 $\bar{x}$ 之偏差 $d_i$ 绝对值之和的平均值，若 $n$ 表示测量次数，则计算式为：

$$\delta = \frac{\sum |x_i - \bar{x}|}{n} = \frac{\sum |d_i|}{n} \quad (1-2)$$

平均误差的优点是计算简单，但它无法表示出各测量值彼此符合的情况。因为在一组测量数据中偏差彼此接近，而另一组测量数据中偏差有大、中、小之分，二者所得平均误差可能相同，这样就无法分辨出测量数据的离散程度。如甲测量某数据两次，其偏差均为2，而乙也测量两次，其偏差分别为1及3。那么甲、乙二者的平均误差均为2，并没有反映出甲、乙二者测量数据离散度的不同。

### 1.1.3.2 标准误差 ( $\sigma$ )

为消除平均误差的缺点，而将偏差作平方处理，这样较大的误差就会更显著地反映出来，就能更好地表示出数据的离散程度。故标准误差是表示精密度的较好方法，在近代科学试验中多采用这种误差，其计算式为：

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{n-1}} = \sqrt{\frac{\sum d_i^2}{n-1}} \quad (1-3)$$

标准误差的平方即为方差 $\sigma^2$ ，在数据运算过程中常被使用。

### 1.1.3.3 或然误差 ( $P$ )

在一组测量数据中若不计正、负号，误差大于或小于 $P$ 的测量值将各占测量次数的50%，误差落在 $+P$ 与 $-P$ 之间的测量次数占总测量次数的一半。也就是说，如果再做一次测量，应有50%的几率其偏差小于或然误差 $P$ 。 $P$ 的计算式为：

$$P = 0.675 \sqrt{\frac{\sum d_i^2}{n-1}} = 0.675\sigma \quad (1-4)$$

### 1.1.3.4 相对误差

以上三种均为绝对误差，为建立绝对误差与被测对象大小的关系而引入了相对误差，其定义式为：

$$\delta_{\text{相对}} = \frac{\delta}{\bar{x}} \times 100\% \quad (1-5)$$

$$\sigma_{\text{相对}} = \frac{\sigma}{\bar{x}} \times 100\% \quad (1-6)$$

测量结果的精密度可表示为 $\bar{x} \pm \sigma$  (或 $\bar{x} \pm \delta$ )， $\sigma$  (或 $\delta$ ) 越小，表示测量的精密度越高。有时也用相对误差表示精密度 $\bar{x} \pm \sigma_{\text{相对}}$  (或 $\bar{x} \pm \delta_{\text{相对}}$ )。

不论用绝对误差还是用相对误差来表示，其误差一般只取一位有效数字，最多不超过两位。

### 1.1.3.5 仪表示值误差、示值相对误差、示值引用误差、仪表的精度级别

仪表示值误差 = 指示值 - 计量检定值

仪表示值相对误差 =  $\frac{\text{仪表示值误差}}{\text{指示值}} \times 100\%$

$$\text{仪表引用误差} = \frac{\text{仪表示值误差}}{\text{指示满量程值}}$$

仪表所允许的最大引用误差称为仪表精度级别。

### 1.1.4 精密度与准确度

精密度指在测量中所测数据重复性的好坏，准确度指所测数据与真值的符合程度。如图 1-3 所示，其观测结果是：甲的精密度高但准确度不好；乙的精密度和准确度都不好；丙的精密度和准确度都好。由此可以看出：在一组测量数据中，尽管精密度很高，但准确度不一定很好；若准确度好，其精密度一定高。

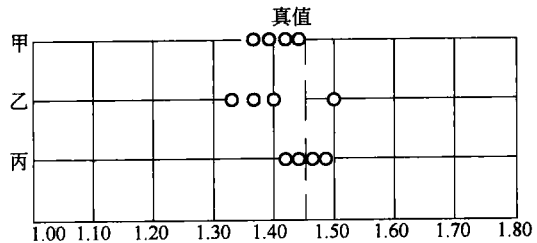


图 1-3 甲、乙、丙三人观测结果示意图

因此精密度好是保证准确度好的先决条件，没有良好的精密度就不能有好的准确度，但精密度好并不一定准确度好，这是由于系统误差所造成的。

## 1.2 可疑观测值的舍弃

在一组试验数据中，有时发现某一观测值与其余观测值相差很大，如果保留这一观测值，则对平均值有很大影响。如果有充足的理由确认此值是由于某种原因引起，或者说此观测值含有过失误差，则可以舍弃；若没有充足的理由，绝不能单纯为获得试验结果的一致性而随意舍弃，此时可根据误差理论来决定取舍。通常，判别过失误差的准则有以下四种。

### 1.2.1 $3\sigma$ 准则（莱以特准则）

当观测次数大于 10 次，可用  $3\sigma$  准则舍弃可疑值，其依据如图 1-2 所示。图中误差超过  $\pm 3\sigma$  的数据出现的几率小于 0.3%，所以在一组较多的数据中，对偏差大于  $3\sigma$  的数据可以舍弃。

具体步骤是：首先算出一组数据的算术平均值  $\bar{x}$  和标准误差  $\sigma$ ，然后比较  $|d_i|$  ( $|x_i - \bar{x}|$ ) 是否大于  $3\sigma$ ，若大于  $3\sigma$  即可舍弃，舍弃可疑值后再重新计算  $\bar{x}$  和  $\sigma$ 。

### 1.2.2 乔文涅法则

在一组数据中，某数据与该组数据算术平均值的偏差大于该组数据或然误差的  $K$  倍时，可以舍弃。 $K$  值见表 1-1。

表 1-1 舍弃可疑数据的  $K$  值表

观测次数	$K$	观测次数	$K$	观测次数	$K$
5	2.44	9	2.84	16	3.20
6	2.57	10	2.91	18	3.26
7	2.68	12	3.02	20	3.32
8	2.76	14	3.12	22	3.38

例 1-1 某矿中  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  的质量分数的测定结果列于表 1-2，其中最后一个数值与其他数值相差较大，问是否可以舍弃？



表 1-2 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>含量表

样品号	1	2	3	4	5	6
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (质量分数)/%	50.30	50.25	50.27	50.33	50.34	50.55

因测定次数为 6，故采用乔文涅法则进行评估。

$$\bar{x} = \frac{\sum x_i}{n} = \frac{50.30 + 50.25 + 50.27 + 50.33 + 50.34 + 50.55}{6} = 50.34$$

$$|d_1| = |x_1 - \bar{x}| = |50.30 - 50.34| = 0.04$$

同理可求出  $|d_2| = 0.09$ ,  $|d_3| = 0.07$ ,  $|d_4| = 0.01$ ,  $|d_5| = 0$ ,  $|d_6| = 0.21$

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum d_i^2}{n-1}} = \sqrt{\frac{0.0588}{5}} = 0.11$$

$$P = 0.675\sigma = 0.073$$

由  $n=6$ ，查表 1-1 知  $K=2.57$ ，则

$$PK = 0.073 \times 2.57 = 0.19$$

因为  $|d_6| = 0.21 > 0.19$

所以第六个观测值 50.55 可以舍弃。

### 1.2.3 罗曼诺夫斯基准则

当测量次数较少时，按  $t$  分布的实际误差分布范围来判别过失误差较为合理。罗曼诺夫斯基准则又称  $t$  检验准则，其特点是首先剔除一个可疑的测得值，然后按  $t$  分布检验被剔除的测量值是否含有过失误差。

设对某量作多次等精度独立测量，得

$$x_1, x_2, \dots, x_n$$

若认为测量值  $x_j$  为可疑数据，将其剔除后计算平均值为（计算时不包括  $x_j$ ）

$$\bar{x} = \frac{1}{n-1} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n x_i$$

并求得测量列的标准误差（计算时不包括  $d_j = x_j - \bar{x}$ ）

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n d_i^2}{n-2}}$$

根据测量次数  $n$  和选取的显著度  $\alpha$ ，即可由表 1-3 查得  $t$  分布的检验系数  $K(n, \alpha)$ 。

表 1-3 罗曼诺夫斯基准则舍弃可疑数据的  $K$  值表

$n \backslash \alpha$	$\alpha$		$n \backslash \alpha$	$\alpha$		$n \backslash \alpha$	$\alpha$	
	0.05	0.01		0.05	0.01		0.05	0.01
4	4.97	11.46	6	3.04	5.04	8	2.62	3.96
5	3.56	6.53	7	2.78	4.36	9	2.51	3.71