

图神经网络与 RDKit 融合的分子知识图谱在 有机化学课程教学改革中的探索

成蕾, 丁玉洁, 侯亚男, 范文宇, 陈鹏毅, 廖斌
珠海科技学院 生命科学学院, 广东 珠海 519041
DOI:10.61369/EDTR.2026010003

摘 要 : 针对传统化学课程中分子结构抽象难懂、理论实践脱节、学生缺乏分子层面工程思维等问题, 本研究探索了图神经网络 (GNN) 与分子信息学工具 RDKit 在化学教学改革中的应用。通过构建 "结构-性质" 双链知识图谱, 将抽象的化学知识转化为可视化的分子网络, 实现了分子结构特征与物化性质的智能关联。该教学模式不仅提升了学生对分子层次化学问题的理解能力, 还培养了其计算化学实践技能。教学实践表明, 基于 GNN 与 RDKit 的双链知识图谱系统显著增强了学生的分子识读能力与模拟实践水平, 为化学课程的智能化教学改革提供了新路径。

关 键 词 : 图神经网络; 分子识别; 双链知识图谱; 智能化教学

Exploration of the Application of Molecular Knowledge Graphs Integrating Graph Neural Networks and RDKit in the Teaching Reform of Organic Chemistry Courses

Cheng Lei, Ding Yujie, Hou Yanan, Fan Wenyu, Chen Pengyi, Liao Bin
College of Life Sciences, Zhuhai College of Science and Technology, Zhuhai, Guangdong 519041

Abstract : Addressing the issues of abstract and difficult-to-understand molecular structures, a disconnect between theory and practice, and a lack of molecular-level engineering thinking among students in traditional chemistry courses, this study explores the application of Graph Neural Networks (GNNs) and the molecular informatics tool RDKit in chemistry teaching reform. By constructing a "structure-property" dual-chain knowledge graph, abstract chemical knowledge is transformed into a visualized molecular network, enabling intelligent association between molecular structural features and physicochemical properties. This teaching model not only enhances students' understanding of chemical problems at the molecular level but also cultivates their practical skills in computational chemistry. Teaching practice demonstrates that the dual-chain knowledge graph system based on GNNs and RDKit significantly improves students' molecular recognition abilities and simulation practice proficiency, providing a new pathway for the intelligent teaching reform of chemistry courses.

Keywords : graph neural networks; molecular recognition; dual-chain knowledge graph; intelligent teaching

引言

有机化学课程作为化学、化工、材料、生物等专业的基础核心课程, 其教学内容涉及分子结构、化学键、反应机理、物化性质等微观层面的知识概念。^[1-4]传统的化学教学模式主要依赖于二维分子式展示和理论讲解, 学生难以建立直观的分子结构意识, 更无法深入理解分子特性与实际应用之间的内在联系。^[2,4]这种教学模式导致学生在学习过程中往往停留在知识记忆层面, 缺乏将化学知识应用于实际问题的能力。^[3-4]随着人工智能技术与计算化学方法的快速发展, 图神经网络 (GNN) 在分子图表示学习方面展现出强大能力, 能够有效捕捉原子与化学键的拓扑关系;^{[5][6]}同时, RDKit 等开源化学信息学工具提供了丰富的分子描述符计算、结构可视化与反应模拟功能。这两种技术的结合为化学课程教学改革提供了新的技术支撑, 使构建 "结构-性质" 双链知识图谱系统成为可能, 从而实现化学教学内容的结构化、可视化与智能化, 推动化学教育向数字化、智能化方向转型。

一、化学课程教学现状与挑战

当前有机化学课程教学面临的系统性挑战，已成为制约学生学科核心素养与创新能力培养的关键瓶颈，具体可从以下四方面深入剖析：

其一，分子结构教学的抽象性与可视化支撑不足的矛盾尤为突出。有机化学的核心逻辑围绕分子三维结构展开，而传统教学中，分子结构的呈现多依赖教材中的二维静态示意图、黑板手绘图形或简易球棍模型——这类方式仅能展现分子的平面骨架或基础连接关系，无法动态呈现分子的空间构型、官能团空间取向、键角与键长的动态变化，更难以让学生直观感知分子在反应过程中的构象调整、中间体形成等动力学行为。这种“静态化”教学模式，导致学生对立体化学、构象分析等核心概念的理解停留在机械记忆层面，难以建立“结构决定性质”的学科思维，甚至出现对同分异构体空间差异、反应选择性根源等关键问题的认知偏差。

其二，化学性质与分子结构的关联性教学存在明显薄弱环节。分子结构是推导化学性质、预测反应规律的核心依据，但现有教学常陷入“碎片化知识灌输”的误区：教师多通过罗列官能团的典型反应、背诵物化参数（如沸点、酸性、反应活性顺序）的方式开展教学，却未充分引导学生从分子的电子效应、空间效应、氢键作用等微观结构特征出发，分析性质与结构的内在关联。例如，在讲解醇类化合物的酸性差异时，仅告知学生“甲醇酸性强于乙醇”，却未深入剖析烷基的给电子诱导效应如何影响羟基氧原子的电子云密度，进而改变质子解离能力。这种教学模式导致学生无法形成“从结构推性质、从性质反推结构”的逻辑闭环，在面对陌生化合物的性质预测、新型反应路线设计等问题时，难以灵活运用分子模拟工具（如通过分子对接预测反应位点）开展材料设计或反应优化，严重制约了知识迁移与应用能力的提升。

其三，教学手段与现代计算化学发展的脱节问题显著。随着计算化学在科研与工业领域的深度应用，RDKit、Gaussian、VASP 等计算工具已成为有机化学研究者的核心技术手段，但高校有机化学教学仍普遍沿用“理论讲授 + 传统实验”的单一模式：课堂教学以教材理论为核心，极少融入计算化学的基本原理与操作方法；实验教学多局限于验证性实验，缺乏基于计算工具的探究性训练（如通过 Gaussian 模拟反应过渡态能量、利用 RDKit 提取分子指纹并进行相似性分析）。这种“重理论轻实践、重传统轻现代”的教学现状，导致学生既不掌握计算化学的基础逻辑，也缺乏使用专业工具解决实际问题的能力，毕业后难以快速适配科研或工业领域对“理论 + 计算”复合型人才的需求。

其四，智能化教学工具在化学领域的应用深度与适配性不足。近年来，教育智能化虽在多学科领域取得突破，但在有机化学教学中的应用仍处于“浅层化”阶段：现有工具多聚焦于知识点刷题、实验步骤演示等基础功能，对有机化学核心的“分子图理解、生成与推理”能力支持薄弱——例如，无法根据学生绘制的分子结构自动识别错误，难以通过交互式模拟引导学生分析分

子结构与反应路径的关联，更无法基于学生的认知薄弱点（如对立体异构的误解）生成个性化的教学方案。这种“通用性有余、专业性不足”的智能化工具，无法有效解决有机化学教学中“抽象概念具象化、复杂问题逻辑化”的核心需求，未能真正实现教学过程的精准化与个性化，难以辅助教师突破传统教学的局限。

二、双链知识图谱系统的构建与实现

本研究构建的“结构—性质”双链知识图谱系统包含两个相互关联的维度。“结构链”以分子结构为核心，利用 GNN 对分子图进行表示学习，将每个分子作为图谱中的节点，节点属性包括原子类型、化学键类型、官能团、立体化学等特征。通过 GNN 算法（如 GCN、GAT 等）提取分子特征，形成层次化的结构表示体系。“性质链”则聚焦于分子的物理化学性质，如沸点、熔点、溶解度、反应活性、光谱特性等，每个性质节点与多个结构节点建立关联，形成完整的“结构—性质”映射关系。RDKit 在该系统中承担分子描述符计算（如 LogP、极性表面积、氢键供受体数等）和结构可视化功能。通过 GNN 编码的分子表示与 RDKit 计算的描述符进行对齐与融合，最终构建双向可推理的化学知识图谱。该系统支持多种教学应用场景：学生可通过图谱查询特定分子结构的可能性质，也可根据目标性质反推候选分子结构；教师可利用系统生成个性化的教学案例，实现因材施教。这种设计不仅增强了化学知识的结构化和可视化程度，更重要的是建立了理论知识与实际应用之间的桥梁，使学生能够深入理解化学知识的实际价值和前景。

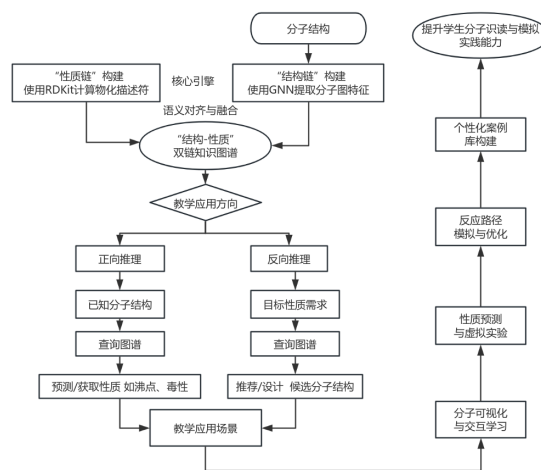


图1 双链知识图谱构建流程

三、教学实施与效果分析

我们以36位大二、大三、大四学生梯度分布的小组，开展了为期一年的教学实践，将GNN与RDKit支持的双链知识图谱系统应用于实际教学。实施过程分为三个阶段：首先进行系统培训，使学生掌握基本的分子结构表示方法和RDKit操作技能；随后开展基于知识图谱的探究式学习，引导学生通过系统探索分子结构

与性质之间的关系；最后组织综合实践项目，要求学生运用所学知识解决实际化学问题。教学效果评估显示，实验组学生在多个方面表现显著优于传统教学组。在分子结构识读方面，实验组准确率达到了91.5%，较对照组的63.2%有大幅提升；在性质预测项目中，实验组平均正确率为83.7%，远超对照组的55.8%。更令人鼓舞的是，在综合实践中，学生能够熟练运用系统分析非富勒烯受体小分子的构效关系，优化合成路径，多项成果展现出良好的创新性和实践价值。课程满意度调查显示，94%的学生认为新模式提升了学习兴趣和理解深度，88%的学生表示增强了对化学知识的应用能力。此外，参与实验的学生在后续的化学竞赛和创新项目中表现突出，进一步证明了该教学模式的有效性。

四、结论与展望

本研究通过整合图神经网络与RDKit工具，构建了“结构—

性质”双链知识图谱系统，为化学课程教学改革提供了新的技术支持。该模式有效解决了传统化学教学中分子结构抽象、性质关联弱、实践不足等问题，实现了化学知识的可视化、可计算与可推理，显著提升了学生的学习效果和实践能力。教学实践表明，基于GNN与RDKit的双链知识图谱系统不仅能够增强学生对分子层次化学问题的理解，还能培养其计算思维 and 创新能力，为化学教育数字化转型提供了成功案例。未来研究将进一步优化知识图谱构建算法，扩大系统覆盖的化学知识范围，开发云端分子模拟平台，探索基于强化学习的反应优化教学模块。同时，我们将开展更大范围的教学实践，验证该模式在不同层次化学课程中的适用性，并探索其向相关学科推广的可行性，为推动我国化学教育改革创新提供理论支持和实践范例。

参考文献

- [1] 刘治. 基于课程思政的神经网络教学改革研究 [J]. 电脑知识与技术, 2025, 21(24): 141-143.
- [2] 何杏宇, 周易歆, 罗东旭, 杨桂松. 基于图神经网络和多主体评价的教学资源推荐 [J]. 计算机工程, 2024, 50(07): 13-22.
- [3] 徐晨阳, 都健, 张磊. 基于图神经网络的化学反应优劣评价 [J]. 化工进展, 2023, 42(S1): 205-212.
- [4] 马逍, 王俊杰, 陈鑫, 李京城, 赵丽红, 孙雪萍, 程绍娟, 王芳. 人工智能驱动的化学教学组织形式创新路径探究 [J]. 大学化学, 1-8.
- [5] 张霞, 李鲍. 应用 AI “识菌” 模型, 重塑微生物实验教学 [J]. 生物学杂志, 2025, 42(04): 9-14.
- [6] 黄露露, 余翠平, 张雪梅, 钟浪祥, 刘爱军, 王岩. 基于 PROS 四维递进模式的实验教学设计与实践 [J]. 实验科学与技术, 1-8.