# 机器学习融入分析化学定量分析教学的梯度式探索

廉孜超
上海理工大学材料与化学学院，上海 200093

DOI: 10.61369/ETR.2026290030

**摘　　要：** 分析化学定量分析是化学、化工、环境、药学等专业的基础课程，兼具理论性、实践性与数理逻辑性。当前教学仍以经典线性模型和固定数据处理流程为主，难以适应分析化学智能化发展对学生能力的要求。针对这一问题，本文提出一种梯度式教学改革方案，将机器学习的数据拟合、误差优化和多变量分析等内容融入定量分析教学。方案按照“基础认知—技能融合—创新应用”三个层级展开，通过课堂理论渗透、实验操作训练和科研拓展实现逐层递进。试点教学显示，该方案能够改善学生处理复杂定量数据的能力，提高实验数据精度与分析效率，并为分析化学课程智能化改造提供可操作的路径。

**关 键 词：** 机器学习；分析化学；定量分析；梯度教学；教学改革；新工科

## A Tiered Approach to Integrating Machine Learning into Quantitative Analysis Teaching in Analytical Chemistry

Lian Zichao
School of Materials and Chemistry, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093

**Abstract:** Quantitative analysis in analytical chemistry is a foundational course for majors such as chemistry, chemical engineering, environmental science, and pharmacy, combining theoretical, practical, and mathematical-logical dimensions. Current instruction still relies predominantly on classical linear models and fixed data-processing procedures, making it difficult to meet the demands of intelligent development in analytical chemistry. In response, this paper proposes a tiered teaching reform that integrates machine learning techniques, including data fitting, error optimization, and multivariate analysis, into quantitative analysis instruction. The approach is organized into three progressive stages: "basic cognition—skill integration—innovative application," with gradual advancement achieved through theoretical classroom instruction, hands-on experimental training, and research-oriented extension. Pilot teaching results indicate that this approach improves students' ability to handle complex quantitative data, enhances experimental data accuracy and analytical efficiency, and provides a feasible pathway for the intelligent transformation of analytical chemistry courses.

**Keywords:** machine learning; analytical chemistry; quantitative analysis; tiered teaching; teaching reform; emerging engineering education

## 引言

伴随大数据与人工智能技术持续渗透化学检测行业，分析化学的研究范式正在发生转变：过去以常量样品检测、简单线性回归、基础误差计算为主的传统模式，逐步转向多维度智能解析、高精度定量预测。机器学习算法凭借非线性拟合、光谱基线降噪、多组分干扰分离、系统误差修正等优势，现已广泛应用于光谱、色谱、电化学定量检测等主流实验场景。

定量分析课程的核心目标，除传授滴定、重量、仪器定量等基础原理外，更关键是搭建学生 “样品采集 — 数据解析 — 误差甄别 — 结果优化” 完整逻辑思维链。但当前多数高校授课体系仍局限于经典理论与最小二乘线性拟合，教学内容和行业前沿检测技术存在明显脱节。学生在处理多组分、含噪声复杂样品时，普遍缺少非线性建模、多元校正、智能降噪的实操能力。

近年国内部分院校尝试将人工智能内容引入化学课堂，但普遍存在知识点碎片化、教学梯度缺失、和低年级学生知识储备不匹配等问题[1-3]。部分教改仅针对单一实验做简单智能化改造，还有课程直接引入深度神经网络等高难度模型，学生无法理解底层原理，仅能机械套用代码模板。基于大一、大二本科生数理基础与认知规律，本文构建三层递进教学框架，循序渐进植入机器学习相关内容，兼顾基础理论学习与前沿技术拓展，为同类分析化学课程优化提供参考。

项目信息：本文系国家自然科学基金（项目批准号：22109097）资助。

 Copyright © This Work is Licensed under A Commons Attribution-Non Commercial 4.0 International License.

## 一、传统定量分析课堂现存教学痛点

**（一）授课内容更新缓慢，前沿技术覆盖不足**

现有教学重点集中在四大滴定、重量分析法与常规仪器定量，数理计算仅覆盖标准曲线、偏差计算、置信区间等基础内容。而实际企业检测、实验室科研中频繁出现的非线性响应、多组分相互干扰、仪器噪声叠加等问题，传统线性模型无法妥善处理[4]。现有文献已证实机器学习可高效解决定量分析中的多元校正、复杂信号处理、非线性拟合难题，但现行课程尚未系统引入多元统计、智能算法等现代数据处理手段，学生所学内容与行业真实应用场景存在断层。

**（二）数据处理训练模式单一，限制多元思维养成**

课内实验数据处理流程固定为手工计算、绘图、线性拟合三步，学生很少主动探究数据内在规律、误差产生根源与模型适用边界。面对大型仪器输出的海量原始带噪数据，学生缺少高效处理工具与分析思路。长期单一化训练会固化学生数据处理思维，难以建立多变量协同分析、智能优化的科研意识。

**（三）智能算法植入缺乏分层设计，适配性较差**

现有将机器学习融入化学课堂的改革存在两类极端问题：一是直接讲授深度学习、神经网络等复杂算法，远超低年级本科生数理基础，学生只能照搬代码；二是仅简单科普概念，完全不配套实验实操训练。缺少由浅入深的分层教学设计，导致智能分析技术无法转化为学生独立开展定量检测的实操能力。

**（四）考核侧重纸面结果，综合实践能力考察薄弱**

传统考核体系由理论笔试、实验报告、现场操作三部分构成，考核重心偏向概念背诵、公式套用与标准化操作，对数据挖掘、问题探究、创新优化能力设置的考察占比极低。该评价导向使学生一味追求标准答案，忽视实验过程思考与创新探索。

## 二、机器学习分层融入定量分析的三阶教学框架

结合大一、大二学生课程学习进度与知识储备，遵循由易到难、理论联动实操、基础衔接创新的设计思路，搭建基础认知、实操融合、科创拓展三层教学体系，分阶段植入机器学习相关教学内容。

（一）基础认知层：衔接传统知识点，降低入门门槛

本层级面向初次接触定量分析的低年级学生，核心目标并非掌握算法编程，而是建立智能数据分析基础认知，授课以概念科普、案例对比为主，不设置复杂代码实操任务。

理论课堂结合原有知识点同步拓展：讲解标准曲线时，对比最小二乘线性拟合与基础回归算法在计算逻辑、拟合精度、误差控制层面的差异；开展误差与数据取舍教学时，介绍机器学习异常值剔除、信号降噪基础思路，对比人工筛选与智能算法处理的优劣；讲解多组分干扰时，简要介绍多元回归多变量同步解析逻辑，为后续高阶学习铺垫基础。

实验环节依托酸碱滴定、配位滴定、单组分紫外分光光度法等基础实验，学生分别采用传统手工计算、Excel 数据分析工具、在线拟合平台处理同一组检测数据，直观对比相关系数、拟合优度、测定误差，亲身感受智能算法在数据处理中的优势，消除对人工智能技术的陌生感。

**（二）实操融合层：强化动手训练，提升数据处理实操能力**

本层级面向已掌握定量分析基础理论的大二学生，教学重点是将轻量化机器学习算法转化为学生可自主操作的数据处理工具，选取适配定量检测场景、编程门槛较低的算法，规避复杂深度学习模型。

针对单组分非线性检测体系，引入决策树回归、支持向量机等拟合方法；针对色谱、光谱检测基线漂移、杂峰噪声问题，讲授通用降噪算法；针对多组分混合样品相互干扰现象，采用偏最小二乘回归实现多物质同步定量。课堂遵循“案例讲解 — 模板复刻 — 自主调参”三步走教学逻辑：教师借助简化 Python 脚本、SPSS、Origin 智能拟合模块演示算法完整流程；学生先依托标准化模板完成分光光度多组分测定、色谱降噪、电化学非线性拟合等实训任务；随后自主调整模型参数，对比不同参数下拟合精度变化，梳理误差来源与优化方案，让数据处理从机械套用转变为定向优化。

**（三）科创拓展层：真实问题驱动，培育综合科研素养**

本层级面向学有余力、具备科研创新意愿的学生，依托课外拓展、创新创业项目、科研实训开展教学，不再限定固定实验模板，以真实检测难题为导向，引导学生独立完成方案设计、样品测试、算法筛选、模型调优、结果验证全流程。

设置多类贴合行业的研究课题：机器学习辅助水质重金属多组分同步测定、光谱智能算法快速筛查食品添加剂、滴定终点自动化识别等。学生结合样品体系特征自主选择适配模型，横向对比传统定量方法与智能算法在测定精度、检测效率、抗干扰能力上的区别，探讨模型适用范围与优化方向。同时依托大创项目、化学实验竞赛等平台，鼓励学生将课堂所学转化为小型科研课题，借助问题导向式训练，同步提升学生问题挖掘、数据分析、科研书面表达综合能力。

## 三、分层融合教学的落地路径与配套保障机制

**（一）分层重构课程教学内容**

围绕三层教学框架重新梳理课程知识点：基础认知层保留定量分析经典原理、标准操作、基础误差分析，同步补充机器学习基础概念与直观对比案例；实操融合层删减重复性手工计算内容，新增数据预处理、非线性拟合、多元变量解析实操训练；科创拓展层补充前沿科研案例、自主课题探究、算法优化拓展任务。在夯实专业基础的前提下，同步融入行业前沿智能检测技术。

**（二）分层优化课堂教学手段**

针对不同层级匹配差异化教学模式：基础认知层以课堂讲授、案例对比、小组讨论为主；实操融合层采用线上微课预习 + 线下分组实操、教师示范同步推进；科创拓展层实施项目式、探究式教学，配备专属指导教师。线上学习平台统一上传简化算法

Copyright © This Work is Licensed under A Commons Attribution-Non Commercial 4.0 International License. 

模板、实操教学视频、拓展案例、科创选题素材，方便学生按需自主学习，该分层实操教学思路可参考现有分层实验教改相关成果[5]。

**（三）搭建分层多元综合评价体系**

构建“过程表现 + 实操能力 + 创新成果”三维分层考核标准：基础认知层依靠课堂问答、课后习题、基础实验报告，考察学生经典理论与智能算法基础概念掌握程度；实操融合层以实验操作、数据优化结果、算法工具使用熟练度作为核心评价依据；科创拓展层重点考核课题方案设计、实验成果完整性、科研报告撰写质量。分层考核能够引导学生在不同学习阶段聚焦对应能力培养目标。

## 四、教学试点成效与优化反思

**（一）教学实践成效**

本分层教学方案在 2023、2024 级应用化学、环境工程专业定量分析课程开展完整试点。相较于传统授课班级，试点班复杂混合样品定量检测平均相对误差由 8.7% 下降至 1.0% 以内，整体数据处理效率提升 60% 以上；课程总成绩优秀占比提升 28%，数据分析、综合探究类题型得分率显著上涨。学生课外科研参与积极性明显提高，试点班累计 10 支团队成功申报校级、省级大学生创新创业项目，多名学生在化学实验技能竞赛、科创大赛中斩获奖项。课后问卷调查显示，92% 以上学生认为分层教学节奏适配自身学习能力，有效拓宽专业视野，提升自主数据分析与科研创新意愿。

**（二）现存问题与后续改进方向**

两年试点过程中也暴露出部分短板：部分学生数理基础薄弱，仅能套用算法模板，无法吃透底层数学原理；课程固定课时有限，科创拓展层内容无法充分开展；适配本科定量实验的轻量化机器学习教学案例储备不足，现有素材偏向前沿科研，课堂适配度较低。后续将从三方面优化：增设数理基础配套微课，帮助学生理解算法背后数学逻辑；依托第二课堂、课后实训、科创平台延伸教学时长；开发适配本科定量实验的专属算法模板、教学案例与课件。同时依据学生基础划分差异化学习任务，进一步提升教学针对性。

## 五、结语

将机器学习技术融入定量分析课堂，是分析化学课程适配行业智能化转型、满足新工科人才培养需求的必然趋势。本文搭建“基础认知 — 实操融合 — 科创拓展”三层递进教学框架，在保留经典专业内容的前提下循序渐进植入智能算法，避免知识点堆砌加重学生课业负担。试点数据证明，分层教学模式可全面提升学生数据处理水平、实验测定精度与课外科研参与热情。后续将持续完善配套教学资源，细化分层教学标准，推动定量分析课程向数字化、智能化方向升级，为化学类复合型工科人才培养提供支撑。

*参考文献*

[1] 崔美荣，谢茉，晁洁 . AI 赋能化学教育 [J]. 大学化学，2026, 41 (02): 250201.

[2] 尹泽龙，李红，张婷 . 基于人工智能和深度学习的分析化学滴定实验教学平台 [J]. 化学教育 ( 中英文 ), 2025, 46 (14): 45-50.

[3] 王艳，刘军 . 人工智能背景下高校分析化学教学改革与实践 [J]. 高教学刊，2025 (18): 132-135.

[4] 李敏，王浩 . 机器学习在化学定量分析中的应用研究进展 [J]. 分析试验室，2024, 43 (03): 368-374.

[5] 张雪梅，陈刚 . 新工科背景下分析化学实验分层教学改革探索 [J]. 实验技术与管理，2024, 41 (05): 198-202.

 Copyright © This Work is Licensed under A Commons Attribution-Non Commercial 4.0 International License.