

·教育与教学·

高分子物理的人工智能项目式教学初探

孔 宪* 隋 岩

(华南理工大学华南软物质科学与技术高等研究院 前沿软物质学院 广州 510640)

摘要: 在人工智能变革各个领域的背景下,在 高分子物理教学中融入人工智能元素,培养学生数据驱动的意识势在必行,因此本科课程需发展以证据为中心,提升学生的数据意识与跨学科能力。本研究在低年级课程中实施人工智能辅助的软物质理性设计项目式教学,围绕案例、性质、模型与验证,构建分子模拟与机器学习结合的可复现 workflow。以聚电解质带电序列效应为案例,学生利用分子模拟获取径向分布函数、回转半径与链末端距等证据,并建立基线模型与深度神经网络完成性质预测与对比。教学结果显示,学生能够完成从建模到评估的闭环,提升证据表达与数据驱动的分析范式。实践表明,该教学模式不仅有助于高分子基本概念的理解和模拟仿真工具的掌握,也有利于数据驱动科研范式的树立。

关键词: 项目式教学; 聚电解质; 机器学习; 人工智能

Preliminary Exploration in Polymer Physics Education with AI-based Projects

KONG Xian*, SUI Yan

(South China Advanced Institute for Soft Matter Science and Technology, School of Emergent Soft Matter,
South China University of Technology, Guangzhou 510640)

Abstract: Amid rapid advances in artificial intelligence, integrating AI into polymer physics education is necessary. Undergraduate courses should adopt evidence-centered design to build data literacy and cross-disciplinary skills. We implemented a project-based module on AI-assisted rational design of soft matter in an undergraduate early-stage course. The module is organized around case, properties, model, and validation, and establishes a reproducible workflow that combines molecular simulation with machine learning. Using charge-sequence effects in polyelectrolytes as the case study, students ran simulations to obtain radial distribution functions, radius of gyration, and end-to-end distance. They then trained baseline models and deep neural networks to predict properties and compare methods. The outcomes show that students completed the full loop from modeling to evaluation, improved the clarity of evidence presentation, and adopted a data-driven analytic approach. The module helped students grasp core concepts in polymer physics, gain hands-on experience with simulation tools, and develop habits that support data-driven research.

Keywords: Project-based teaching; Polyelectrolytes; Machine learning; Artificial intelligence

引用: 孔宪, 隋岩. 高分子物理的人工智能项目式教学初探. 高分子通报, 2026, 39(5), 799–807.

Citation: Kong, X.; Sui, Y. Preliminary exploration in polymer physics education with AI-based projects. *Polym. Bull.* (in Chinese), 2026, 39(5), 799–807.

高分子物理教育与教学专题; 2025-10-10 收稿, 2026-01-22 录用, 2026-03-26 网络出版
基金项目: 广东省科学技术厅资助项目(项目号 2023QN10C439)

* 通信联系人: 孔宪, E-mail: xk@scut.edu.cn

doi: 10.14028/j.cnki.1003-3726.2026.25.296

高分子物理是高分子科学的基础学科,旨在从分子结构与相互作用出发解释聚合物体系的力学、热学、流变学、相行为与传输等性质,是连接高分子化学与材料工程的重要桥梁。回顾学科发展脉络可以从20世纪Staudinger提出高分子概念谈起,随后Flory的统计理论与橡胶弹性、Rouse/Zimm链动力学与溶液理论、de Gennes的标度思想与Doi-Edwards爬行模型相继奠定了熔体与溶液理论的基础^[1]。此后关于玻璃化转变、结晶与形态学、散射表征与非平衡过程的研究不断深入,使“结构—运动—相互作用—性能”的统一图景逐步清晰。因此,在本科阶段进行系统而现代的高分子物理教学,不仅关系课程本身,更有助于学生形成理解材料行为与理性设计的通用语言,并为高分子化学、加工成形、表征技术与材料计算等后续课程提供支撑。面对新能源、生物医用与电子信息等新场景以及数据密集与智能化的研究范式,教学内容与方法亟须把经典理论同现代表征、模拟和数据方法结合起来。

高分子物理的诸多关键理论源自对性质与现象的持续观察与准确测量^[2],而非纯粹的抽象推演。橡胶的大弹性与回弹促进了统计网络与自由能弹性理论的形成,良溶剂与 θ 溶剂条件下链尺寸和黏度的标度关系推动了高分子溶液理论的发展。由此可见,课程学习宜与对材料性质的认识同步进行。如果只从抽象理论出发,容易偏离材料的客观行为,削弱学生的问题意识与证据意识。更为可取的路径是“案例—性质—模型”。教学先从可观测性质切入,如高弹性、剪切变稀与第一法向差、 θ 条件下链尺寸与黏度的标度、玻璃化转变中的 α 弛豫与热容阶跃、结晶或相分离的散射峰与显微形貌,随后引导学生完成现象描述与量化,再抽象变量与假设并建立模型,通过检验明确概念的适用范围与边界条件,逐步形成以证据为中心的物理直觉与工程判断。

分子模拟方法的成熟^[3]与算力的普及,为教学提供了可控变量的虚拟实验平台。学生在安全、低成本、可复现的条件下,可以独立调控链长、组成、带电比例、溶剂质量、温度与离子强度等参数,获取径向分布函数、均方位移与扩散系数、回转半径与链末端距、应力—应变与黏度、体积—温度曲线中的玻璃化转变特征等一系列可测性质。配合数据生成、处理与可视化的完整流程,学生能够获

得对关键性质的一手认识^[4]。与此同时,人工智能在材料与化学领域的应用持续深入,涵盖性质预测、结构—性质映射、分子与配方的反向设计^[5,6]以及与自动化平台^[7]耦合的自驱动研究。高等教育正加快迈向智慧教育阶段,需要在专业布局、课程体系、教学评价与平台资源等方面推进人工智能赋能^[8],以形成契合中国场景的实践路径^[9]。在此背景下,将人工智能方法同高分子物理等基础课程结合^[10],有助于增强证据意识,强化跨学科能力,并优化学生的学习路径。

基于以上认识,我们在面向低年级本科生的“软物质前沿材料与智造”课程中设计并实施“人工智能辅助的软物质理性设计”项目化单元。该单元以“案例—性质—模型—验证”为主线,围绕真实且可操作的问题组织学生开展建模与仿真,以径向分布函数与链末端距等可测量量形成证据,并借助机器学习完成性质预测与对比分析。通过全流程的培养,训练学生“提出问题—设计方案—生成证据—解释与迭代”的科研逻辑与表达能力。

1 课程概述

1.1 课程定位

本单元定位为高分子物理的预科型项目实践,强调以可观测代理量与模板化脚本建立问题意识与证据意识,不以完整推导替代主干课程的系统训练。作为探索项目式实践,本课程设于大一第二学期。第一学期的“线性代数”“微积分”“Python编程基础”与“AI导论”已覆盖本课程的基本前置要求(图1),内容包括矩阵与向量运算、最小二乘与特征值的直观理解,极限与导数及积分的物理含义,Python的文件读写、数组运算与基础可视化,监督学习的训练、验证与测试流程。课程不依赖高深的统计力学或量子化学推导。分子模拟与机器学习环节以模板化脚本与可视化解释为主,可视作即插即用的虚拟实验装置。学生主要完成输入与输出接口以及关键参数设置,在实践中把握概念与流程,形成基于证据的理解。考虑到“高分子物理”相关的课程的入门具有一定的理解门槛,我们以一个可操作且数据明确的案例先行,促成直观认识与初步概念的形成,起到缓冲与过渡的作用。课程聚焦于概念—性质—证据的连贯理解与可复现工作流的形成;对于需要更系统理论推导与更高难度建模的学习需求,后

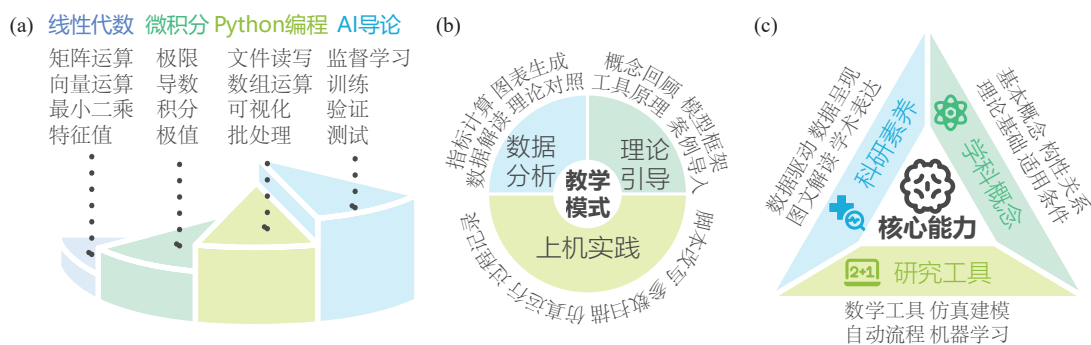


图1 课程定位、授课方式及教学目标概览

Figure 1 Overview of course placement and prerequisites, instructional approach, and learning objectives

续将由高年级“高分子物理”等主干课承接。

1.2 教学方式

课程采用“理论引导—上机实践—证据分析”的混合式教学(图1),共32学时,持续8周,每周连续4学时。课堂节奏依次为理论导入、上机实践与结果讨论。理论导入阶段约45 min,用于回顾必要概念并介绍当周工具的原理与使用。上机实践阶段约90 min,在教师与助教走动式指导下完成建模、仿真、分析或训练中的核心任务。结果讨论阶段约45 min,小组即时展示当周产出,小组即时展示当周产出并开展同伴互评,围绕数据与理论之间的对应关系进行讨论,明确可得到的结论及其适用范围。全班按照项目分组,组内分工涵盖脚本、建模、可视化与报告,以共同目标配合差异任务的方式兼顾个体差异与协作效率。8周结束后统一组织课程答辩汇报。学生基于自身仿真数据与机器学习结果进行展示与问答,围绕问题、方法、结果与讨论、结论、局限与改进展开,由学院教师担任评委。

1.3 培养目标

如图1所示,本课程聚焦3项核心能力。

(1)培养学科基本概念。建立高分子物理基本概念与材料性能的映射,理解“结构—性能—功能”的因果框架与适用条件。能够用1~2个可测性质如径向分布函数、回转半径、链末端距说明模型的适用范围与局限。

(2)熟悉常用研究工具。巩固线性代数与微积分在建模与算法中的应用,理解仿真的输入、运行与输出流程,能够复用模板化脚本完成一次可复现实验,掌握数据处理与基础机器学习方法,包括特征工程、交叉验证与误差分析。

(3)提升科研素养。形成数据驱动与可复现

的工作流,具备结果解读与证据表达能力,做到图表与代码一致,能够撰写中英文摘要与图注,并在5~8 min的口头报告中清晰呈现问题、方法、结果与结论。

1.4 课程所需软硬件

为保障虚拟实验平台的可达性与可复现性,课程提供统一的计算与软件环境。计算平台为具备统一Linux环境的超算集群,支持SSH访问,并配套作业调度与资源队列说明以及示例提交脚本。核心软件包括LAMMPS^[11]与Python生态系统,涵盖NumPy、Matplotlib、MDAnalysis、scikit-learn、XGBoost、PyTorch,均预置在统一的Conda环境中便于启用。可视化工具采用(visual molecular dynamics, VMD),用于结构与轨迹展示。

2 教学案例

在课程定位、教学方式与培养目标明确之后,项目化实施需要一个能够承载从问题提出到证据验证全流程的核心案例。案例的选择直接影响学生能否在有限学时内建立稳定的证据链与可复现的工作流,也关系到知识点的串联方式与小组协作的组织效率。

本课程对案例的选择遵循若干标准。首先,应具备清晰的可观测量与量化路径,能够在仿真与数据分析中直接获得关键指标。其次,变量应可控且在不同尺寸的体系中均有意义,便于在同一框架下设置不同难度梯度,并支持小样本下的机器学习建模。再次,需要与经典概念保持可对应关系,以便将新方法 with 学科核心知识相互校验,同时与工程应用存在自然联系,提升学习动机与迁移价值。最后,案例应便于产生标准化数据与记录,支撑组间比较与结果复现。可供选择的教

学案例并不局限于单一体系。橡胶网络的高弹性与统计模型、玻璃化转变中的体积与松弛特征、相分离与散射表征、液晶序参量与相行为、胶体自组装与DLVO相互作用、表面活性剂的临界胶束与相图等主题,均能够满足上述要求,并可据此构建不同路径的证据链。

本轮教学选择聚电解质的带电序列效应作为核心案例(图2),主要基于3方面考虑。其一,电荷序列作为结构层面的可编程变量,既能在粗粒化模型中直接实现,也便于构造机器学习的输入表示,适合组织差异化的小组课题。其二,该体系跨越单链构象、链间有效相互作用与宏观响应等多个尺度,相应的代理量在模拟中直接可得,便于形成从问题到证据的连续链条。其三,聚电解质在水处理、能源与生物医用等领域应用广泛^[12],案例具有现实意义,同时可自然扩展到两性电解质等变体,支持流程迁移与方法对比。需要说明的是,所述框架并非仅适用于聚电解质,后续亦可按相同评价指标平移至液晶、胶体或表面活性剂等主题,以满足不同教学轮次或跨学科联动的需要。

聚电解质是主链上携带可电离基团的高分

子,广泛应用于水处理与分离、聚合物电解质与离子导体、燃料电池膜、医用粘附与药物递送、功能涂层与传感以及流变调控与絮凝等领域^[13]。由于静电相互作用具有长程特征且可由介质与离子环境调控,聚电解质体系天然呈现分子、介观与宏观层面的强关联属性,适合作为连接课堂理论与工程应用的教学案例。

在化学组成既定的前提下,带电序列即正、负与中性单元在链上的排布方式会显著影响体系性质。序列决定了反离子凝聚与静电屏蔽的程度,并改变链内与链间相关性,从而在不同尺度上产生可测效应^[14]。极稀溶液中,单链构象对应的回转半径与链末端距对序列的团簇度、盐度与介电环境十分敏感。本体或多链体系中,序列还会影响正负聚电解质带电基团的等效作用强度、扩散系数与黏弹谱,从而牵动复杂共沉、离子传导与力学响应等宏观行为。准确把握“序列—性质”的因果路径,有助于建立从结构到功能的物理直觉,并直接服务于膜分离、抗污涂层、离子导体、软电子材料、医用水凝胶与絮凝剂等应用设计。基于此,后续教学选取可在模拟与数据中直接观测的

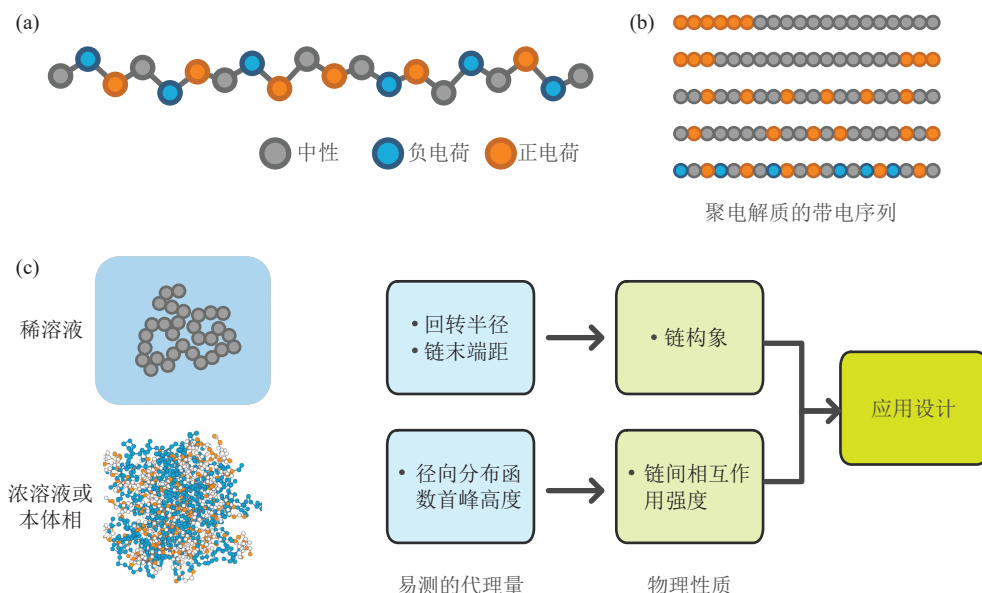


图2 课程教学使用的教学案例——聚电解质中的带电序列效应:(a)聚电解质主链上正电、负电与中性单元的序列排布示意;(b)具有不同电荷序列特征的代表性聚电解质链示例;(c)用于表征序列效应的代理量示意。这些可观测量可在分子模拟与数据分析中直接获得 用于量化序列对链构象与有效相互作用的影响

Figure 2 Representative case study for the course—charge-sequence effects in polyelectrolytes: (a) Schematic illustration of charge patterning along a polyelectrolyte chain, including positively charged, negatively charged, and neutral units; (b) Representative polyelectrolyte sequences with distinct charge arrangements; (c) Proxy observables used in the project. These quantities can be directly obtained from simulation and analysis to quantify how charge sequence modulates chain conformation and effective interactions

代理量作为抓手,如径向分布函数(RDF)首峰、回转半径、链末端距与扩散系数,逐步展开建模、仿真、统计与学习的证据化路径。具体安排见第4节。

3 教学内容与实施路径

课程内容围绕“序列—性质—模型—验证”的主线推进,用8周完成从科学问题到证据、从工具到方法的衔接(图3)。每周要求产出可复用的脚本或图表,以保证学习过程的可追溯与结论的可验证。

3.1 序列效应导论与兴趣激发(4学时)

以“序列决定性质”的直觉为线索,从生物大分子入手,先讨论DNA的碱基序列及其编码功能,继而说明蛋白质一次序列对折叠与功能的决定作用,并以多糖的构象偏好、黏附与识别为例完成过渡。随后引出合成聚电解质的带电序列问题,比较交替、嵌段、随机与簇状或图案化排布对反离子凝聚与静电关联的影响。借助AlphaFold^[15]等数据驱动范例,说明机器学习在“序列—结构或性质”映射上的潜力,同时强调其建立于大量可重复证据之上。单元收束于一个明确的问题,即在模拟中通过末端距、回转半径与径向分布函数首峰等代理量刻画序列对构象与有效相互作用的影响,并据此反向指导应用场景中的序列设计。

3.2 Linux与脚本化的实验工作流(4学时)

本模块完成虚拟实验装置的搭建,内容涵盖远程连接、目录规范、权限管理、作业调度与日志留痕。学生在示例脚本基础上改写并运行最小可

复现实验,理解环境变量与依赖管理,掌握批处理提交与资源队列使用,建立“以脚本保障可复现、以日志保障可追溯”的底层工作流。

3.3 粗粒化分子动力学与轨迹证据(8学时)

本模块按照由简到繁的顺序组织内容。先以单粒子体系演示分子动力学的基本设置与数据采集,明确势函数、边界条件与时间步长等要素,并以标准化表格记录参数与随机种子。再以中性高分子链为对象,采集轨迹并在Python与MDAnalysis环境下处理数据,计算并解读径向分布函数的首峰位置与高度、回转半径与末端距等表征量的分布与均值,形成“图—表—文”一体化的证据板,完成从轨迹到证据的训练。在掌握上述方法后,引入聚电解质链与长程静电作用,并据此理解并分析带电序列对构象与有效相互作用的影响。

3.4 机器学习的序列—性质映射(12学时)

将“序列—性质”的物理问题形式化为可学习的预测任务。在小样本且结构清晰的特征工程框架下,如one-hot、图案度量与团簇指标,先以随机森林与XGBoost建立基线模型,通过交叉验证、学习曲线与误差分解识别欠拟合或过拟合,并用特征重要性与部分依赖分析建立可解释与可追溯的结论。随后引入多层感知机与卷积神经网络,比较不同输入表示如序列窗口与图案图像化对回转半径、链末端距或等效作用强度等目标量的回归能力。训练过程中采用早停、权重衰减与Dropout控制模型复杂度,并以保留集或外推集检

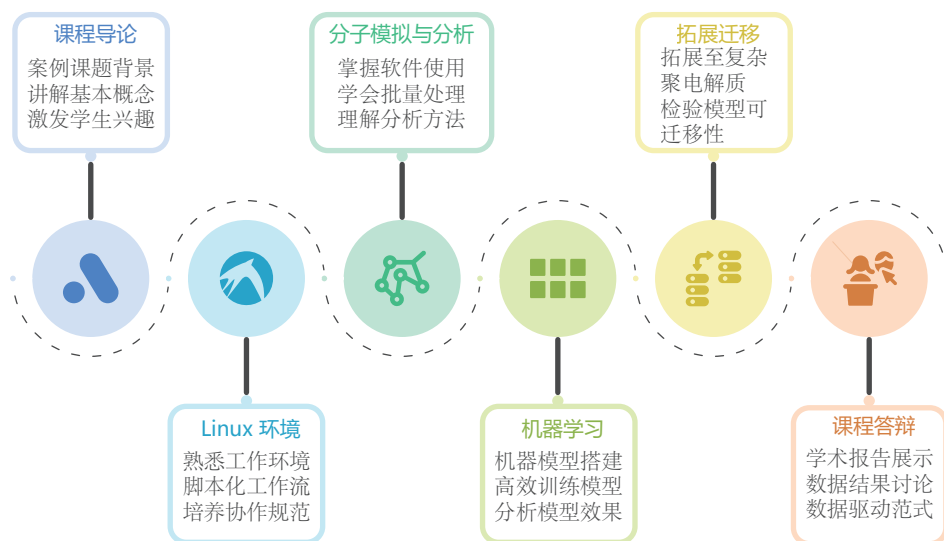


图3 课程教学内容与实施路径

Figure 3 Curricular content and implementation roadmap

验泛化边界。全过程要求将数据清洗、特征或架构、训练、评估与不确定性陈述写入可复现实验记录。

3.5 拓展与迁移(4学时)

以两性电解质为对象,在更复杂的电荷分布与构象变化情境下检验流程的可迁移性。学生用脚本快速搭建模型与批处理仿真,统计径向分布函数与回转半径等指标,并将“序列-性质-模型”的映射迁移到新体系,比较不同序列图案对构象与有效相互作用的影响。

3.6 课程答辩

课程在第8周教学结束后组织统一答辩,采用学术会议式口头报告。每组10 min展示与5 min问答,鼓励全英文汇报。若英语能力有限,至少需以英文给出题目、摘要、图注与关键术语,并在答辩中保持一致的学术表达。报告需围绕“科学问题-研究思路-结果与讨论-结论与展望”的逻辑展开,先明确所关注的序列-性质映射问题及其应用动机,并交代背景文献与假设边界,再说明研究思路与技术路线,包括建模与仿真方案、数据处理与表征量以及学习模型与评估流程。在结果与讨论部分展示可复证据,如预测与真值对比、误差与不确定性分析、特征重要性或消融实验,并给出物理机制层面的解释与失败用例的反思。最后以简明结论收束,指出对膜分离、离子导体或医用水凝胶等场景的设计启示,提出下一步的改进设想,如更长时间尺度、更高盐度、替代表征量或更严格的外推检验。

4 教学成效

课程实施表明,学生能够在限定周期内完成从建模与仿真到数据分析与学习建模的闭环。多数小组可以独立运行并记录一套可复现实验,提交包含参数表与随机种子的清单,并给出清晰的日志与计算流程。轨迹分析报告能够对径向分布函数的峰位与强度进行量化比较,将回转半径与末端距离的分布变化同带电序列的团簇程度与离子环境关联起来,给出以数据为依据的物理解释。

在机器学习模块中,学生完成了真值与预测结果的对比可视化(图4a),并能够识别典型的过拟合征兆与可能的误差来源。一些小组进一步比较了不同的机器学习方法(图4b),报告了特征重要性或消融实验的结果,尝试从模型行为回溯潜

在的物理机制(图4c)。结课展示整体表现稳定,报告结构清楚,问题与方法的阐述连贯,问答能够引用自身证据与记录。部分小组采用全英文汇报,体现出较好的学术表达与团队协作能力。课程反馈显示,学生对以证据为核心的学习方式具有较强获得感,对分层分工与同行互评持积极态度。

5 教学反思

本课程在8周实践中逐步形成了以模拟+机器学习为骨架、以证据为核心的学习路径,学生的可复现意识、数据驱动的科学范式意识得到明显提升。案例驱动的任务设计能够激发参与度与同伴讨论。与此同时,也显现出时间跨度有限与内容取舍之间的矛盾,不同学生的知识基础与编程熟练度差异较大,模板化脚本与自主探索之间的平衡仍需优化。以下从知识覆盖与课程定位、研究任务分化与协作机制、课程体系的外延与迁移3个方面进行反思。

5.1 知识覆盖与课程定位的界定

本课程采用案例式推进,突出可观测量与证据链构建。这一取向有助于快速建立问题意识与基本概念,但也带来知识覆盖不完整的问题。当前内容难以系统呈现高分子物理的全部框架,诸如链统计与标度关系的系统推演、溶液与熔体的热力学与相行为、缠结与黏弹响应的统一表述等主题,仅在局部片段中出现或以结果性表述代替推导。由此可见,本课程更适合被定位为高分子物理的预科单元,目标是帮助学生建立初步的学科图景,熟悉若干核心量与其物理意义,例如回转半径、链末端距、径向分布函数,理解序列与性质之间的因果路径,并在实践中形成以证据为中心的学习方式。为缓解案例式教学的割裂感,后续拟在两方面强化支撑。其一,提供与主课程对应的概念导图与补充阅读清单,明确案例所关联的经典章节与公式来源,给出术语表与常用符号表。其二,配套若干微型讲义页,用一页纸形式归纳定义、近似与适用边界,并附带最小化推导与经典参考,便于学生在实践中快速回溯。

5.2 研究任务分化与协作机制

本轮实践中存在一个突出问题。各小组围绕几乎相同的研究问题展开,所用参数设置与技术路线高度一致,导致产出相似、比较意义有限,小组间的讨论也缺乏深度与广度。为了提高交流质

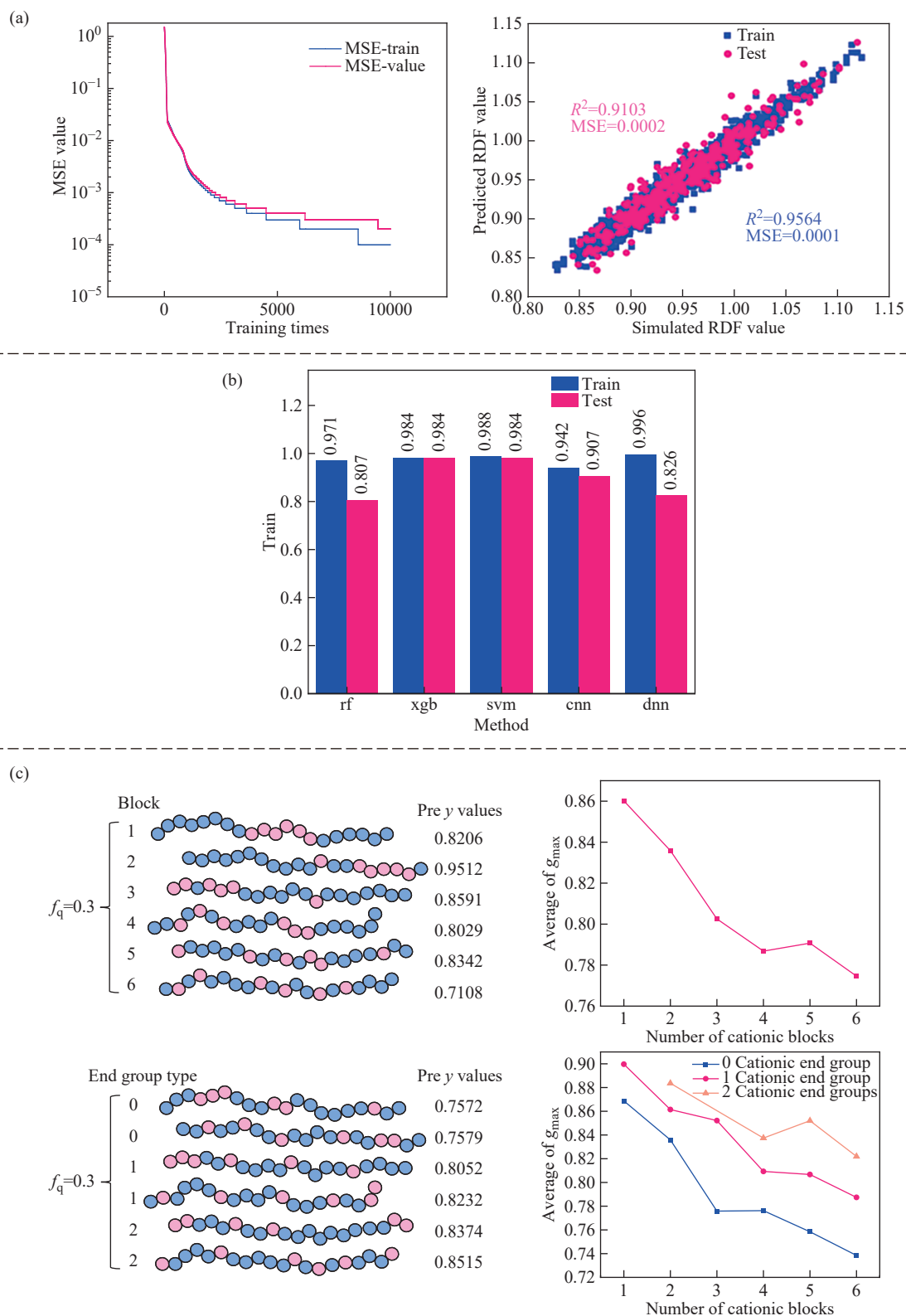


图4 学生代表性结果:(a)卷积神经网络的训练过程与预测表现;(b)不同机器学习方法的对比;(c)性质预测与规律识别
Figure 4 Representative student results: (a) Training process of a convolutional neural network and its predictive performance;
 (b) Comparison of different machine-learning methods; (c) Property prediction and pattern discovery (MSE: squared error)

量与证据积累的效率,下一轮需要在保持可比性的前提下引入明确的任务分化。后续可采用共同

框架与差异化课题的组织方式。共同框架指统一的数据结构、记录规范与评价指标,确保不同小

组的结果可以对照与复现。差异化课题指在核心主题不变的情况下,为各小组设定有区分度的研究焦点。差异可以体现在物理情景上,如势函数与边界处理的选取、盐度与温度范围、链长与序列图案的组合;或体现在方法路径上,如表征特征的构建方案、学习模型与超参数、训练目标从回转半径或链末端距扩展到等效相互作用强度与扩散系数。通过上述分化,每个小组在共同评价体系下形成可对比又互补的证据集合。

5.3 可推广性与课程群构想

以建模、仿真、分析、学习与反向设计为主线的证据化路径具有良好的可迁移性,能够在更广谱的软物质对象中复用。液晶主题可以围绕序参量与各向异性相互作用展开,引入自由能曲线与相行为的定量表述,并以散射或光学响应作为可观测量。胶体与界面主题可以延伸至DLVO相互作用与自组装过程,结合粒径分布与结构因子的统计分析,呈现由微观相互作用到介观结构的连续图景。表面活性剂与多相体系适合以临界胶束浓度、界面张力与相图为核心指标,通过分子模拟与数据拟合展示配方调控规律。上述主题同样可以采用序列或配方图案作为自变量,使用通用代理量并在统一评价框架下组织教学。基于此思路,可逐步建设“高分子物理+X”课程群,在本科阶段实现从概念到工具再到证据的螺旋式进阶。

6 结语

面向本科阶段的高分子物理教学需求,围绕序列、性质、模型与验证的主线,提出了一套依托虚拟实验平台与数据方法的课程方案。课程定位于大一第二学期,在学生具备线性代数、微积分与Python基础之上,采用理论引导、上机实践与证据展示的混合教学,形成从建模、仿真、分析到学习建模的可复现 workflows。以聚电解质的带电序列效应为核心案例,学生在LAMMPS与Python环境中获取径向分布函数、回转半径与链末端距等可测量量,并借助机器学习刻画序列与性质的映射,最终通过课程答辩完成对科学问题、研究思路、结果与讨论、结论与展望的学术化表达。教学实践显示,该课程有助于提升学生的概念理解与工具应用能力,促进证据表达与数据驱动思维的养成。课程主线具有迁移潜力,可扩展至液晶、胶体与表面活性剂等主题,为本科阶段整合经典

理论、现代模拟与人工智能提供了一种可借鉴的方案。

致谢: 本课程的设计实施与本文撰写过程中,文韬、袁雪迎、韦晓汉等师生提供了宝贵的意见与支持,谨致谢忱。

参考文献

- 1 Rubinstein, M.; Colby, R. H. *Polymer Physics*. New York: Oxford University Press, 2003.
- 2 郭改萍, 于建香, 戴玉华. 浅谈高分子物理教学的形象化. *高分子通报*, 2022 (9), 144–146.
- 3 Curtarolo, S.; Hart, G. L. W.; Nardelli, M. B.; Mingo, N.; Sanvito, S.; Levy, O. The high-throughput highway to computational materials design. *Nat. Mater.*, 2013, 12(3), 191–201.
- 4 钱虎军, 施睿, 吴光鹭, 朱轩伯. 用于高分子物理教学的虚拟仿真平台开发及其教学实践初探. *大学化学*, 2025, 40 (4), 147–153.
- 5 Sanchez-Lengeling, B.; Aspuru-Guzik, A. Inverse molecular design using machine learning: generative models for matter engineering. *Science*, 2018, 361(6400), 360–365.
- 6 Butler, K. T.; Davies, D. W.; Cartwright, H.; Isayev, O.; Walsh, A. Machine learning for molecular and materials science. *Nature*, 2018, 559(7715), 547–555.
- 7 Volk, A. A.; Abolhasani, M. Performance metrics to unleash the power of self-driving labs in chemistry and materials science. *Nat. Commun.*, 2024, 15, 1378.
- 8 谢丹, 陈凤青, 姜柏羽, 肖友华, 刘丽娜, 戴进峰. 基于知识图谱与AI赋能高分子化学的数智化教学思考. *高分子通报*, 2025, 38(5), 837–843.
- 9 张立群. 人工智能赋能高等教育教学改革的中国范式构建. *中国高等教育*, 2024, (24), 9–13.
- 10 高粱. 高分子物理的“理-实-智”一体化课程改革探索: 以聚乙烯醇缩丁醛合成-结构-性能为课程载体. *高分子通报*, 2025, 38(6), 972–981.
- 11 Thompson, A. P.; Aktulga, H. M.; Berger, R.; Bolintineanu, D. S.; Brown, W. M.; Crozier, P. S.; in 't Veld, P. J.; Kohlmeyer, A.; Moore, S. G.; Nguyen, T. D.; Shan, R.; Stevens, M. J.; Tranchida, J.; Trott, C.; Plimpton, S. J. LAMMPS—a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales. *Comput. Phys. Commun.*, 2022, 271, 108171.
- 12 Sui, Y.; Yin, T. T.; Yang, Z. X.; Zhao, Y. C.; Kong, X. Y.; Wu, D. L.; Zhou, J. J.; Chen, X. P.; Kong, X. Tunable electric double-layer capacitor performance through engineered charge patterns in polyelectrolytes.

- Macromolecules*, **2025**, 58(13), 6883–6896.
- 13 Rumyantsev, A. M.; Jackson, N. E.; de Pablo, J. J. Polyelectrolyte complex coacervates: recent developments and new frontiers. *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.*, **2021**, 12, 155–176.
- 14 Sundaravadevelu Devarajan, D.; Wang, J. H.; Szała-Mendyk, B.; Rekhi, S.; Nikoubashman, A.; Kim, Y. C.; Mittal, J. Sequence-dependent material properties of biomolecular condensates and their relation to dilute phase conformations. *Nat. Commun.*, **2024**, 15(1), 1912.
- 15 Jumper, J.; Evans, R.; Pritzel, A.; Green, T.; Figurnov, M.; Ronneberger, O.; Tunyasuvunakool, K.; Bates, R.; Židek, A.; Potapenko, A.; Bridgland, A.; Meyer, C.; Kohl, S. A. A.; Ballard, A. J.; Cowie, A.; Romera-Paredes, B.; Nikolov, S.; Jain, R.; Adler, J.; Back, T.; Petersen, S.; Reiman, D.; Clancy, E.; Zielinski, M.; Steinegger, M.; Pacholska, M.; Berghammer, T.; Bodenstein, S.; Silver, D.; Vinyals, O.; Senior, A. W.; Kavukcuoglu, K.; Kohli, P.; Hassabis, D. Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature*, **2021**, 596(7873), 583–589.