

人工智能赋能《计算机在化学化工中的应用》课程的教学改革探索

程海军^{1*}, 谭超¹, 姚谦¹, 金成国¹, 张丹¹, 汪琴琴¹, 陈立²

¹宜宾学院, 过程分析与控制四川省教育厅高校重点实验室, 材料与化学工程学院, 四川 宜宾

²和光同程光伏科技(宜宾)有限公司, 四川 宜宾

收稿日期: 2026年9月14日; 录用日期: 2026年10月13日; 发布日期: 2026年10月22日

摘要

在人工智能(Artificial Intelligence, AI)与教育深度融合的数字化时代,《计算机在化学化工中的应用》作为连接信息技术与化工学科的核心课程,其传统教学模式面临知识迭代滞后、实践场景受限、个性化培养不足等现实挑战。本文结合课程核心章节内容,利用AI赋能教学体系。通过剖析传统教学痛点,提出AI在文献检索与管理、实验设计与数据分析、图形编辑与工艺模拟等模块的具体应用路径。基于TPACK和SAMR理论视角,构建三阶递进式AI赋能教学框架,并建立多元评价体系,为化工类课程数字化转型提供参考。

关键词

人工智能, 计算机在化学化工中的应用, 应用路径, 人机协同

Exploring Teaching Reform in the Course “Applications of Computers in Chemistry and Chemical Engineering” Empowered by Artificial Intelligence

Haijun Cheng^{1*}, Chao Tan¹, Qian Yao¹, Chengguo Jin¹, Dan Zhang¹, Qinqin Wang¹, Li Chen²

¹School of Materials and Chemical Engineering, Key Laboratory of Process Analysis and Control, Sichuan Provincial Department of Education, Yibin University, Yibin Sichuan

²Heguang Tongcheng Photovoltaic Technology (Yibin) Co., Ltd., Yibin Sichuan

Received: September 14, 2026; accepted: October 13, 2026; published: October 22, 2026

*通讯作者。

文章引用: 程海军, 谭超, 姚谦, 金成国, 张丹, 汪琴琴, 陈立. 人工智能赋能《计算机在化学化工中的应用》课程的教学改革探索[J]. 职业教育发展, 2026, 15(10): 318-325. DOI: 10.12677/ve.2026.1510443

Abstract

In the digital age, where artificial intelligence (AI) is deeply integrated with education, “Applications of Computers in Chemistry and Chemical Engineering” serves as a core course bridging information technology and chemical engineering. However, its traditional teaching model faces practical challenges such as lagging behind in knowledge updates, limited practical scenarios, and insufficient personalized instruction. This paper integrates AI into the teaching system by drawing on the core content of the course. By analyzing the pain points of traditional teaching, it proposes specific application pathways for AI in modules such as literature retrieval and management, experimental design and data analysis, and graphical editing and process simulation. Based on the TPACK and SAMR theoretical frameworks, it constructs a three-stage, progressive teaching framework empowered by AI and establishes a diversified assessment system, providing a reference for the digital transformation of chemical engineering courses.

Keywords

Artificial Intelligence, Applications of Computers in Chemistry and Chemical Engineering, Application Pathways, Human-Machine Collaboration

Copyright © 2026 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

人工智能已成为推动化工产业数字化与智能化转型的重要技术力量[1]。从 AI 辅助分子设计、材料筛选到数字孪生与智能过程优化,人工智能正在改变化学化工领域的研究与工程实践方式[2]。《计算机在化学化工中的应用》作为连接信息技术与化学化工专业知识的重要课程[3],其教学目标也需要由传统的软件操作训练向数字化、智能化条件下的综合问题解决能力培养拓展。

随着生成式人工智能快速发展,国内外有关 AI 赋能高等教育的研究逐渐由智能问答、资源生成等工具性应用向课程设计、个性化学习、实验教学、问题解决和学习评价等教学过程延伸[4][5]。在 STEM 和工程教育领域, AI 已被应用于程序设计、工程设计、实验方案生成、数据分析、虚拟仿真和学习反馈等场景。相关研究表明, AI 能够拓展学习资源、降低复杂工具使用门槛并为开放性问题解决提供支持,但同时也带来生成信息可靠性、学生过度依赖、专业判断弱化以及学术规范等问题[6]。因此, AI 赋能专业课程的关键并非简单增加智能工具,而在于如何将 AI、专业软件、学科知识与教学活动进行有效的整合。

从教育技术整合理论看, Technological pedagogical content knowledge (TPACK)框架强调技术知识、教学法知识和学科内容知识之间的协同关系,为 AI 与专业课程融合提供了重要理论视角[7]。Substitution-augmentation-modification-redefinition (SAMR)模型则从替代、增强、修改和重定义四个层次描述技术介入教学任务的深度,强调数字技术应用应由提高原有任务效率逐步走向学习活动与任务结构的重构[8]。二者表明,判断 AI 是否真正赋能课程,不能仅关注“是否使用 AI”,还需要考察 AI 是否与学科知识、教学活动形成协同,以及是否推动学习任务和能力培养方式发生实质性改变。

当前,课程教学面临三重矛盾:一是知识迭代速度与教学内容更新的矛盾,化工软件与计算方法日新月异,传统教材内容滞后于行业实践[9];二是统一化教学与个性化需求的矛盾[10],学生数字化素养差

异显著，难以实现精准施教；三是实践资源局限与能力培养要求的矛盾，高端软件实操和工艺模拟等实训条件不足。人工智能技术的发展为破解这些矛盾提供了新路径，其在智能辅导[11][12]、虚拟实训、数据处理[13][14]等方面的优势，可推动课程实现从工具应用到智能创新的跃升。

基于此，本文以《计算机在化学化工中的应用》课程核心内容为载体，构建从基础层到进阶层再到高阶层三阶递进式 AI 赋能教学框架。其中，基础层侧重 AI 辅助工具应用，进阶层强化 AI 驱动的数据分析与科学思维，高阶层推动 AI 与专业软件协同开展模拟分析和创新实践；同时构建教师、学生与 AI 协同的教学及多元评价机制，为人工智能背景下化学化工类数字化课程改革提供参考。

2. 传统教学痛点分析

2.1. 知识传递效率低，与前沿脱节

课程的知识组成如图 1 所示，在计算机文献检索章节，学生主要依赖关键词匹配等传统方法，检索获得的文献有成千上万篇，学生也因此陷入信息过载的困境，难以精准定位学科前沿成果；在文献管理环节中，传统工具仅能实现文献存储、分类与非标准化的引用，缺乏对文献内容的深度解析与关联分析能力，导致学生撰写综述时需耗费大量时间手动归纳。同时，课程内容更新周期长，ChemDraw、Visio、Materials Studio 和 Aspen 等软件的新版本功能和 AI 驱动的化工模拟新方法等前沿内容难以快速融入教学。

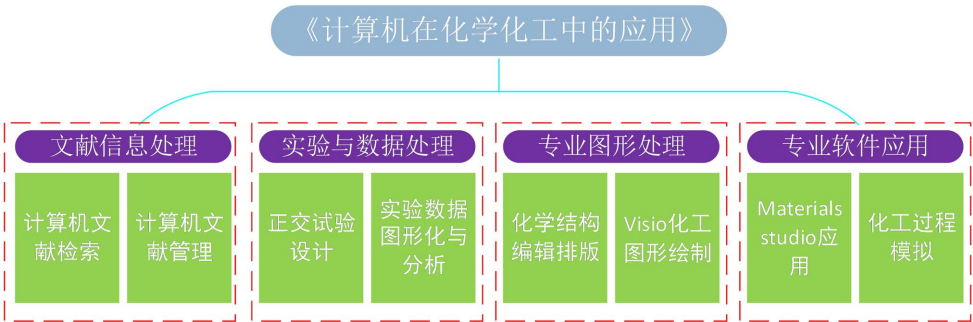


Figure 1. The knowledge components of the course
图 1. 课程的知识组成

2.2. 实践教学局限性显著，能力培养单一

在正交试验设计章节中，学生大多通过纸质案例练习设计方法，无法直观感受参数调整对实验结果的影响，更缺乏基于大数据的优化思维训练；化工过程模拟环节受限于软件许可与硬件条件，学生只能通过观看课件，了解简单的流程模拟，无法开展复杂工艺的动态优化与故障诊断实训。在化学结构编辑和 Visio 绘图等模块，教学多停留在操作步骤讲解，对学生的设计创新性与规范性缺乏有效指导手段。

2.3. 教学评价体系僵化，反馈机制滞后

传统评价以作业和考试为主，侧重工具操作的正确性，忽视对学生数据思维、创新意识等高阶能力的考核。在实验数据图形化与分析章节，教师难以全面评判学生图表设计的合理性与数据分析的深度；Materials Studio 软件的实操评价依赖人工检查，存在标准模糊、反馈延迟等问题。这种评价模式导致学生重操作、轻思考，难以形成数据采集、分析、优化和决策的完整思维链。

2.4. 个性化教学缺失，适配性不足

学生的计算机基础和化工专业知识储备差异较大，但传统教学采用一刀切模式。数字化素养薄弱的

学生在软件操作中常因步骤繁杂产生畏难情绪，而能力较强的学生则因内容简单缺乏挑战。这种差异导致教学效果两极分化，难以实现因材施教的育人目标。

3. AI 赋能课程教学的改革方案设计

针对课程知识更新滞后、实践场景不足以及学生综合应用能力培养不足等问题，本文借鉴 TPACK 框架与 SAMR 模型构建课程改革理论参照。TPACK 强调技术知识、教学法知识和学科内容知识之间的协同整合。在本课程中，文献检索与管理、实验设计、数据分析、专业绘图、分子模拟和过程模拟构成专业教学内容，AI 及相关数字工具构成技术支持，分层教学、人机协同和项目实践构成教学组织方式。因此，AI 赋能并非将智能工具附加于原有软件教学，而是通过三者协同重新组织教学活动。

Table 1. The relationship between TPACK, SAMR and the three-stage progressive framework
表 1. TPACK、SAMR 与本文三阶递进框架的关系

理论/模型	核心关注	主要内容	对本课程改革的启示
TPACK	技术、教学法与学科内容如何协同	TK、PK、CK 及其交互	AI 和专业软件应与化学化工知识及教学活动深度融合
SAMR	技术介入学习任务的深度	替代、增强、修改、重定义	AI 应用应由提高工具使用效率逐步走向学习任务重构
本文三阶递进框架	学生能力如何逐级发展	基础层、进阶层、高阶层	形成从工具使用到智能分析再创新实践的能力发展路径



Figure 2. The three-stage progressive framework of artificial intelligence empowering course teaching
图 2. 人工智能赋能课程教学的三阶递进框架

SAMR 模型进一步为 AI 融入课程的深度提供分析视角。基础层主要利用 AI 提高文献处理、结构识别和图形编辑等既有任务的效率，体现技术对原有学习活动的替代与增强；进阶层通过 AI 辅助因素筛选、实验方案优化、数据建模和结果解释，使技术开始参与学习任务和分析过程的修改；高阶层则将 AI

与 Materials Studio、Aspen 等专业软件结合,引导学生开展模型构建、参数优化、方案探索和开放性创新实践,TPACK、SAMR 与本文三阶递进框架的关系如表 1 所示。各层教学内容、AI 辅助环节、学习成果与能力目标之间的关系如图 2 所示。

3.1. 基础层: AI 赋能文献处理与图形编辑,提升工具应用效率

针对传统文献处理效率低、学生难以开展知识关联分析的问题,引入 AI 检索与语义分析模式。教学中指导学生使用集成大模型的学术检索平台,通过自然语言提问替代传统关键词检索,AI 可自动解析需求并返回精准文献列表。同时,利用 AI 的学科前沿追踪功能,让学生掌握文献聚类分析和研究热点图谱生成等方法,快速定位领域发展趋势。例如,在检索“蒽烯加氢反应”相关文献时,利用 CiteSpace 和 VOSviewer 等文献计量与可视化工具可自动生成该向的作者合作网络、关键词演化图谱及核心文献推荐,使学生从被动找文献变为主动分析文献。

以 AI+ 传统工具模式革新教学。在 Zotero 等传统管理软件基础上,引入沁言学术等 AI 驱动平台,实现文献管理的升级:一是自动解析,上传文献后 AI 可生成结构化摘要、提取核心观点与关键数据;二是智能关联,通过知识图谱技术建立文献间的引用关系、方法关联,支持跨文献对比分析;三是辅助创作,撰写综述时 AI 可基于管理的文献自动生成主题框架、整合不同观点,并标注引用来源。

在化学结构编辑排版章节,教学中引入支持 AI 的绘图工具,例如 InDraw 化学结构编辑器,具有 AI 智能识别功能,能将文献截图等图片格式的化学结构转换成可编辑的结构式,可自动校正键长、键角、原子间距,避免手绘不对称或重叠问题,还可自动检查价键合理性、原子价态正确性;在 Visio 绘制化工图形章节,可以利用 VSTO (Visual Studio Tools for Office)等机制开发 AI 插件,调用外部的 AI 应用程序接口,如 DeepSeek 或 OpenAI 等。这些 AI 应用程序接口(API)可以通过自然语言处理技术对学生输入的工艺描述进行解析,提取关键信息和逻辑关系,然后根据一定的规则和模板,在 Visio 中自动生成初步的流程图,学生在此基础上优化设计。这种 AI 生成与人工优化模式,既降低了入门难度,又培养了学生的设计创新能力。

从 SAMR 视角看,该阶段 AI 主要发挥替代与增强作用,即在保留文献处理和专业图形编辑基本学习任务的基础上,提高信息获取、结构识别和图形生成效率。教学重点仍是学生对专业工具基本原理和规范操作的掌握,避免以 AI 自动生成替代必要的基础技能训练。

3.2. 进阶层: AI 赋能实验设计与数据分析,强化科学思维培养

针对传统实验设计依赖经验、数据分析深度不足的问题,突破传统手动设计与有限验证的教学模式,引入 AI 优化算法。教学中,先指导学生掌握正交表设计的基本方法,再利用 AI 工具实现进阶:一是参数筛选,使用 SPSS Pro (集成 AI 特征筛选)的“变量重要性评估”功能,筛选关键影响因素,减少试验因子;二是方案优化,输入因素水平后,选用 Design-Expert (带 AI 预测模块)可预测不同组合的实验结果,推荐最优试验方案;三是结不同温度、浓度和搅拌速度下洁齿制品的品质,使学生理解实验设计、数据建模和预测优化的完果扩展,通过上述的 AI 工具拟合建立数学模型,实现从正交试验数据到全参数空间的结果预测。例如,在“洁齿制品制备的正交试验”教学中,AI 可基于少量正交试验数据,预测整逻辑。

针对传统教学中绘图机械化和分析表面化的问题,构建 AI+ 数据分析教学模块。在图形化环节,深度融合 AI 辅助统计引擎的 GraphPad Prism 可根据原始数据自动推荐最优图表类型(如折线图、热图、饼状图和三维曲面图等),并优化坐标轴、图例等格式细节;在数据分析环节,DMSAS 等科研数据分析软件集成了线性回归、方差分析、机器学习建模等功能,学生只需导入数据,即可快速获得显著性检验结果、变量相关性分析及趋势预测。教学中通过人工分析与 AI 分析对比案例,引导学生理解分析方法的适

用场景，避免盲目依赖 AI，培养数据解读、方法选择和结果验证的科学思维。

与基础层相比，进阶层的 AI 应用由操作效率提升进入分析方法选择、数据建模和结果解释过程，体现出由技术增强向学习任务修改的转变。学生的学习重点也由会使用工具转向能够借助 AI 和专业方法分析数据并验证结果。

3.3. 高阶层：AI 赋能专业软件与工艺模拟，实现创新能力突破

针对传统模拟教学中模型构建和参数优化能力培养不足的问题，结合 Materials Studio 的模拟功能，融入 AI 辅助模块提升教学深度。Materials Studio 可以通过 Pipeline Pilot 实现分子生成，借助 Python 脚本或其他编程接口，实现从初始结构生成到最后性质评估整个流程自动化运行。还可以结合高斯混合模型或变分自编码器，对大量的候选物质进行全面扫描，快速筛选潜在的晶体结构，减少学生手动建模的工作量；在数据分析方面，它产生的数据可以通过机器学习库如 Scikit-Learn 等进行处理，实现线性回归和机器学习建模等功能。

构建传统操作与 AI 调控的双模式教学体系。在基础教学中，学生通过传统模拟软件完成乙醇精制等标准流程的稳态模拟；在教学中，引入 AI 驱动的数字孪生模块，实现动态优化，AI 实时分析操作参数对产品收率的影响，自动推荐最优工艺条件。例如结合 Aspen Plus 的 Python API，将 AI 模型嵌入模拟流程，实现参数推荐与动态模拟的联动。此外，结合公开的典型化工过程案例，让学生利用 AI 进行工业化放大模拟，提升工程实践能力。

高阶层进一步强调 AI、专业软件与化学化工知识的综合运用，学生不再按照固定步骤完成预设模拟，而是围绕开放性专业问题自主开展模型构建、参数分析、方案比较和结果判断。从 SAMR 视角看，这一阶段更加突出技术对学习任务的重构；从 TPACK 视角看，则体现了技术、专业内容与教学活动的深度协同。

4. AI 赋能课程的教学模式与评价体系创新

4.1. 老师、学生和计算机协同教学模式

在 TPACK 强调技术、教学法与专业内容协同的基础上，课程进一步明确教师、学生与 AI 的角色边界，构建多场景人机协同教学模式。(1) 线上自适应学习：AI 智能体(例如 Agentic AI)根据学生的文献检索准确率、软件操作熟练度等数据，自动推送个性化学习资源，如为基础薄弱学生推荐工具操作教程，为能力较强学生推送 AI 优化案例。(2) 课堂智能化互动：由 AI 提供实验的步骤，随后教师重点解析关键原理与易错点，学生实操时 AI 提供实时纠错与答疑。(3) 课外科研教学融合实践：设置 AI 与化工创新项目，如 AI 辅助新型催化剂开发等，学生组建团队完成从设计到模拟的全流程任务，AI 提供数据支持，教师进行方向指导。

4.2. 多元化智能评价体系

突破单一评价模式，构建过程、能力和创新相结合的评价体系，利用雨课堂平台可以实现 AI 全程参与数据采集与分析。(1) 过程性评价：AI 自动记录学生的文献检索效率、软件操作规范性、数据处理准确性等过程数据，结合教师对课堂互动、小组协作的评分，形成动态过程档案。(2) 能力性评价：针对各章节核心能力设置专项测试，如 AI 辅助文献综述撰写和正交试验 AI 优化方案设计等，采用 AI 初评和教师复评的模式，确保评价精准性。(3) 创新性评价：对课程创新项目进行评价，从 AI 工具应用深度、方案创新性和工程可行性三个维度打分，引入 AI 辅助开展相似性检测与创新性分析，为教师评价提供参考。将教学过程中形成的学习证据纳入多元评价，通过教师复评形成反馈与改进意见，具体机制如图 3 所示。评价指标与三阶递进培养目标相对应，其中基础层重点评价工具规范使用能力，进阶层关注数据分

析与科学思维，高阶层则突出专业综合应用与创新实践能力。

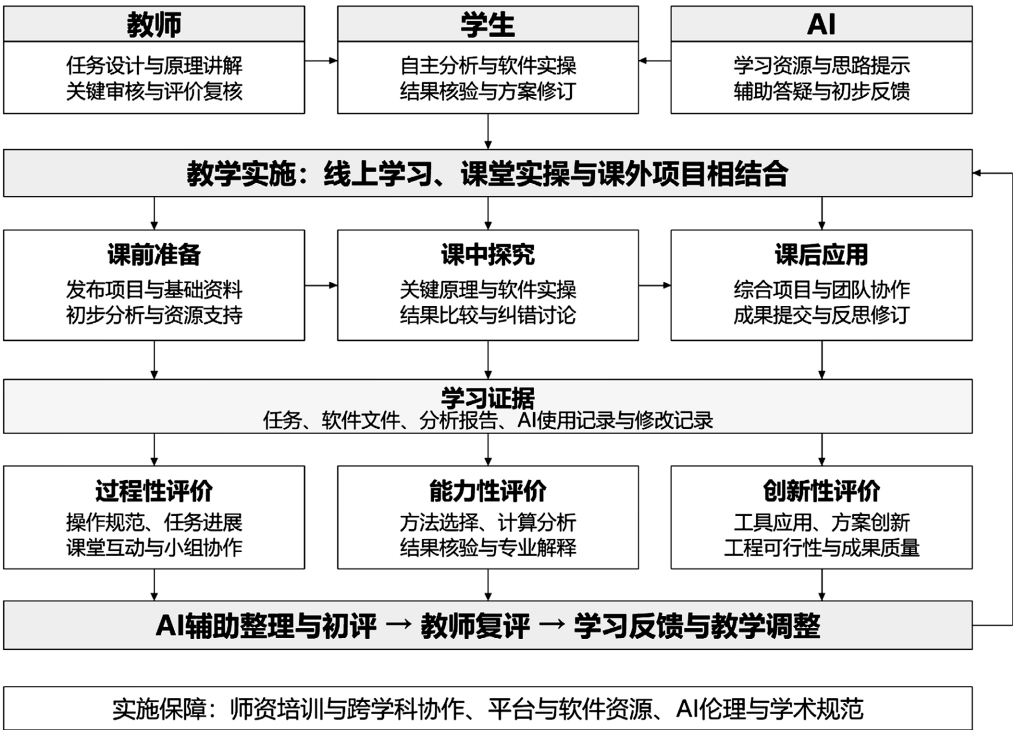


Figure 3. Human-machine collaborative teaching and multi-dimensional evaluation feedback mechanism
图 3. 人机协同教学与多元评价反馈机制

4.3. 师资与技术保障体系

(1) 师资建设：建立 AI 与化工双师培养机制，通过教学工作坊和企业培训等方式，提升教师的 AI 工具应用能力与课程设计能力；组建跨学科教学团队，吸纳计算机专业教师参与课程 AI 模块开发。(2) 技术支撑：搭建课程专属智慧教学平台，整合 AI 检索工具、虚拟仿真系统、数据处理模块等资源，实现一站式教学服务；与企业合作，引入成熟的 AI 教学实训模块，降低开发成本。(3) 伦理引导：增设 AI 伦理与学术规范专题，引导学生正确使用 AI 工具，明确 AI 辅助与学术诚信的边界，避免过度依赖 AI 导致的思维惰性与学术不端。

4.4. AI 赋能课程改革面临的挑战与反思

尽管人工智能赋能《计算机在化学化工中的应用》课程为提升学生数字化能力和专业问题解决能力提供了新路径，且课程改革方案已从师资、平台和评价等方面进行了保障设计，但在实际实施过程中仍面临技术资源、教师能力以及学生规范使用等方面的挑战，需要在实践中持续优化。

首先，技术资源与教学条件限制是课程改革推广的重要因素。本课程涉及文献智能检索、数据分析、分子模拟和化工过程模拟等多个数字化工具，不同软件之间存在功能差异和使用门槛，部分 AI 功能还受到软件授权、计算资源和网络环境等条件限制。因此，需要加强课程资源建设，完善数字化教学平台，并通过校企合作和资源共享提高教学支撑能力。

其次，教师数字化教学能力需要进一步提升。AI 融入课程后，教师角色由传统的软件操作指导者逐渐转变为学习任务设计者、过程引导者和结果评价者。教师不仅需要掌握化学化工专业知识，还需要具

备 AI 工具应用和数字化教学设计能力。因此, 应通过教师培训、跨学科团队建设等方式提升教师 AI 素养, 促进专业知识与智能技术的有效融合。课程中已提出建立 AI 与化工双师培养机制, 通过教学工作坊和跨学科协作提高教师教学能力。

此外, 学生 AI 依赖和学术规范问题也需要关注。AI 能够提高信息获取和数据分析效率, 但学生直接接受 AI 生成结果, 可能弱化独立思考和专业判断能力。因此, 教学过程中应强化 AI 辅助和人工验证的原则, 将来源核查、结果验证和专业判断作为课程全过程要求, 引导学生合理使用 AI 工具。

5. 结论

本研究针对《计算机在化学化工中的应用》课程的传统教学痛点, 引入人工智能重构课程教学体系。结合课程内容构建基础层、进阶层和高阶层三阶递进式 AI 赋能框架, 使学生能力沿工具使用、智能分析、创新实践的方向逐级发展。在此基础上, 通过教师、学生与 AI 协同教学以及过程性、能力性和创新性相结合的多元评价, 形成教学、实践和评价相互衔接的课程改革体系。

本文三阶递进框架进一步将技术整合落实到化学化工计算机课程的具体教学内容和学生能力发展过程中, 形成协同整合、任务重构、能力递进的课程改革路径。该模式为人工智能与文献处理、实验设计、数据分析、专业绘图、分子模拟和过程模拟等课程内容的系统融合提供了可操作的教学思路, 也为化学化工类数字化课程改革提供参考。同时, 课程改革仍需关注 AI 工具应用过程中的资源条件、教师能力提升以及学生规范使用等问题, 并通过持续教学实践和效果评价不断优化。

基金项目

2026 年度本科工程项目(宜宾学院 - 和光同程先进材料实践教育基地)。

参考文献

- [1] 陈柳钦. 人工智能驱动传统产业智能化转型: 机制、效应与路径[J]. 实事求是, 2025(6): 23-35.
- [2] 颜伟城, 吴静波. 生成式 AI 背景下的化工教学改革与创新人才培养路径探索[J]. 科技风, 2025(23): 68-70.
- [3] 夏胜利, 于佳博. “计算机在化学化工中的应用”课程思政教学探索[J]. 科教文汇, 2024(24): 64-68.
- [4] Qian, Y. (2025) Pedagogical Applications of Generative AI in Higher Education: A Systematic Review of the Field. *TechTrends*, **69**, 1105-1120. <https://doi.org/10.1007/s11528-025-01100-1>
- [5] Belkina, M., Daniel, S., Nikolic, S., Haque, R., Lyden, S., Neal, P., et al. (2025) Implementing Generative AI (GenAI) in Higher Education: A Systematic Review of Case Studies. *Computers and Education: Artificial Intelligence*, **8**, Article ID: 100407. <https://doi.org/10.1016/j.caeai.2025.100407>
- [6] Zhu, Y., Jiang, H. and Zhong, L. (2026) Generative Artificial Intelligence-Assisted Stem Education: A Systematic Review and Future Research Agenda. *European Journal of Education*, **61**, e70462. <https://doi.org/10.1111/ejed.70462>
- [7] Mishra, P. and Koehler, M.J. (2006) Technological Pedagogical Content Knowledge: A Framework for Teacher Knowledge. *Teachers College Record: The Voice of Scholarship in Education*, **108**, 1017-1054. <https://doi.org/10.1177/016146810610800610>
- [8] Wang, P., Jing, Y. and Shen, S. (2025) A Systematic Literature Review on the Application of Generative Artificial Intelligence (GAI) in Teaching within Higher Education: Instructional Contexts, Process, and Strategies. *The Internet and Higher Education*, **65**, Article ID: 100996. <https://doi.org/10.1016/j.iheduc.2025.100996>
- [9] 韦盛学, 李春雨. AI 赋能下统计学实践课程教学改革与挑战与路径探索[J]. 现代职业教育, 2025(30): 93-96.
- [10] 周冰, 董佳琦. 基于 AI 教学平台的 Web 应用开发课程混合式教学模式研究[J]. 信息与电脑, 2025, 37(21): 245-247.
- [11] 衣岩. 基于人工智能的中职信息技术个性化学习系统研究[J]. 信息与电脑, 2025, 37(21): 209-211.
- [12] 罗建军. 人工智能背景下高职院校教育教学管理研究[J]. 职业教育发展, 2025, 14(4): 128-132.
- [13] 李捷. 基于云计算的电气试验数据处理与智能分析系统开发[J]. 流体测量与控制, 2025, 6(05): 39-41.
- [14] 张书嘉. 基于深度学习的多源异构大数据融合与智能分析方法研究[J]. 信息与电脑, 2025, 37(21): 45-47.