

数智化革新：化学生物学综合设计实验教学模式重构

任 婷, 孙国辉, 赵丽娇, 张 娜*

北京工业大学化学与生命科学学院环境与病毒肿瘤学北京市重点实验室, 北京

收稿日期: 2025年4月11日; 录用日期: 2025年5月13日; 发布日期: 2025年5月20日

摘要

在数智化时代背景下, 生成式AI为化学生物学综合实验教学带来革新性突破。针对传统验证性实验存在的创新束缚、跨学科整合不足及安全风险限制等问题, 提出基于生成式AI的智能教学体系重构方案。通过Transformer等AI深度学习模型实现复杂分子结构生成, 构建虚实联动的虚拟仿真实验空间和智能资源推送机制。典型教学案例显示, AI辅助的分子设计工作坊和强化学习驱动的合成路径优化模块可显著提升学生创新能力, 助力学生科研素养及批判性思维系统性的培养。重塑实验教学模式, 为交叉学科教育范式转型提供实践路径。

关键词

数智化, AI, 化学生物学, 综合设计实验, 教学模式

Digital Intelligence-Driven Innovation: Restructuring the Teaching Mode of Comprehensive Design Experiments in Chemical Biology

Ting Ren, Guohui Sun, Lijiao Zhao, Na Zhang*

Beijing Key Laboratory of Environmental and Viral Oncology, College of Chemistry and Life Science, Beijing University of Technology, Beijing

Received: Apr. 11th, 2025; accepted: May 13th, 2025; published: May 20th, 2025

*通讯作者。

Abstract

In the context of the digital intelligence era, generative AI has brought revolutionary breakthroughs to comprehensive experimental teaching in chemical biology. Addressing issues such as innovation constraints, insufficient interdisciplinary integration, and safety risk limitations in traditional verification-based experiments, this paper proposes a reconstruction scheme for an intelligent teaching system based on generative AI. Through AI deep learning models like Transformer, complex molecular structure generation is achieved, constructing an interactive virtual-real experimental space with intelligent resource push mechanisms. Typical teaching cases demonstrate that AI-assisted molecular design workshops and reinforcement learning-driven synthetic pathway optimization modules can significantly enhance students' innovative capabilities, supporting the systematic cultivation of their scientific research literacy and critical thinking. This reconstruction of the experimental teaching model provides a practical path for the transformative evolution of interdisciplinary education paradigms.

Keywords

Digital Intelligence, AI, Chemical Biology, Comprehensive Design Experiment, Teaching Model

Copyright © 2025 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

以生成式 AI 技术革新为特征的数智化时代为交叉学科教育转型注入新动能。当前化学生物学专业实验教学面临验证性实验束缚创新思维、跨学科整合不足及安全风险限制探索等瓶颈。聚焦生成式 AI 技术赋能机制, 通过构建虚实联动实验空间与动态课程图谱, 重构综合设计实验教学模式。结合分子设计智能工作坊与合成路径优化模块等实践案例, 验证 AI 在提升学生创新能力和科研素养中的显著效能, 为交叉学科教育范式革新提供理论支撑与实践路径。

2. 数智化技术赋能机理

生成式 AI 等数智化技术展现出强大的赋能机理, 为化学生物学综合设计实验中实验教学带来了新的突破。

2.1. 深度学习架构的认知突破

Transformer 作为 AI 深度学习模型, 在复杂分子结构生成中发挥着关键作用[1]。在处理分子数据时, Transformer 模型将分子结构表示为一系列的原子序列, 通过自注意力机制计算每个原子与其他原子之间的关联权重, 从而准确地学习分子的结构特征。例如, 在预测药物分子的三维结构时, Transformer 模型可以根据原子的型、化学键的连接方式等信息, 生成更为合理的分子构象[2][3]。

深度学习模型生成对抗网络(GAN)在实验方案优化中也具有重要作用[4][5]。GAN 由生成器和判别器组成, 生成器尝试生成符合要求的实验方案, 判别器则负责判断生成的方案是否真实有效[6]。两者通过不断的对抗训练, 使得能够生成越来越高质量的实验方案。以化学合成路径预测为例, 可以根据已知的反应物和目标产物, 生成可能的合成路径, 并对这些路径的可行性进行评估。通过多次迭代训练, 生

成器能够生成更优的合成路径，提高实验的成功率和效率。

2.2. 交互式知识建构的实现路径

AI 代理在实验教学中的动态反馈机制是实现交互式知识建构的重要途径[7]。在实验过程中，AI 代理可以实时监测学生的操作行为和实验数据，根据预设的规则和模型，为学生提供及时的反馈和建议。例如，当学生在实验操作中出现错误时，AI 代理可以立即指出错误并提供正确的操作方法；当实验结果出现异常时，AI 代理可以帮助学生分析原因并提出改进措施。

智能系统还具备对师生认知偏差的修正能力。在实验设计迭代优化过程中，智能系统可以收集师生的设计方案和反馈意见，通过数据分析和模型计算，发现其中存在的认知偏差。例如，师生可能对某些实验参数的重要性存在误解，智能系统可以通过模拟实验和数据分析，以可视化方式为师生提供更准确的参数建议，优化实验设计。

3. 传统实验教学模式困境解析

3.1. 验证性实验的效能瓶颈

传统实验教学中，验证性实验占据主导地位，其标准化的实验流程严重束缚了学生的创新思维[8]。学生往往只需按部就班地依照既定步骤操作，机械地验证已有的理论知识；学生自主思考和探索的空间缺失，很少有机会去思考实验原理背后是否存在其他可能性，或尝试不同实验方法，难以激发探索和创新意识。

同时，实验资源配置效率低下也是一个突出问题。一方面，实验设备和试剂的分配不合理，部分热门实验项目的设备和试剂供不应求，而一些冷门项目的资源则大量闲置。另一方面，实验时间安排不够灵活，学生只能在规定的时间内进行实验，无法根据自己的进度和需求进行调整。这种结构性问题导致实验资源无法得到充分利用，降低教学效能。

3.2. 综合设计能力的培养断层

化学生物学专业要求学生具备跨学科的知识和综合设计能力，能够将化学和生物学的理论与方法相结合，解决实际问题。然而，传统教学往往将化学和生物学实验分开进行，缺乏两者之间的有机融合，这种学科之间的壁垒使得学生难以将理论知识融会贯通，形成跨学科的思维方式和综合设计能力。

同时，实验安全风险也对学生的创新探索形成了限制。在化学生物学实验中，涉及许多有毒有害的试剂和危险的操作，为确保实验安全，在一定程度上限制了学生的创新尝试[9]。这与化学生物学专业的培养目标要求学生具备勇于探索和创新的精神相矛盾。因此，如何在保障实验安全的同时，鼓励学生进行创新探索，是传统实验教学模式需要解决的一个重要问题。

4. 智能实验教学体系的重构实践

4.1. 虚实联动的实验空间构建

在化学生物学综合实验教学中，虚实联动的实验空间构建是智能实验教学体系重构的重要一环。数字孪生技术可现实实验体系的准确模型化描述，在危险实验模拟中发挥着关键作用[10][11]。通过创建与真实实验环境高度相似的虚拟模型，学生可以在虚拟空间中进行危险实验操作，如涉及有毒有害试剂、高温高压等场景。数字孪生模型能够实时反馈实验结果，让学生在安全的环境中积累实验经验，避免了实际操作中的安全风险。

智能教具与实体实验设备的协同机制也不容忽视。当前智能教具正从单一功能设备向感知 - 决策 -

执行一体化系统发展，可以对实体设备进行实时监测和控制，实现数据的实时传输和共享。集成温度、pH、光谱等多模态智能传感器等实验操作类智能教具可以实时采集实验数据，并将其传输到虚拟实验平台，让学生能够更直观地观察实验过程和结果。

虚拟试剂库建设是虚实联动实验空间的重要组成部分。虚拟试剂库包含了丰富的试剂信息，学生可以在虚拟实验平台上选择所需试剂进行实验模拟，不仅节省了实验成本，还避免了试剂的浪费。同时，智能安全监控系统设计能够实时监测实验过程中的安全隐患，如温度、压力、气体浓度等参数的异常变化，并及时发出警报，确保实验过程的安全。

4.2. 动态课程图谱的生成策略

动态课程图谱的生成策略是智能实验教学体系重构的核心内容之一，其基于 AI 驱动的学生能力矩阵模型，对学生的知识水平、实验技能、学习兴趣等多方面进行综合评估。学生能力矩阵模型通过收集学生在课堂学习、实验操作、作业测试等环节的数据，构建出每个学生的能力画像。例如，记录学生在不同实验项目中的操作熟练度、对实验原理的理解程度、解决问题的能力等。

经教师训练的 AI 根据学生能力矩阵模型，分析学生的优势和不足，为学生精准匹配适合的实验项目。对于基础薄弱的学生，算法会优先推荐一些基础性、验证性的实验项目，帮助他们巩固知识和技能；对于能力较强、具有创新思维的学生，则会推荐一些综合性、探索性的实验项目，激发他们的创新能力。例如，在化学生物学实验中，对药物合成有浓厚兴趣且具备一定化学基础的学生，算法会推荐相关的药物分子设计与合成实验项目。

教学资源智能推送机制也是动态课程图谱生成的重要组成部分。根据学生匹配到的实验项目，系统会自动推送实验指导书、视频教程、参考文献等相关教学资源。这些教学资源会根据学生的学习进度和需求进行动态调整。例如，当学生在实验过程中遇到困难时，系统会及时推送相关的解决方案和拓展知识，帮助学生顺利完成实验。同时，教学资源智能推送机制还会考虑学生的学习风格和偏好，为学生提供个性化的学习体验。通过 AI 驱动的个性化实验项目匹配算法和教学资源智能推送机制，动态课程图谱能够为每个学生提供量身定制的实验学习路径，提高教学效果和学生学习质量。

5. 典型教学场景实施案例

5.1. 分子设计智能工作坊

在分子设计智能工作坊中，生成式 AI 在药物分子构效关系研究中提供全程辅助。工作坊开始时，师生将研究需求，如目标药物的治疗靶点、期望的药效等信息输入到生成式 AI 系统中。AI 基于强大的算法和海量的数据库，迅速生成一系列可能的药物分子结构。

师生对这些初始结构进行初步筛选和讨论，将意见反馈给 AI。AI 根据反馈对分子结构进行优化，进一步预测其构效关系。在这个过程中，师生协作模式发生转变，从传统的教师主导变为师生共同探索。教师更多地是引导学生分析 AI 生成的结果，学生则积极参与到结构筛选和优化建议中。

经过多次迭代优化，生成详细的实验方案，包括合成路线、实验条件等，最终确定最佳的药物分子设计方案，得到预测结果较为理想的药物分子。整个流程充分体现了生成式 AI 在药物分子构效关系研究中的高效性和精准性，提升师生的协作能力和科研水平。

5.2. AI 学习模型优化实验路径

AI 强化学习在化学生物学综合设计实验路线规划中有着独特的实施路径。首先，为强化学习模型设定初始的实验环境、内容和目标，模型通过不断尝试不同的实验操作步骤及模拟生成的结果，评估每一

步的优劣。通过大量尝试和学习,逐渐找到最优路径。如果出现失败案例,智能诊断功能则会发挥作用。通过分析实验数据,找出可能导致状态异常的原因。以 UPLC 法测定香豆素含量实验为例,智能诊断发现液相色谱仪柱压过高,建议清洗管路、使用保护柱、过滤样品等尝试。通过调整参数,再次实验取得了更好的结果。从学习曲线来看,随着实验次数的增加,模型找到最优路径的效率逐渐提高,体现了强化学习的有效性。

5.3. 智慧学伴辅助实验实施全阶段

AI 作为智慧学伴在实验全程发挥着重要作用,尤其是在实验方案设计和实验总结阶段。在实验方案设计阶段,学生可以向 AI 描述实验目标和现有的实验条件。AI 会根据这些信息,结合化学生物学综合设计实验项目知识库,生成多种可行的实验方案。同时,对每个方案的优缺点进行分析,帮助学生选择最适合的方案。

在实验过程中, AI 实时监测实验数据,当出现异常情况时及时提醒学生,并提供可能的解决方案。在实验总结阶段,帮助学生整理实验数据,生成可视化的图表和报告;对实验结果进行深入分析,指出实验中的优点和不足,并提出改进建议。通过 AI 辅助,学生能够更高效地完成实验,提高实验技能和科研能力。

6. 教学成效评估与持续改进

6.1. 多维评价指标体系建设

为全面评估基于生成式 AI 的化学生物学专业综合设计实验教学成效,构建包含创新指数、协作效能、技术驾驭度的评估模型。创新指数主要衡量学生在实验设计、方案优化等方面的能力,包括提出新的实验思路、改进现有实验方法等。协作效能关注学生在团队合作中的表现,如沟通能力、分工协作能力、问题解决能力等。技术驾驭度则评估学生对生成式 AI 等智能技术的掌握和应用能力,如能否熟练使用相关软件和工具进行实验设计和数据分析。

在指标权重分配上,创新指数占比 40%,以突出对学生创新能力的培养;协作效能占比 30%,强调团队合作在化学生物学实验中的重要性;技术驾驭度占比 30%,体现数智化时代对学生技术应用能力的要求。

动态评价数据的采集方法包括:通过实验报告、项目成果展示等收集学生的创新成果;利用在线协作平台记录学生在团队合作中的表现;通过智能教学系统监测学生对技术工具的使用频率和操作熟练度等。

6.2. 教学反馈的智能诊断系统

基于自然语言处理(NLP)的质性评价分析技术是教学反馈智能诊断系统的核心。该技术能对学生的实验报告、课堂讨论记录等文本数据进行深度分析,挖掘其中的关键信息和潜在问题。例如,通过分析学生对实验结果的讨论,判断其对知识点的理解程度和思维逻辑的严密性;发现问题后,系统会根据问题类型和严重程度,自动生成针对性的改进建议,如补充相关理论知识、优化实验步骤等,有效提升教学质量。

7. 教育范式变革的深远影响

7.1. 科研素养培养的范式跃迁

生成式 AI 在化学生物学综合实验教学中的应用,为学生发现问题、解决问题等科研素养培养带来范

式跃迁。传统教学模式下,学生主要依据教材和教师指导开展实验,问题发现多局限于既定框架。生成式AI能够快速处理海量数据,为学生提供多维度的信息视角,学生借助生成式AI分析大量的实验数据和文献资料,能更敏锐地发现实验现象背后隐藏的科学问题。

同时,生成式AI也为批判性思维培养开辟了新路径。它提供的多样化观点和解决方案,促使学生对传统的研究方法和结论进行反思和质疑。以我国科研工作者曹原为例,他在石墨烯超导领域的研究中,借助类似生成式AI的先进数据分析工具,对已有的理论和实验结果进行批判性思考,最终发现了石墨烯的超导现象[12]。这种批判性思维的培养,有助于学生在科研道路上不断创新和突破。通过与AI的交互,学生能够不断质疑、验证,从而提升科研素养。

7.2. 教育伦理体系的智能重构

随着AI技术在化学生物学综合实验教学中的广泛应用,教育伦理体系的智能重构迫在眉睫。其中,学术诚信保障机制是关键。为保障学术诚信,预防对AI的过度依赖,可建立基于AI和区块链的学术诚信及成果溯源监测系统,区块链具有不可篡改和可追溯的特性,将学生的学术成果(如实验报告、论文等)进行记录,识别是否存在抄袭、剽窃等行为,确保成果的真实性和原创性。一旦发现学术不端行为,可通过区块链追溯到源头,确保学术成果的可信度。

人机协同的权责边界问题也不容忽视。在实验教学中, AI作为辅助工具,为学生提供数据和建议,但最终的决策和操作仍由学生完成。学生要对AI提供的建议进行批判性评估,确保研究的科学性和可靠性。同时,对于因AI错误导致的研究失误,应明确责任归属,避免权责不清。



Figure 1. Digital and intelligent teaching framework diagram of comprehensive design experiments in chemical biology
图 1. 化学生物学综合设计实验数智化教学框架图

8. 结语

通过生成式AI等数智化技术重构化学生物学综合实验教学模式(图1),突破传统验证性实验的认知

局限,通过AI辅助的分子设计工作坊强化学生的科研问题发现能力。未来需进一步探索生成式AI在教育伦理治理、师生角色重塑等维度的深层影响,为机协同的智能实验教学生态构建和培养具有创新思维与卓越实践能力的高素质复合型人才提供持续动能。

基金项目

北京工业大学化学与生命科学学院本科教学改革项目(项目编号:055000513102);北京工业大学研究生培养模式改革——2024成果培育项目(项目编号:055000514125504);北京工业大学教育教学研究课题——基于“双PBL驱动导向,科教协同引领”的化生医药交叉创新人才培养模式探索与实践(项目编号:ER2024RCA02)。

参考文献

- [1] Vaswani, A., Shazeer, N., Parmar, N., et al. (2017) Attention Is All You Need. *Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems*, Long Beach, 4-9 December 2017, 6000-6010.
- [2] 王欣. 基于GNN和Transformer的化合物-蛋白质亲和力预测研究[D]: [硕士学位论文]. 兰州: 兰州大学, 2023.
- [3] 杨蕴, 裴朝翰, 崔骥, 等. 基于Transformer模型的人工智能肺癌方证结合预测系统构建[J]. 北京中医药, 2024, 43(2): 208-211.
- [4] Ji, R. (2021) A Commentary of Multi-Skilled AI in MIT Technology Review 2021. *Fundamental Research*, 1, 844-845. <https://doi.org/10.1016/j.fmre.2021.11.014>
- [5] 汪美琴, 袁伟伟, 张继业. 生成对抗网络GAN的研究综述[J]. 计算机工程与设计, 2021, 42(12): 3389-3395.
- [6] Wu, S.Q. and Li, X.M. (2020) Survey on Research Progress of Generating Adversarial Network. *Journal of Frontiers of Computer Science and Technology*, 14, 377-388.
- [7] 刘霞.“AI代理”: 科技企业竞逐的新赛道[N]. 科技日报, 2024-10-28(004).
- [8] 连沁怡, 肖宠馨, 林政, 等. 无机化学实验多模式融合课程教学改革与实践[J]. 实验室科学, 2025, 28(1): 78-82+87.
- [9] 陶呈安, 黄坚, 李玉姣. 大学化学实验教学人工智能的应用探讨[J/OL]. 大学化学, 2025: 1-6. <http://kns.cnki.net/kcms/detail/11.1815.O6.20250122.0935.004.html>, 2025-03-24.
- [10] 张艺华, 张焱. 数字孪生技术在食品专业虚拟仿真实验新型教学模式的应用[J]. 农产品加工, 2024(6): 125-130.
- [11] 邓玲玲. 高校高危实验数字孪生预案分析与遥操作安全技术[J]. 教育教学论坛, 2024(32): 44-47.
- [12] 许栩, 俞晓晴. 《自然》2018年度十大科学人物[J]. 世界科学, 2019(1): 10-14.