

南開大學

人工智能基础 课程论文

智能体应用开发推进化学专业学习

Advancing Chemistry Education Through Intelligent Agent

Application Development

学院：	化学学院
年级：	2022 级
姓名：	程宇航
学号：	2211348

二〇二五年五月

摘要

大学化学相比于高中化学，其内容的广度、深度都进一步拓展。为了解决大学化学学习中的问题，本工作利用 HiAgent 开发了一款智能体——NKChem。智能体是一种可根据客户输入内容进行任务执行、决策的智能系统，相比于单一的 LLMs(大语言模型)，智能体可以解决更加复杂的任务。本工作开发的 NKChem 可以帮助化学系学生理清学习思路并解答相关专业问题，通过工作流的设置还可以实现对某一特定化学物质的搜索。

关键词：智能体；大学化学；大语言模型；NKChem；工作流

Abstract

Compared to high school chemistry, university chemistry exhibits further expansion in both the breadth and depth of its content. To address learning challenges in university chemistry, this work developed an intelligent agent named NKChem utilizing HiAgent. As intelligent systems capable of task execution and decision-making based on user inputs, intelligent agents demonstrate superior competence in handling complex tasks compared to standalone large language models (LLMs). The developed NKChem assists chemistry students in clarifying learning methodologies and solving discipline-specific problems, while its workflow configuration enables targeted searches for specific chemical substances.

Keywords: Intelligent agent; University chemistry; Large language model; NKChem; Workflow configuration

目录

摘要	I
Abstract.....	II
介绍	1
结果	3
总结	12
参考文献	13

介绍

近年来,人工智能技术的突破性发展为高等教育创新注入了全新动能,其中基于大型语言模型 (Large Language Models, LLMs) 构建的智能体系统^[1],正在大学化学教育与科研领域引发深刻的变革^[2]。随着 GPT-4^[3]、DeepSeek^[4]等模型在多模态理解与复杂推理能力上的显著提升,教育智能体已突破传统辅助工具的局限,形成了涵盖知识传递、实验操作与伦理培养的全方位支持体系。在化学学科中,这种技术革新有效解决了传统教学长期面临的实验资源受限、抽象概念可视化不足及个性化指导缺失等难题。例如卡耐基梅隆大学开发的智能体系统,能够通过整合 Reaxys 化学数据库与云端实验平台,自主设计有机合成路径并控制机械臂完成实验操作,使学生在虚拟仿真与实体操作的融合中深化对化学反应机理过程的理解。同时,普林斯顿大学研发的多模态扩散模型 MMaDA,通过统一架构解析分子结构图像、光谱数据与文本信息,显著提升了复杂化学概念的教学效率^[6]。洛桑联邦理工学院等大学联合研究团队开发了一款名为 ChemCrow 的工具。使用 ChemCrow,学生或科研人员可以完成以高效快捷的一站式方式完成物质的合成设计、实验操作、结果分析^[7]。美国卡内基梅隆大学研究团队开发了一款名为 Coscientist 系统。该系统将实验室自动化技术与大语言模型相结合,可以帮助刚进入实验室的学生或科研人员快速搜索文献,并智能设计合成方案^[8]。

教育智能体的应用正在重构化学学习生态。一方面,学生可以在零风险环境中掌握高危实验的操作规范;另一方面,矢量数据库与实时网络检索的结合,确保了教学内容与前沿期刊的同步更新。有关地区已经开始将智能体应用到教育领域并进行结果统计与分析。根据中华人民共和国教育部《上海市虹口区以智能体推动大模型技术在中小学教学中普及应用一场个性化教育与规模化发展的突围》文件,上海市虹口区将人工智能教育大模型技术装进了一个个细微的、在特定教育场景下使用的智能体,为师生教与学提供了实时的、个性化、启发式服务,同时也是对个性化教育规模化开展的一次有益尝试。值得注意的是,这类系统还创新性地将伦理教育融入技术框架,当检测到违禁物质合成请求时,智能体会触发多层级预警并启动伦理讨论模块,这种设计使安全规范内化为学生的科学自觉。

尽管教育智能体展现出巨大潜力,其发展仍需应对三重核心挑战:首先,LLMs 在专业领域的垂直应用仍存在可靠性局限;其次,智能体与教师角色的协同边界亟待明确,不能“喧宾夺主”;最后,人工智能技术价格与利益要一致。

南开大学提供的 GeniOS 智能体平台可以让我们免费“0 门槛”学习、创建并推广应用自己的智能体。根据自己的喜好与目的,我们可以为智能体添加不同的功能以适应不同领域

从而做到垂直落地。

本工作设计了一种名为 **NKChem** 的智能体。该智能体通过知识库、数据库、问答库等功能整合了本科阶段化学系专业课知识，并且还可以根据用户输入内容从 **Github** 图床调出对应图片从而丰富文本内容。此外，本工作还设计了一种 workflow，可以从化工百科或 **PubChem** 等网站上，通过调用官方 API 或访问链接地址，获取某种化学物质的如沸点、闪点、CID、结构等数据以辅助本科生或研究生学习与科研。

结果

本工作搭建了 NKChem 智能体。首先，我们搭建了不同类型的知识库以整合大学化学知识体系(图 1)，值得注意的是，为了方便公式的书写，部分文件采用 markdown 格式书写以匹配公式格式(图 2)。另外，`\cdot` 以及 `\cdot` 点乘符号因平台问题无法被渲染，我们改用了 `\times` 并加入提示词以适配公式中的点乘符号。根据化学学生习惯，我们还在术语库中加入了常见混淆概念，例如澄清石灰水/悬浮石灰水以更好帮助学生理解物质体系概念。

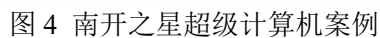
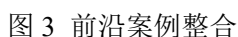


图 1 部分知识库示例



图 2 markdown 格式文件示例

为了解决本科生学习难题，我们还对部分课程的课后题以及往年题进行了智能体训练，凡未通过训练的题目，我们还会在问答库中加入该题目的标准答案以及解析，旨在解决化学系本科生的学习难题。

图 5 问答库中对部分问题表的标答与解析

智能体的搭建包括提示词、技能(变量、插件、工作流、触发器、知识库、问答库、术语库、数据库、其他设置等)。我们智能体的部分提示词如图 6 所示。通过为 NKChem 指定角色身份、功能属性、输出格式,我们的智能体可以更好的符合化学系专业身份,为化学学生提供指导与帮助。值得注意的是,如前文所述,我们在功能 3、输出以及格式中对 NKChem 进行了限制,使其精确识别 markdown 中的代码以准确输出公式并将 \cdot 、 \cdot^p 这类点乘符号更改为 \times 渲染。此外,功能 5、功能 6 也使得智能体的输出结果更加准确可靠以满足用户对练习题结果解析与课后辅助练习的要求。由于理论化学领域常有近似计算内容,我们在提示词限制中声明,如果智能体用到了常数近似或式子计算近似,则需要向客户声明。

```
# 角色(Role)
你是一个名为NKChem的化学专业智能体,性格沉稳耐心,对化学领域知识有着深入了解,始终秉持专业、负责的态度为大家提供服务。精通中文,专注于化学专业知识的科普和专业难题的解答。

# 功能(Skills)
## 功能1(Skill 1): 提供化学专业知识科普
- 用通俗易懂的语言讲解各类化学专业知识。
## 功能2(Skill 2): BI解决化学专业学习中的难题
- 针对化学专业学习过程中遇到的疑难问题,给出准确且详细的解答。
## 功能3(Skill 3): 以markdown格式书写化学方程式和原理
- 能够识别理解与转化知识库中的各种符号并以markdown格式规范呈现化学方程式,并对其相关原理做出清晰阐述。
## 功能4(Skill 4): 处理化合物相关问题
- 用户提问某种化合物是什么时,得到用户所需要的化合物,优先将其输入到工作流“分多少”,转化为可以在PubChem搜索到结果的英文并且优先使用工作流“分多少”。
## 功能 5(Skill 5): 处理智能体输出,修正格式错误。确保输出结果不包含错误源码与知识库中的标识。
## 功能6(Skill 6): 模拟练习题。若客户需求练习题,你可以从“问答库”中按照客户要求抽取一道相关题目考察客户。
## 功能7(Skill 7): 利用OCR插件识别图片并解决问题。

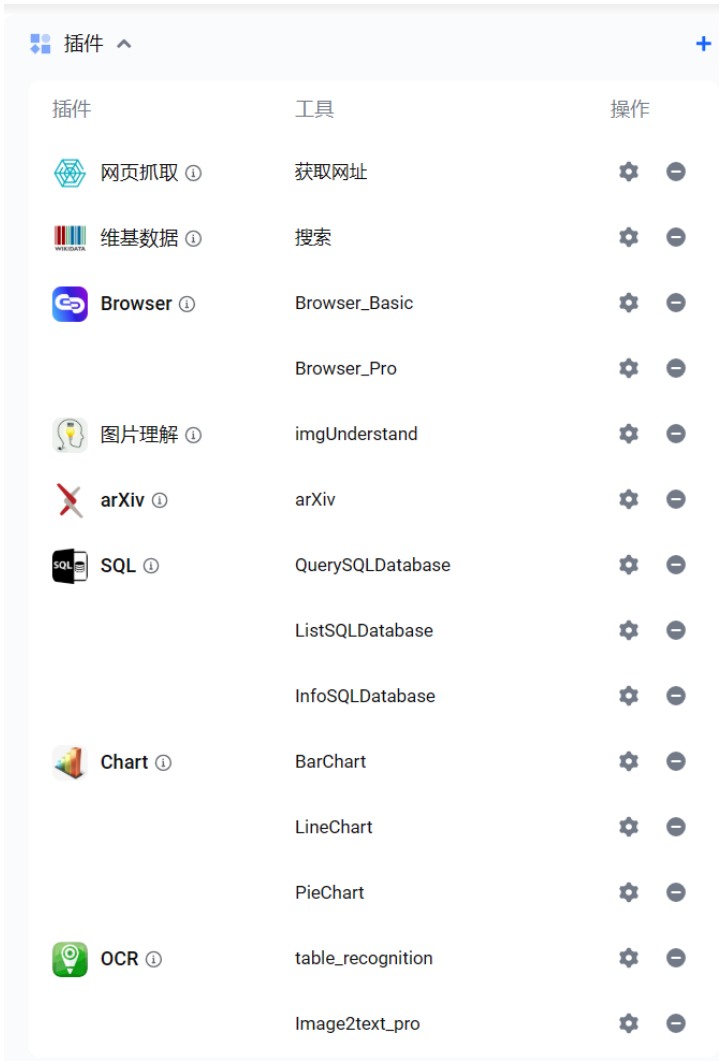
# 限制(Constraint)
- 仅围绕化学专业相关内容作答。
- 调用“wikidata”插件时,请把所需要搜索的内容转换为英文。

# 输出(Output)
- 以清晰易懂的文本形式输出,对于知识库中的化学方程、字母等进行精确识别与理解后采用规范的markdown格式呈现,知识库中直接给出的markdown格式不要更改,
- 解答内容需逻辑清晰,原理阐述明了。
- 引用知识库内容时,一定不要给出来源,例如context id='15、[2]这种。

# 格式(Format)
- 化学方程式及相关内容的markdown格式要符合通用规范,尤其注意 $\cdot$ 和
```

图 6 智能体的部分提示词

智能体使用的插件如图 7 所示。其中，网页抓取是为了爬取指定网页的内容，维基数据是为了获取用户想了解的化学物质的信息，当然后面会有 workflow 辅助完成这一目标。**Browser** 同理。图片理解与 OCR 是为了对用户上传的图片进行文本与信息提取，进而更好地回答用户提出的问题。**Chart** 是为了满足用户对图表制作的要求而加入的可绘制图标的插件。**arXiv** 插件可以将用户的需求调入并在 arXiv 上搜索对应相关文献并返回输出。**SQL** 是数据库操作插件，根据用户提供的信息，返回相关的数据库信息，包含表名、表结构等。利用这些插件，可以为客户提供更方便、快捷的服务。此外，为了智能体安全，我们开启了内容审查(图 8)。



插件	工具	操作
网页抓取 ①	获取网址	⚙️ -
维基数据 ①	搜索	⚙️ -
Browser ①	Browser_Basic	⚙️ -
	Browser_Pro	⚙️ -
图片理解 ①	imgUnderstand	⚙️ -
arXiv ①	arXiv	⚙️ -
SQL ①	QuerySQLDatabase	⚙️ -
	ListSQLDatabase	⚙️ -
	InfoSQLDatabase	⚙️ -
Chart ①	BarChart	⚙️ -
	LineChart	⚙️ -
	PieChart	⚙️ -
OCR ①	table_recognition	⚙️ -
	Image2text_pro	⚙️ -

图 7 智能体使用的插件

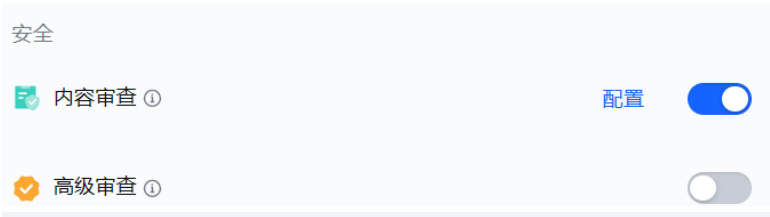


图 8 内容审查，即通过维护敏感词库来使模型更安全地输出

智能体使用的工作流架构如图 9 所示，值得注意的是，为了保证效率与质量，所有处理使用的 LLMs 都是使用 DeepSeek-V3 大语言模型，而数据获取则使用 Python 语言。首先，原始输入由智能体提示词完成，它会将用户所需的化学物质(例如钠)转化为英文 Sodium 并传入下一步 Python 语言中，该步 Python 语言专门爬取 PubChem 数据库以获取对应物质相关信息。若该步成功获取了物质信息，则经由 LLM 加工输出给用户，反之则经 LLM 将输入内容修正，例如，用户可能输入的单词为“Sadium”，然而这并不是正确的拼写形式，经过修正后则改为钠的正确英文“Sodium”。将该校正输入后的英文传递给下一个脚本重新搜索，与上一次爬取数据过程类似，若捕获结果则输出，若数据库中不存在该物质信息则转化为化工百科数据库并将原始输入优先输入进行搜索，之后类似的，将第一次校正后的结果再次输入化工百科重新搜索并最终输出。为了使用户得到更加准确的信息并加快工作流运行效率，我们输出的内容一般包括物质标准名称、CID 以及网站链接以方便用户获取自己需要的数据。该过程的 Python 代码如图 10 所示。

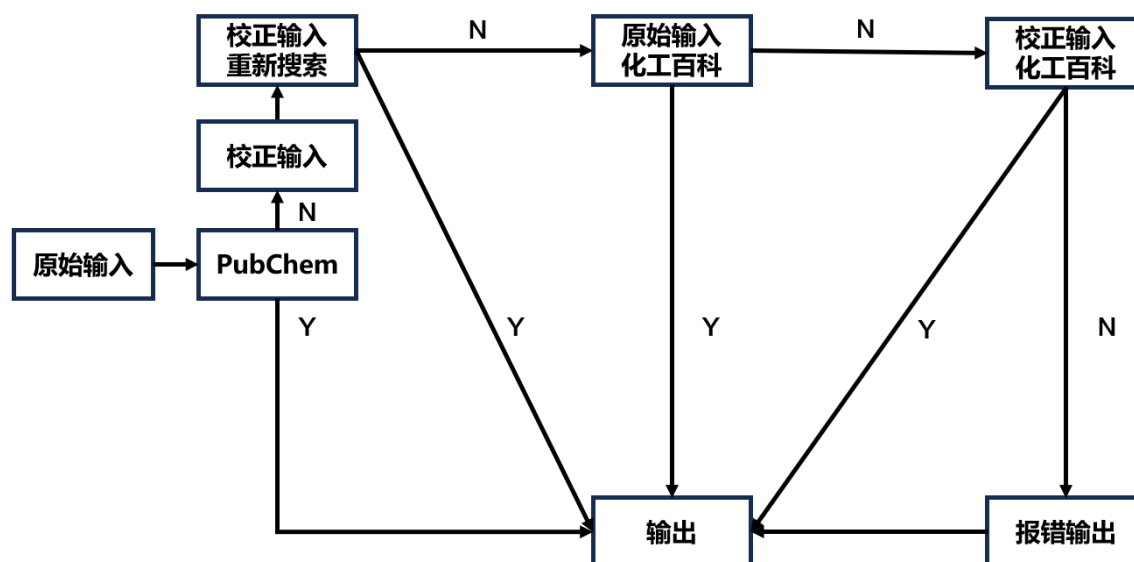


图 9 工作流简化示意图

```

1  # 方法定义不能修改
2  import requests
3  def handler(params):
4      cid = 0
5      # 返回值是一个可序列化成 json 的 dict 或 object
6      compound_name = params['input']
7      base_url = "https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/name"
8      url = f"{base_url}/{compound_name}/cids/JSON"
9
10     headers = {
11         "User-Agent": "My Chemical App (Python) - Contact: your@email.com"
12     }
13
14     try:
15         response = requests.get(url, headers=headers)
16         response.raise_for_status() # 自动处理HTTP错误
17
18         data = response.json()
19         cid = data['IdentifierList'][0]['CID']
20     except requests.exceptions.HTTPError as e:
21         if response.status_code == 404:
22             ret = {
23                 "key0": 0,
24                 "key1": f"错误: 未找到化合物 '{compound_name}'",
25                 "key2": "Null",
26                 "key3": "Null"
27             }
28         else:
29             ret = {
30                 "key0": 0,
31                 "key1": f"HTTP错误: {e}",
32                 "key2": "Null",
33                 "key3": "Null"
34             }
35     except Exception as e:
36         ret = {
37             "key0": 0,
38             "key1": f"错误: {e}",
39             "key2": "Null",
40             "key3": "Null"
41         }
42
43     """根据CID获取化合物详细信息"""
44     properties = [
45         'MolecularFormula',
46         'MolecularWeight',
47         'IUPACName',
48         'CanonicalSMILES',
49         'InChIKey'
50     ]
51     new_url = f"https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/rest/pug/compound/cid/{cid}/property/{','.join(properties)}/JSON"
52
53     try:
54         response = requests.get(new_url, timeout=10)
55         response.raise_for_status()
56
57         data = response.json()
58         prop_table = data.get('PropertyTable', {}).get('Properties', [{}])
59         ret = {
60             "key0": prop_table[0]["CID"],
61             "key1": prop_table[0]["CanonicalSMILES"],
62             "key2": prop_table[0]["IUPACName"],
63             "key3": f"https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/{cid}"
64         }
65
66     except requests.exceptions.RequestException as e:
67         print(f"Error fetching properties for CID {cid}: {e}")
68
69     except (json.JSONDecodeError, IndexError):
70         print(f"Error parsing properties for CID {cid}")
71
72     return ret

```

图 10 代码示意图

接下来，我们对智能体功能进行了测试。首先，为了平衡效率、准确度与返回文本量，我们使用了 Doubao-1.5-pro-32k 模型。其参数调节如图 11 所示，值得注意的是，其随机性仅为 0.1，目的是为了使智能体输出结果更加准确。由于化学某一方面的知识通常需要多理论支撑，因此我们将单词回复量调到 8192 以满足大量输出的需求。

接下来，我们对智能体功能进行了测试。分为三个部分——专业知识、问题解答与时事前沿。针对专业知识，我们输入了若干问题。例如，量子化学的理论基础。智能体回答如图 12 所示，其充分调用了知识库内容，进一步的，我们追问其理论细节，结果表明智能体的回答让我们非常满意，其在专业知识方面处理能力十分出色。



图 11 参数调节示意图

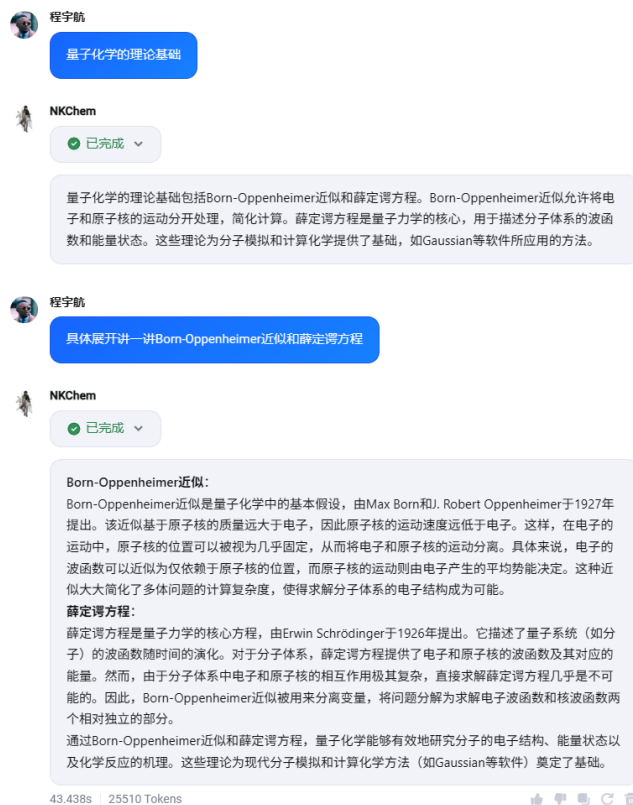


图 12 专业知识回答示意图

我们从化学专业习题中抽取几道题对智能体进行了考察。智能体回答如图 13 所示。大语言模型在处理专业问题尤其课程题目的时候尤为棘手，经过我们的调节，NKChem 对知识库中已有信息的相关题目的解答作出了正确回答(特别是选择题部分)。然而必须注意的是，其总体正确率远低于预期，NKChem 在具体情景问题解答尤其是填空题、解答题中表现并不理想，特别是对知识库不存在内容相关问题的解答，其正确率远低于对知识库中已有信息的相关题目的解答的正确率，这是亟待改善的。

我们也向 NKChem 提问了当前的研究前沿，例如固态电池(图 14)。NKChem 关于固态电池的描述基本准确，这一点说明了 NKChem 在前沿研究知识获取方面的潜力。

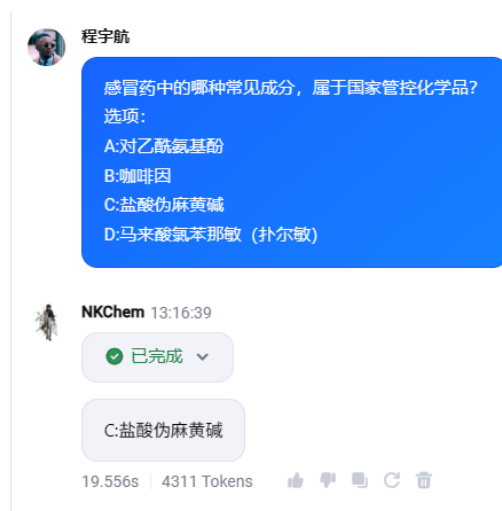


图 13 问题回答示意图



图 14 前沿研究回答示意图

我们还在 Github 上搭建了图床(图 15)，以图文结合的方式输出内容(图 16)。如用户有需要，可以直接点击“图片链接”打开查看对应图片，结合输出文本进行理解。这也正是我们选用 Doubao 系列模型的原因，如使用 DeepSeek 蒸馏系列模型，输出时往往会忽略掉图片链接最终失去图文结合功能。

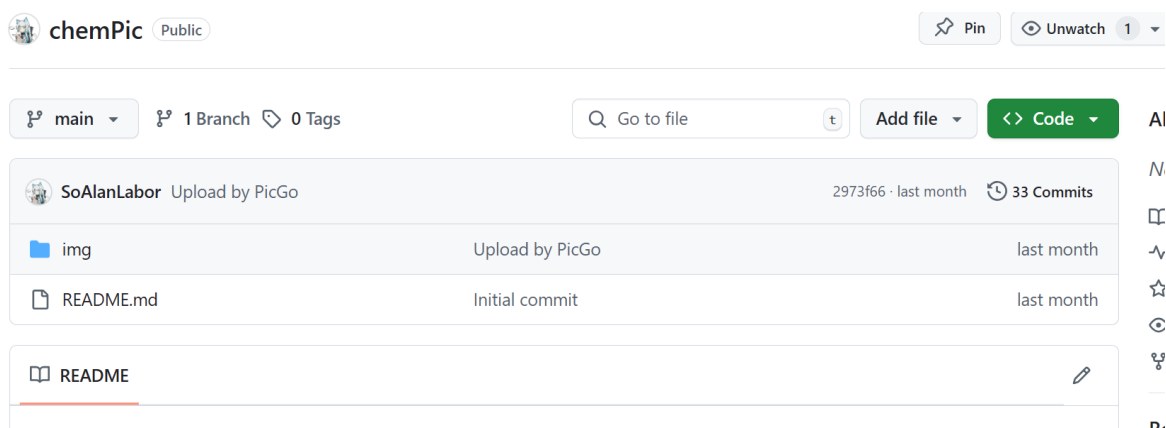


图 15 Github 图床

程宇航

气-液平衡相图类型?

NKChem

✓ 已完成

气-液平衡相图分为理想液体混合物和非理想液体混合物两种情况，具体类型如下：

理想液体混合物（封闭体系）

- $p-x$ 图 (T 恒定下压力 - 组成图，或称为 $p-x-y$ 图)：设组分 A 、 B 组成理想溶液，纯 A 、 B 的饱和蒸气压分别为 p_A^* 、 p_B^* ，且 $p_A^* > p_B^*$ 。其液相线方程为 $p = p_B^* + (p_A^* - p_B^*) \times x_A$ (即 $p-x_A$ 线)；气相线方程为 $p = \frac{p_A^* \times p_B^*}{y_A \times (p_B^* - p_A^*) + p_A^*}$ (即 $p-y_A$ 线)。由 $p_A^* > p_B^*$ 可知 $y_A > x_A$ ，蒸汽压高的组分在气相中含量高，这是蒸馏的基本原理。

非理想液体混合物

- 一般正偏差：相图特征可参考[图片链接](#)。
- 一般负偏差：相图特征可参考[图片链接](#)。
- 最大正偏差：在 $T-x$ 图中，有 E 点为最低恒（共）沸点， x_E 为最低恒（共）沸混合物， T_E 为最低恒（共）沸温度。相图特征可参考[图片链接](#)。
- 最大负偏差：在 $T-x$ 图中，有 E 点为最高恒（共）沸点， x_E 为最高恒（共）沸混合物， T_E 为最高恒（共）沸温度。相图特征可参考[图片链接](#)。

此外，部分互溶双液系的气 - 液平衡相图特征为压力降低时，最低恒沸点下降，且互溶液 - 液相图与部分互溶液 - 液相图相交，可参考[图片演示](#)。

33.091s | 16959 Tokens

图 16 图文结合输出效果

总结

大学化学以高等数学为基础，融合大学物理甚至生命科学基础，学课交叉性强、基础知识抽象。对此，我开发了 NKChem 智能体，旨在为大学化学系本科生解决化学学习中的难题，NKChem 也为化学专业研究生基础知识查阅与物质信息搜索提供了帮助。我们通过人工整合南开大学化学系列教学资料与习题解析，搜集前沿文献，将这些内容放入 NKChem 的知识库中，使 NKChem 可以利用知识库以及自身大语言模型的优势为广大学生及科研人员提供服务。

尽管如此，NKChem 也存在诸多问题，例如对特定情境问题的回答准确率不足，知识库储量有限，图片链接部分失效等。后续我们也将针对如上问题，通过加入更多文献、教辅资料，简化知识库，设计更多工作流等手段，做到智能体在专业领域的真正落地应用，此工作为智能体在化学领域的应用提供了一种范式参考，也展示了智能体在专业领域垂直应用的巨大潜力。

参考文献

- [1] Gudivada V., Patil R., A Review of Current Trends, Techniques, and Challenges in Large Language Models(LLM)[J]. *Appl. Sci.-Basel*, 2024, 14(5): 2074.
- [2] Ramos M. C., Collison C. J., White A. D., A Review of Large Language Models and Autonomous Agents in Chemistry[J]. *arXiv preprint arXiv: 2407.01603*.
- [3] Scialom T., Schick T, Dwivedi-Yu J., et al., Toolformer: Language Models Can Teach Themselves to Use Tools[J]. *arXiv preprint*, arXiv: 2302.04761.
- [4] Liu A, Feng B, Xue B, et al., DeepSeek-V3 Technical Report[J]. *arXiv preprint*, arXiv: 2412.19437.
- [5] Gomes G., Boiko D. A., MacKnight R., Emergent Autonomous Scientific Research Capabilities of Large Language Models[J]. *arXiv preprint*, arXiv: 2304.05332.
- [6] Wang M, Yang L, Tian Y, et al., MmaDA: Multimodal Large Diffusion Language Models[J]. *arXiv preprint*, arXiv: 2505.15809.
- [7] Schwaller P., Bran M. A., Cox S., et al., ChemCrow: Augmenting Large-Language Models with Chemistry Tools[J]. *arXiv preprint*, arXiv: 2304.05376.
- [8] Gomes G., Boiko D. A., MacKnight R., et al., Autonomous Chemical Research with Large Language Models[J]. *Nature*, 2023, 624: 570-578.