

人工智能在化学学科中的崛起：机遇与优势

张君^{1*} 何赞凤² 吴昊¹ 杨明¹ 吕艳萍¹

1. 山西师范大学化学与材料科学学院 山西太原 030031

2. 晋源区第四实验小学 山西太原 030025

摘要：人工智能的崛起在化学学科中呈现出了突破性的作用，推动了科学研究的进展，同时为化学教育带来了新机遇。虚拟实验环境的创造、人机交互、个性化教学模式的应用能够使学生更好地理解化学理论，简化设备操作并提高实验技能。然而，这一变革也对教育体系提出了一系列挑战，需要学生和教师共同努力，适应新的教学方式，不断提升技术素养，解决个性化教育的难题，以推动化学学科教育的高质量发展。

关键词：人工智能；化学学科；教育改革；ChatGPT

1 人工智能的崛起与在教育领域的独特优势

在1956年举行的达特茅斯会议上，人工智能（Artificial Intelligence，简称为“AI”）首次被提出，人工智能旨在尝试模拟和复制人类的智能行为和思维过程，使机器能够执行类似于人的智能任务。期间经过一段低潮期，近年来，基于深度学习和神经网络的开发和应用，极大地推动了人工智能的发展。到了2022年11月，由Open AI研发出一款聊天机器人程序ChatGPT，一经问世迅速地引爆了人们对人工智能技术新一轮的研究热潮。人工智能运行方式首先需要大规模整理过的数据集，然后选择适当的学习算法或者深度学习结构。通过在训练数据上进行迭代学习和参数调整并生成模型，之后，模型学会了数据的模式和规律。训练完成后，模型就可以智能地预测或分类新数据，再通过反馈机制不断提升模型的性能和泛化能力，使得人工智能能够从复杂数据中提取有用信息，为问题求解提供智能支持。目前，人工智能已开始应用在医疗、金融、交通、零售等领域被广泛的应用，随着大数据分析、机器学习，图像识别等技术的不断优化和提升，人工智能将更加具有智能性和适应性以处理复杂、多样化的任务和情境。相较于其他领域，人工智能在教育方面也展现出独特的优势^[1]。人工智能与传统教育最大差别在于教学模式和教学资源利用下差

别。人工智能可以脱离教室这一特定的学习环境，通过整合全球教学资源，可以提供优质的教学服务。在教学模式上，人工智能采用一对一的人机互动模式，除了增加了学习的趣味性，还可以针对学生的认知水平、兴趣和个性，制定出专属的学习方案和教学内容，推荐适合的练习题来监控和评价学生的学习情况，提供反馈建议，帮助学生纠正错误，并且相应地调整学习计划，使学习效率变得更加高效。

2 人工智能突破了化学科学的发展

在众多学科中，化学一直都是以实验为基础学科，通过实验进行观察、分析、总结和验证物质的组成、性质、结构和变化，进而建立起化学理论。随着科技的不断发展，仪器设备不断升级更新，化学逐渐发展成为一门将宏观和微观相统一的科学。然而，传统化学研究在面对复杂和高维度的研究对象时，常常采用试错和减少变量数的手段来解决问题，这种处理方法可能会造成信息丢失，导致研究效率低下，使得传统化学研究方法无法处理复杂的化学系统。然而，人工智能的发展为化学提供了新的可能性，通过机器学习和深度学习等技术，人工智能发展成为一种强大的工具，能够处理大规模、高维度的数据，挖掘出隐藏在其中的关联和规律。因此，随着研究对象的复杂化和高维化，人工智能逐渐被认为是化学研究中继传统的实验、理论和模拟之后的第四大研究范式^[2]。最先将人工智能与化学相结合的是1967年的Elias James Corey提出的“逆合成分析原理”，依据该原理，编写出第一个计算机辅助有机合成路线设计程序，进行有机合成设计，成功地合成50多种药剂和百余

基金资助：山西省研究生教育教学改革课题（2022YJJG139）

作者简介：张君，男，1982.03，汉族，朔州，博士，副教授，研究方向：纳米材料的光电性能。

种天然化合物,对有机合成作了重大贡献,并获得1990年诺贝尔化学奖。在2018年3月,上海大学量子与分子结构国际中心(ICQMS)的Mark Waller教授及其团队在Nature报道了一篇题为“利用深度神经网络和符号AI规划化学合成”研究论文。这项研究团队首先收集了过去几十年来几乎所有发表的化学反应,数量达到约1250万个。通过整合这一巨大的反应数据库,研究团队采用了深度神经网络和蒙特卡洛树算法,成功地开发出一种能够规划新的化学合成路线的人工智能系统。该系统的显著成就之一是,仅用5秒钟就能够设计出一个分子的合成路线。这远远超过了传统手工设计所需的时间,展示了人工智能在加速化学研究方面的潜在威力^[3]。2020年7月利物浦大学的研究人员在Nature杂志的封面上报道了该团队成功研发了一款具备人形特征的人工智能机器人化学家。这款机器人化学家不仅仅是外形与人类相似,更能在标准实验室中独立进行工作,几乎不需要人类的干预,就能够灵活运用专为人类设计的实验设备。该机器人每天工作21.5小时,余下时间用于充电,在实验方面,它具备独立思考的能力,能够自主完成一系列实验操作如样品准备、实验操作、数据采集和分析等。在初次测试中,这个AI机器人只用了8天的时间,就独立完成了668个实验,在此基础上,成功地研发出一种新型的化学催化剂^[4]。利物浦大学化学和材料系教授Andrew Cooper认为这款机器人的出现,将使科研流程更为简便,机器人化学家不能简单看作是实验室中的一台机器,而是一个拥有超能力的实验伙伴,可以大幅提高了实验的成功率和创新性,加速化学科学的研究。它为人类科学家腾出更多时间进行创造性思考,也为化学自动化研发的带来革命性的变化,给人类社会带来更多创新和进步。

3 人工智能对化学教育的推动作用

学科发展和学科教育之间存在着互为依存,共同发展的关系。学科的新理论、新方法和新设备的出现,将为学科教育提供新鲜的内容和动力,相应地,学科教育培养出学生们也只有通过学习这些新知识,才能够更好地适应学科的发展,并成为未来学科的研究者和从业者,继续推动学科的不断向前发展,由此学科发展和学科教育两者相互促进,协同发展,构成了一个持续推动知识不断积累和进步的循环体系。人工智能在化学学科的发展已呈现出突破性作用,人工智能在化学教育中也将产生及大地推动作用。

化学作为一门实验学科,需要通过实验,让学生直观地观察化学反应现象,帮助学生理解化学原理和概念,激发学生的学习兴趣,养成严谨、求实的科学精神。因此,化学教学中有许多实验环节,但是有些实验受限于实验场地、实验条件和实验本身的难度的因素,导致无法开展,如果基于人工智能创造出虚拟的实验环境进行模拟实验,学生们就能够在安全的环境中进行实验操作来训练实验技能,同时,人工智能具有清楚的图文展示和及时的反馈系统,帮助学生理解实验原理和纠正错误的实验操作,虚拟实验不受时间和场地限制,学生们可以更好地扩展实验内容和增加实验次数,加强对实验步骤和实验原理的理解。化学学科的研究生教育需要仪器设备进行科学研究,培养专业技能,产出创新成果,因此,仪器设备和研究生培养紧密相连。然而,昂贵的设备采购价格以及复杂的操作流程给研究生培养设置了高门槛。人工智能的应用可以改变这一状况。人工智能的引入可以实现人机对话,使得研究生不需要具备高深的专业知识以及工程师的专门培训,也能准确地操作仪器,极大地降低仪器操作准入门槛,并且人工智能和网络互联的联合可以实现设备网络共享,提高设备的有效利用率,降低了设备重复购置、维护和使用的成本,推动了数据网络化发展,规避了学术造假存在,促进了研究人员的深入合作研究,最终,极大地推动了学科知识的传播和交流。人工智能除了丰富教学内容,创造虚拟的实验环境和简化仪器设备操作外,还可以提供智能化教学手段。随着科技发展,教学手段也逐渐由口头讲解转变为多媒体演示,然而,传统的多媒体教学手段只侧重于信息展示,而人工智能通过智能化的算法和系统,除了使复杂的教学内容能够以可视化的形象直观地呈现出来。而且教学过程更具有参与性、反馈性和互动性,能更好地满足学生个体差异,基于学生的学习历史和表现,提供针对性的教学内容,而且个性化互动可以让学生更轻松地理解 and 吸收知识,激发学生的学习兴趣,提高学习效果^[5]。

4 人工智能对教师的带来的挑战

人工智能的广泛应用将会在在教育领域的应用带来了一系列挑战,其中最显著的是对教师角色的影响。传统的教学模式是以教师为中心,按照教材内容,通过课程讲授给学生传递知识。因此,在过去,教师是教学的主导者。近年来,虽然我们一直强调以学生为导向,但教师的教学水平一直衡量其职业素养的重要标准,人工智能的崛起会改变这种传统的教学模式,教师必须适应

新的教学模式，以学生为导向。在教学过程中，教师更多地充当引导者和监督者的角色，引导学生更好地利用人工智能工具进行学习。教师通过人工智能为学生提供更多的学习资源和个性化的学习建议，引导学生更加高效地学习，以及通过人工智能对学生的过程进行数据分析和监测，及时发现学生的问题和困难，从而更有针对性地给予监督和指导。其次，教师也需要不断提高自己的技术素养，可以有效地利用人工智能工具。这包括了学习如何解读和应用人工智能生成的数据，以及在教学中整合这项新技术，来确保学生能够从中受益，培养出自主学习能力和创新性思维。尽管人工智能可以支持个性化学习路径，人工智能无法给予情感关注，与人工智能互动不同于真实的人际关系，学生将会缺乏与他人建立情感纽带的机会，可能造成学生难以培养团队合作和社交技能，这在日后的职业和社交生活中可能成为一种不利因素。因此，教师需要在情感和交流方面给予学生更多的关注，在学习环境中，创造更多的团队合作机会，引导学生培养社交技能，提高学生在群体中的适应能力。最后，使用人工智能可能涉及一些伦理和隐私问题。教师自身需要了解并掌握处理这些问题方法，并且让学生了解隐私的重要性，确保学生的权益得到保护，同时能够合理地利用人工智能技术。

总之，人工智能无疑将会对化学学科发展和教学带

来的全新的变革，这种变革对于教师来说将是一场巨大挑战，需要打破因循守旧的固有思维，通过自身的不断学习和外部学校、教育机构或者政府的引导和支持，更好地将人工智能融入教学中。在这个过程中，要给予教师足够的时间去适应，培养对新科技的认同感，使教育体系更好地适应当下科技迅速发展的潮流，为学生提供更优质、更个性化的教育。

参考文献

- [1] 卫炳江, 苏福根, 姚楠. 由ChatGPT引发的人工智能推动教育变革创新的思考[J]. 中国教育信息化, 2023, 29(04): 3-9.
- [2] 江俊, 李淹博, 沈祥建等. 机器化学家的挑战和机遇[J]. 中国科学: 化学, 2023, 53(05): 799-810.
- [3] M.H.S. Segler, M. Preuss, M.P. Waller, Planning chemical syntheses with deep neural networks and symbolic AI, *Nature*, 2018, 555: 604-610.
- [4] B. Burger, P.M. Maffettone, V.V. Gusev, C.M. Aitchison, Y. Bai, X. Wang, X. Li, B.M. Alston, B. Li, R. Clowes, N. Rankin, B. Harris, R.S. Sprick, A.I. Cooper, A mobile robotic chemist, *Nature*, 2020, 583: 237-241.
- [5] 翟红林, 张晓昀, 曹晶晶. 人工智能新时代下教学改革的新思考[J]. 大学化学, 2024, 39(01): 63-68.