

# 人工智能应用于实验室检测数据智能分析方面的探究

王伟帆\*

(兰州职业技术学院, 兰州 730000)

**摘要:** **目的** 探究基于人工智能的实验室检测数据智能分析方法在提升检测结果准确性、稳定性及数据利用效率方面的作用。**方法** 以实验室常规理化含量测定项目和电气安全检测项目为研究对象, 构建面向常规理化检测与电气安全检测的实验室检测数据智能分析平台, 采集常规理化指标、电气安全参数及环境温湿度等多源检测数据, 分析仪器量程与精度等级、操作差异和环境波动对检测偏差的影响; 设计包含数据清洗、特征构建、模型训练与在线推理的处理流程, 建立基于多变量回归、集成学习与深度神经网络的智能分析模型, 对异常值识别、结果校准和趋势监测进行实验验证, 并通过图表形式与传统阈值判别和人工审核方法进行对比。**结果** 在含量测定和电气安全等代表性项目中, 智能分析模型能够有效识别异常样本, 平均绝对相对误差由 3.8% 降至 1.7%, 泄漏电流均方误差由 0.021 降至 0.009, 平均审核时间由 45.2 min 降至 20.2 min。**结论** 基于人工智能的实验室检测数据智能分析方法能够在不改变原有检测流程的前提下提高数据质量控制水平和结果解释能力, 为实验室检测结果的精细化管理和后续应用提供可靠实验依据与技术支持, 具有一定推广应用价值。

**关键词:** 实验室检测; 人工智能; 智能分析; 数据质量控制; 机器学习

## 0 引言

实验室检测在产品质量评价、安全监测及过程控制中具有基础作用, 常规检测工作产生大量连续、多批次、多指标的原始数据和质控数据<sup>[1]</sup>。以常规理化含量测定项目和电气安全检测项目为例, 日常检测中累积的结果既用于出具检测报告, 也用于方法学验证、仪器评估及质量追溯。传统数据处理与结果审核多依赖检测人员经验和固定阈值规则, 对单项明显异常具有一定识别能力, 但在复杂工况、多指标关联分析和长期趋势评估方面存在局限, 部分边缘异常和潜在风险难以及时发现, 检测数据的深度价值尚未充分挖掘<sup>[2]</sup>。本研究以实验室常规理化含量测定项目及电气安全检测项目的批量检测数据为研究对象, 针对日常检测过程中产生的大规模历史数据和实时数据开展分析。

人工智能技术在模式识别、故障诊断和预测分析等领域已得到广泛应用, 为复杂检测数据的建模与分析提供了新思路<sup>[3]</sup>。在实验室检测场景中, 将机器学习和深度学习

方法引入数据清洗、异常识别和结果校准环节, 有助于量化环境因素、仪器漂移和操作差异对结果的影响, 形成可视化、可验证的分析图表与模型输出<sup>[4]</sup>。为此, 本研究构建实验室检测数据智能分析平台, 结合实际检测流程与质量控制要求, 以典型含量测定及电气安全类项目为代表, 设计包含特征构建、模型训练及在线推理的技术路线, 通过实验数据与图表对比评估人工智能方法对检测精度、数据稳定性及处理效率的影响, 为实验室检测智能化升级提供技术参考。

## 1 材料与方法

### 1.1 系统结构与功能模块设计

基于人工智能的实验室检测数据智能分析系统由数据采集层、数据预处理与管理层、智能分析层和结果应用层构成<sup>[5]</sup>。数据采集层通过与实验室信息系统接口, 自动获取理化、生化、电气等项目的原始检测结果、室内质控记录及环境参数; 数据预处理与管理层对原始数据进行缺失值处理、异常值筛查、单位与参考区间统一以及标准化

转换; 智能分析层集成多种机器学习模型, 对检测结果进行异常识别、误差评估和趋势分析; 结果应用层将模型输出以风险标记、辅助提示和图表的形式返回, 为报告审核和质量控制提供参考<sup>[6]</sup>。

系统总体结构及数据流转关系如图 1 所示, 检测数据经采集与预处理后上传至智能分析层, 分析结果进一步传递至结果应用层, 并通过接口反馈至实验室信息系统, 实现对原有检测流程的嵌入式增强, 而无需改变现行操作规范<sup>[7]</sup>。

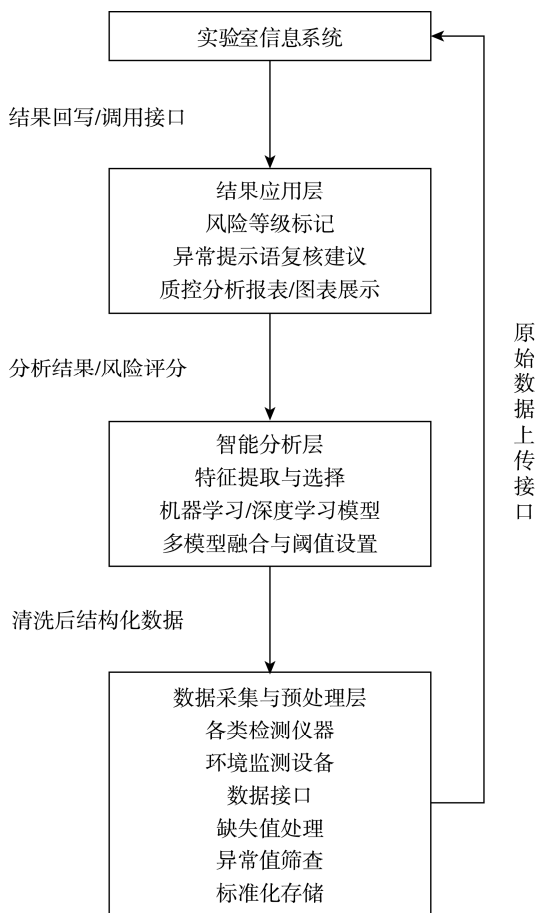


图 1 基于人工智能的实验室检测数据智能分析系统总体结构及数据流转示意图

### 1.2 实验室检测数据来源与预处理流程

研究数据以实验室常规理化含量测定项目和电气安全检测项目为主, 来源于近 3 年形成的常规检测记录, 涵盖 30 余个项目, 其中理化与生化指标约占总量的 80%, 电气安全类检测项目约占 20%。剔除信息不完整或缺乏有效质控记录的数据后, 在原始 N 条记录中, 经过严苛筛选仅保留 30000 条用于建模, 字段包括样品编号、检测项目、检测结果、单位、参考范围、仪器编号、试剂批号、检测时间、室内质控状态以及检测时的环境温度、湿度等, 日

均记录量约在 200~300 条范围内。

预处理流程: (1)缺失值处理。对随机缺失的连续变量采用同批次中位数填补, 对因仪器故障造成的大段连续缺失予以剔除。(2)异常值筛查。结合室内质控结果与  $3\sigma$  准则剔除明显失真值; 对于质控边缘批次保留并在后续特征中标记。(3)单位与参考区间统一。对同一项目在不同仪器上的单位、量程与参考区间进行统一, 转换至统一量纲下, 保留原始记录以备追溯<sup>[8]</sup>。(4)标准化处理。对参与建模的连续变量采用标准化, 设原始值为  $x$ , 则标准化值为[公式(1)]:

$$z = \frac{x - \mu}{\sigma} \tag{1}$$

式中:  $\mu$  为训练集中该项目均值;  $\sigma$  为标准差。

预处理后, 对部分代表性项目的变异系数(coefficient of variation, CV)进行对比, 结果表明, 多数项目 CV 下降约 5%~7%, 部分受环境影响较大的项目 CV 下降幅度接近 10%, 为后续智能分析提供更加稳定的数据基础。

### 1.3 特征构建与人工智能分析模型设计

在单次检测结果基础上, 结合实验室业务特点构建多类特征: (1)基础特征。检测结果、参考范围归一化值、质控状态、仪器型号、试剂批次等; (2)组合特征。同一功能组内项目的比值与差值, 如含量测定值比例、相关项目差值, 用于刻画项目间的耦合关系; (3)时间序列特征。同一样品或同一委托单位在不同批次检测结果的变化幅度与斜率, 用于识别缓慢漂移和突变; (4)环境与设备特征。检测时环境温度、湿度、仪器累计运行次数等, 用于反映环境波动与设备状态。

将“是否异常”建模为二分类问题, 选取逻辑回归、随机森林、梯度提升树和多层感知机 4 种模型进行对比。设样本标签为  $y_i \in \{0,1\}$ , 模型输出异常概率为  $p$ , 损失函数采用加权交叉熵形式[公式(2)]:

$$L = -\sum_{i=1}^N [ay_i \ln p_i + \beta(1 - y_i) \ln(1 - p_i)] \tag{2}$$

式中:  $L$  为加权交叉熵损失函数值;  $N$  为样本总数;  $y_i$  为第  $i$  个样本的真实标签, 正常样本取 0, 异常样本取 1;  $p_i$  为模型判定第  $i$  个样本为异常的概率;  $\alpha$  为正样本权重;  $\beta$  为负样本权重;  $i$  为样本序号。

将预处理后的数据按照样本主体划分为训练集、验证集和测试集, 比例约为 6:2:2, 确保同一受检对象数据不跨集合, 以避免信息泄露。数据集划分及异常样本比例统计见表 1。

以人工审核结果及复测结果作为“异常/合格”的参考标签, 评价指标包括准确率(Accuracy)、查全率(Recall)、查准率(Precision)、 $F_1$  值及受试者工作特征曲线下面积(area under the curve, AUC)。其中  $F_1$  定义见公式(3):

$$F_1 = \frac{2 \times \text{Precision} \times \text{Recall}}{\text{Precision} + \text{Recall}} \quad (3)$$

式中: Precision 为查准率; Recall 为查全率。

同时记录各模型在测试集上的平均推理时间,用于评估对批量审核效率的影响。

表 1 实验数据集划分与样本量统计

数据集	样本数/条	异常样本比例/%
训练集	18000	8.2
验证集	6000	8.0
测试集	6000	8.3

## 1.4 数据处理

实验数据采用 Python 3.10 进行预处理、建模与结果分析,使用 Pandas 2.0.3、NumPy 1.24.3、Scikit-learn 1.3.0 和 TensorFlow 2.13.0 完成数据清洗、特征提取、模型训练和性能评价。图表整理与绘制采用 Microsoft Excel 2021 和 Origin 2021 完成。各项实验均重复 3 次,取平均结果进行分析,并结合准确率、查全率、查准率、 $F_1$  值、AUC 及平均推理时间对不同模型进行综合评价。

## 2 结果与分析

### 2.1 检测误差分布与预处理效果分析

以若干代表性连续项目为例,构建测量  $E_{\text{误差}} = x_{\text{测量}} - x_{\text{参考}}$  对误差分布进行统计。预处理前,多数项目误差呈近似正态分布,标准偏差  $\sigma$  在 0.03~0.07 范围内,个别批次存在偏态和极端值;预处理后,经缺失剔除、质控筛查和单位统一,误差分布集中度明显提高, $\sigma$  降至 0.02~0.05。

对误差随时间变化的序列进行拟合,发现部分项目存在周期性漂移与局部突变叠加特性,可用简化模型描述为[公式(4)]:

$$E(t) = \alpha \sin(\omega t) + be^{-\lambda t} + \varepsilon \quad (4)$$

式中:第一项代表随环境波动产生的周期性漂移,第二项代表设备校准后逐渐衰减的瞬态误差, $\varepsilon$  为噪声项。拟合结

果表明,漂移幅值与环境温度变化相关,瞬态误差与仪器维护、试剂更换等事件相关,为后续模型中引入时间与环境特征提供依据<sup>[9]</sup>。

### 2.2 不同人工智能模型异常识别性能对比

在相同特征与数据集划分条件下,对 4 种模型在测试集上的异常识别性能进行对比,结果见表 2。

由表 2 可知,梯度提升树在 Accuracy、Recall、 $F_1$  和 AUC 指标上均优于其他模型,异常样本查全率相较逻辑回归提升约 7.8%,多层感知机和随机森林性能接近,均明显优于线性模型。综合性能与计算开销,选取梯度提升树作为系统默认主模型,其他模型作为对照与备选方案。

### 2.3 智能分析对检测结果精度与审核效率的影响

在确定主模型后,将智能分析模块嵌入实验室实际审核流程,对一段时间内的真实检测数据进行验证<sup>[10]</sup>。设相对误差[公式(5)]:

$$\delta = \frac{x_{\text{测量}} - x_{\text{参考}}}{x_{\text{参考}}} \times 100\% \quad (5)$$

式中:  $\delta$  为相对误差,%;  $x_{\text{测量}}$  为测定值;  $x_{\text{参考}}$  为参考值。

以某含量测定类项目为例,选取连续多个批次共 200 组样本,以外部能力验证结果或复测均值作为参考值。结果表明,修正前该项目典型样本的相对误差区间约为  $\pm 4.5\%$ ,修正后收窄至约  $\pm 1.8\%$ ,平均绝对相对误差由 3.8% 下降至 1.7%,重复性指标相应改善。对电气安全类项目中的泄漏电流检测结果进行类似分析,均方误差由 0.021 降至 0.009,表明多变量回归误差修正在不同项目上均具有一定通用性。

在审核效率方面,以每日约 3000 条检测记录为例,对比传统人工审核模式与“人工+智能分析辅助”模式。连续 10 个工作日统计结果显示,传统模式下每日审核时间在 44~47 min 之间波动,平均约 45.2 min;引入智能分析模块后,每日审核时间降至 19~22 min,平均约 20.2 min。基于上述 10 d 统计数据,作两种审核模式下平均审核时间的柱状对比,见图 2,可以直观反映智能分析对审核效率的改善,在保证审核质量前提下,整体效率提升约 1.5~2.0 倍。

表 2 不同模型在测试集上的性能对比

模型	Accuracy/%	Recall/%	Precision/%	$F_1$ /%	AUC
逻辑回归	92.0	79.8	78.2	79.0	0.908
随机森林	94.1	84.3	82.1	83.2	0.934
梯度提升树	95.3	87.6	85.1	86.3	0.953
多层感知机	94.7	86.0	83.5	84.7	0.946

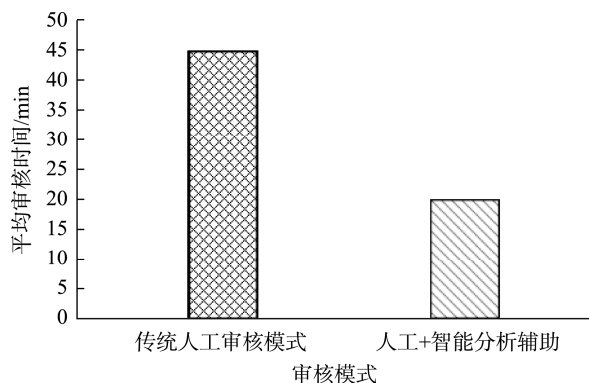


图2 不同审核模式下平均审核时间对比图

### 3 讨论与结论

本研究提出将多因素误差建模与集成学习引入实验室检测数据分析,对常规理化含量测定及电气安全检测结果进行智能评估与修正。实验结果表明,代表性含量测定项目的相对误差区间由约 $\pm 4.5\%$ 收窄至约 $\pm 1.8\%$ ,平均绝对相对误差由 $3.8\%$ 降至 $1.7\%$ ,电气安全项目泄漏电流的均方误差由 $0.021$ 降至 $0.009$ ;在此基础上,结合模型输出开展风险分级审核,可将批量审核时间由约 $45.2\text{ min}$ 降至约 $20.2\text{ min}$ ,在保证审核质量前提下显著提升了检测结果分析与审核效率。

需指出的是,本研究基于单实验室数据开展,项目类型和工况覆盖范围有限,模型在多实验室、多工况及长

期运行条件下的泛化能力和稳定性仍有待进一步验证,对误判样本的成因分析和模型可解释性也需继续加强。后续可引入多中心数据和在线学习机制,优化特征选择与阈值设定,并与实验室信息系统及质量管理模块深度集成,推进智能分析方法在实验室检测质量控制中的持续应用与推广。

#### 参考文献

- [1] 石宇, 刘小鱼, 白洋. 基于大数据分析的实验室检测数据挖掘研究[J]. 质量与市场, 2025(7): 72-74.
- [2] 张浩鹏, 范梅花, 张剑飞, 等. 存储柜综合实验教学平台设计与实践[J]. 实验室研究与探索, 2025, 44(7): 217-223, 228.
- [3] 刘永生. 基于数据中台的数字化检验检测实验室质量管理体系建设的探讨[J]. 中国检验检测, 2024, 32(4): 115-117.
- [4] 黄淮滨, 黄建平. 实验室检测数据智能实时采集系统和应用[J]. 产品可靠性报告, 2024(4): 134-136.
- [5] 辛玲. 提高企业实验室检测数据准确性的措施探讨[J]. 中国石油和化工标准与质量, 2023, 43(15): 43-44, 74.
- [6] 陈永清, 贾虹, 郭建亮, 等. 基于计算机视觉的径向跳动公差检测实验平台开发[J]. 浙江工业大学学报, 2023, 51(1): 38-41.
- [7] 刘文琳. 检测实验室检测数据质量控制关键技术探讨[J]. 云南化工, 2021, 48(12): 86-88.
- [8] 辛玲, 朱晓宁, 卢沈保. 提高企业实验室检测数据准确性的措施探讨[J]. 中国检验检测, 2021, 29(2): 63-64.
- [9] 赵雪, 崔贺民. 实验室信息化管理系统建设方案[J]. 石化技术, 2020, 27(1): 199-200, 198.
- [10] 程艳, 王时箭. 浅谈如何确保实验室检测数据准确性[J]. 中国标准化, 2017(10): 98-99.