

Application of Quantitative Analysis in Chemical Research

Li Yang

Hefei University of technology, Hefei

Abstract: Based on many years' work experience, the application of quantitative analysis in chemical scientific research was fully demonstrated through two aspects: logic operation, inference quantitative analysis and problems that should be paid attention to in quantitative analysis.

Key words: Quantitative analysis; Chemical research; Logical operation

Received: 2020-08-01; Accepted: 2020-08-09; Published: 2020-08-11

定量分析在化学科研中的应用

李 阳

合肥工业大学，合肥

邮箱: 35875690124@qq.com

摘要: 结合多年工作经验, 通过逻辑运算、推断定量分析以及定量分析应注意的问题两个大方面, 对定量分析在化学科研中的应用做了充分论证。

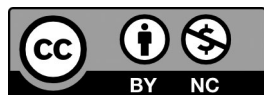
关键词: 定量分析; 化学科研; 逻辑运算

投稿日期: 2020-08-01; 录用日期: 2020-08-09; 发表日期: 2020-08-11

Copyright © 2020 by author(s) and SciScan Publishing Limited

This article is licensed under a [Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License](https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/).

<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>



对于在化学教育科研中所获得的原始数据资料、事实材料, 除了进行定性分析, 注意从总体上把握研究对象的质的属性以外, 还要进行定量分析, 使用数学分析的方法, 对来自研究对象的经整理过的数据、文字、图形乃至声音进行分析处理。

1 科研中的逻辑运算和推断

逻辑运算定量分析通过算术或逻辑运算, 抽取并推导出对于特定研究问题具有意义的数, 而后阐释数据的实际含义, 进而揭示定量分析结果的教育价值。定量分析关心分析的可靠性和结果注重普遍性, 多采用纯形式化然而又是有意义的符号(如数字)来描述研究对象的发展变化。从这种意义上说, 定量分析方法的使用为化学教育科研的成熟增色不少。但人们也应该充分注意到, 没有定性分析基础的定量分析有可能产生方向性错误, 而建立在定量分析基础之上的定性才能使分析得以深化。实际上, 化学教育科研中的定性分析与定量分析相互交织补充, 存在于整个研究的全过程。这种情况决定了人们所收集的原始

数据资料、事实材料几乎不可能精确地重现而总是在一定范围内波动。这就是说,研究工作者在从大量的、可能是杂乱无章的数据资料中寻找研究对象的特征和变化规律性时,要面对化学教育研究中数据资料的两大显著特点——原始数据资料是随机的,然而又是具有统计规律性的。对化学科研中大量的原始数据资料,按不同的标志统分组可以通过统计图(直方图、多角图等)予以表现。但是进一步的分析尚依赖于用数字去概括有关原始数据资料的统计特征,从而实现找出大量数据资料中所传递的有用化学科研信息的目的。Z分数及转换分数化学教育科研中的原始数据可以转换为以研究对象的群体平均水平为参照标准的相对值,如Z分数以及建立在Z分数基础之上的T分数等。Z分数的计算公式为:
$$Z = (X - \mu) / \sigma$$
$$Z > 0$$
,表明个体高于群体平均水平; $Z < 0$,表明个体低于群体的平均水平。但是,Z分数既有小数,又有负数,使用起来不太方便,故人们在化学教育科研中常使用以Z分数为基础的转换分数。因此,人们在化学教育科研中可用它来及时分析研究对象的学习质量波动情况,以做出正确的判断并采取措施。以济南某高校06届某班的一个学生从入学考试起的历次测验原始数据及Z分数为例,如果学生的学习状况没有明显的变化,那该生的分数应该随机波动,反映在图上就是点子围绕Z上下跳动。从点子个数来说,由于学习状况没有明显的变化,落在Z线上面和下面的机会是一样的,即在某一段时间内,Z线上方和下方的点的个数基本相等。推断、检验和预测人们在化学科研中进行定量分析时,对研究样本进行的上述特征数值的计算和分析,还只是一种数量化的描述。如果人们试图从重点研究的局部去推断对应总体的情况解释所研究的样本之间的差异,研究变量之间的依存关系则这种进一步的定量分析只能依赖于进行科学的推断、检验和预测。从研究样本的参数估计推断总体参数可以使用点估计的方法。所谓点估计,也就是用从总体随机抽取样本统计量(如平均数M,标准差S)作为样本对应参数(如 μ 、 σ)的估计值。由于进行点估计时误差的大小及可靠程度无从知道,而且根据不同的样本可以估计出不同的总体参数值,因此,人们在定量分析中多使用区间估计的方法:用数轴上的一段距离来表示总体参数可能落入的范围。实际的定量分析中人们是用样本统计量确定一个区间,使该区间以一定的概率(置信水平)套住总体的相应参数。这个区间实质

上是一个概率区间愈小, 概率愈大, 结论的可靠程度就愈高。这样的区间被称为置信区间, 其端点被称为置信限。两置信限 (即两个端点) 之间的距离称为信距。在大多数的定量分析中, 人们是根据研究样本的情况去对总体做出解释和评价的, 这就涉及从研究样本的特征数值 (参数) 去估计总体参数。在对总体参数做出估计时, 如果研究样本的统计量与总体的相应参数接近的程度越大, 就说明研究样本的统计量对于总体参数的代表性就越好, 从而研究做出的结论的可靠性越高。显然, 正确掌握总体参数的推断估计方法, 将会提高研究结果的可靠性。从研究样本的参数估计推断总体参数可以使用点估计的方法。

2 定量分析应注意的问题

对化学教育科研结果进行定量的统计分析, 除上述基础性的描述和推断分析以外, 目前人们正在越来越多地趋向于使用多元分析方法。即便在传统适用定性分析方法的领域, 也开始尝试元分析使用统计分析方法 (将对于某一问题的大量单独的研究结果进行综合, 以做出系统的结论) 等定量分析方法。另外, 模糊数学的方法也受到了重视, 因为借用模糊数学的分析方法研究化学教育现象, 可以更加接近研究对象的客观实际, 若能应用得当, 这些新方法的使用将能有力促进、推动化学教育科研的深入开展, 提高研究结论的科学水平和增强说服力, 以跟上当今世界化学教育科研发展的步伐。化学教育科研中的定量分析的统计及检验主要尝试从数据处理和定量分析来揭示化学教育规律, 应该说是一种有效的学术活动。对于获得怎样的效果才能使教学更加有效有着潜在的价值。但是定量分析只是供选用的方法中的一种, 不是所有的研究都必须使用定量分析方法的。当然定量分析也不可能解决化学教育科研中所面临的全部各种值得研究的问题。从当前国内化学教育科研中定量分析方法的使用现状看, 应该注意防止误用。因此, 有些基本问题需要加以注意。变化关系和科学实践在相关分析中从样本容量有限的数据出发得到的相关系数, 不一定能反映在更广泛的范围内有关变量之间的确切关系。此外, 相关不是因果关系, 一个变量的变化不一定是另一个变量变化的原因或结果。课后作业及课外科技活动实践、校外调查等产生的差异是无法定量检验的。但参与的经历是学生发展个性、培

养能力所必须的,也是人们所希望的,这些可能是使研究对象在以后的工作、学习中产生重大差异的根本原因。因此,定量分析与定性分析,应给予适当的关注。参数显著差异性在有关研究样本参数差异是否显著的检验中,判定两个或多个研究样本之间差异是否显著是容易做到的。但是确切鉴别应对这种差异的产生负责的独立变量是否就是研究假设中那一个而不是另外的人们尚未能了解的随机变量,则是很困难的事情。因此,人们在进行不同的化学教学过程或使用不同的教学技术之前,先仔细、全面地比较被选中参与有关研究过程的样本是非常重要的。即使差异显著,也可能根本就不具备教育价值而没有重要性。如某省的高考分数报告使用了转换分数 $T=100Z+500$ (学生分数多在 100 ~ 900 之间)。此时某个县 1250 名考生的均分为 693,另一个县 800 名考生的均分为 690,这两个均数差异经检验是显著的。但人们也很容易想到,900 分标度中 3 分差异显著,肯定不可能由此得出结论说两个县的高中化学教学情况显著不同。

参考文献

- [1] 卢丽敏,高凤,戴润英,刘光斌,马雪. 定量分析化学课程项目化教学改革与实践[J]. 广州化工,2019,47(21): 174-176.
- [2] 周文峰,鲁润华,张三兵. 定量分析化学实验课程教学内容改革及考核方法探索[J]. 大学化学,2018,33(10): 21-24.
- [3] 邓德敏. 基于学生职业能力培养的“定量分析化学”课程改革实践[J]. 北京工业职业技术学院学报,2016,15(04): 53-55.
- [4] 张海瑞,张国福,崔剑波,祁建宏,林小小. 计算机在定量分析化学实验中的应用研究[J]. 甘肃高师学报,2014,19(05): 35-39.