

生成式人工智能在酸碱中和滴定图像模拟中的应用

秦磊^{1,†,*}, 郭凯^{2,†}

¹天津市教育科学研究院, 天津 300191

²天津市第四十五中学, 天津 300193

摘要: 本研究深入探讨了生成式人工智能技术在酸碱中和滴定图像模拟领域的创新应用。通过实践, 我们使用生成式人工智能技术编写了酸碱中和滴定动态图像的代码, 并据此建立了一个“实验图像代码生成+调优”的范式。该范式紧密结合教育场景与教学的实际需求, 旨在为化学教育工作者在实验教学中提供创新的技术支持, 同时为学生在化学学习过程中构建智能、交互式的学习场景。

关键词: 人工智能; 化学实验; 代码编写; 动态图像

中图分类号: G64; O6

Application of Generative Artificial Intelligence in the Simulation of Acid-Base Titration Images

Lei Qin^{1,†,*}, Kai Guo^{2,†}

¹ Tianjin Academy of Educational Sciences, Tianjin 300191, China.

² Tianjin No. 45 High School, Tianjin 300193, China.

Abstract: This study explores the innovative application of generative artificial intelligence (AI) in the simulation of acid-base titration images. Through hands-on experimentation, we employed generative AI techniques to develop code for dynamic acid-base titration images, establishing a “code generation and optimization for experimental images” paradigm. This approach is tightly aligned with the practical needs of educational settings, aiming to offer cutting-edge technological support for chemistry educators in experimental teaching. It also aims to create intelligent, interactive learning environments to enhance students' understanding of chemistry.

Key Words: Artificial intelligence; Chemical experiment; Code development; Dynamic image

以ChatGPT (Chat Generation Pre-trained Transformer, 聊天生成预训练转换器)为代表的生成式人工智能(Generative Artificial Intelligence, GAI)是人工智能1.0时代进入2.0时代的重要标志。尽管截至目前为止, ChatGPT尚未具备与人类教师相当的创造力和原创性, 也无法替代教师在培养学生的创造力、批判性思维、问题解决能力、同理心及人际交往等方面的重要作用, 但GAI在教育领域的应用得到了广泛的关注^[1], 推动教师成为数据分析和智能教学工具的研究者, 使得人工智能更好地辅助教学^[2,3]。教育领域的大模型如雨后春笋般出现, 这些模型不仅能够帮助教师实现课件创作、教案编

收稿: 2024-08-28; 录用: 2024-11-04; 网络发表: 2025-01-23

†共同第一作者, 对本文工作同等贡献

*通讯作者, Email: chemqinlei2023@163.com

基金资助: 天津市教育科学研究院青年课题(TJKY2024-QN-19); 天津市教育学会科研课题(KT-301-2024-YB-0001)

辑、程序编码、智能出题和智能助教的功能，还能协助学生发展阅读、写作、数学、科学和语言等技能^[1,4]。

已有研究者将这一技术成功应用于化学实验教学中，使得传统的以归纳为主的实验教学推进到了运用机器学习等数据挖掘技术从大量数据中探索未知的范式。化学信息学这一课程便是在此背景下应运而生^[5]。杜静等人设计了人工智能与化学实验结合的课程^[6]。此外，人工智能技术也被融入了仪器分析课程，以应对更微量、更精准的分析挑战^[7]。Kim等人通过GAI在数据预处理方面的作用，发现了相对分子质量与沸点的相关性最高^[8]。在GAI时代，教师的角色正在发生变化，从传统的知识传递者转变为引导者、创新者和人机协同者。通过这些转变，教师可以在新的教育生态中发挥更大的作用，推动教育的高质量发展。

本研究使用GAI的编程功能，编写了用于酸碱中和滴定动态图像模拟的程序，以此助力化学实验教学。这既是顺应智能时代教育改革、促进教师专业发展的一个途径，又是人工智能时代学生需要具有的一种媒介素养，更是助力学生在基础知识的学习、基本规律的认知、思维能力的发展等方面进行提升。

1 生成式人工智能模拟化学实验图像

人工智能编写实验图像代码的思路，主要基于预训练大模型(简称“大模型”或foundation models)的基本原理，这一过程包括两个阶段：预训练(Pre-training)和下游任务适配(Fine-tuning)。预训练是大模型学习的基础，让模型获得广泛的知识 and 能力，而下游任务适配则将这些能力应用到具体任务中，使模型能够在实际应用中表现优异。在现有的多种GAI大模型中，本研究使用GAI大模型DeepSeek，深入探讨了对酸碱中和滴定动态图像模拟的代码编写和创新应用。

1.1 探讨酸碱中和滴定图像模拟的指令

指令(也叫做提示词)是关于用词、短语或代码片段选择的技巧，其目的在于训练人工智能系统给出所需的回应。以化学实验教学中相对重要的酸碱中和滴定图像模拟为例，通过探讨“投喂”的指令，训练人工智能大模型编写出一个可以模拟酸碱中和滴定动态图像的代码，进而再探索利用GAI大模型生成“化学实验动态图像程序模型”。

根据软件工程中“最小工作示例”的原则，将“投喂”GAI编写实验动态图像模拟代码的指令拆分为“中枢指令”“参数初始化”“必要细节补充”和“呈现形式”这四个关键的工作指令要素(图1)。以一定浓度的硫酸滴定不同浓度的氢氧化钠溶液为具体实例，这四个工作指令要素的具体指令表达如图1详细说明。在实践研究中，总结了四个指令规则，以确保获得相对最佳的回应结果。一是要确保指令指向明确，首先要明确“中枢指令”的提示词是“编程”。二是要确保指令具体明确，例如在“参数初始化”阶段，应“投喂”如“用 $0.1 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ 的硫酸分别滴定 $50 \text{ mL } 0.05 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ 、 $0.1 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ 、 $0.2 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ 浓度的氢氧化钠溶液”这样详细的指令，而非笼统的“用硫酸滴定氢氧化钠溶液”。三是要将复杂问题拆分为较简单的部分，这体现在“必要细节补充”和“呈现形式”两个要素上，以避免在单个提示词中融入过多内容，导致GAI忽略某些关键点。四是要与GAI深入且反复的交流，通过让机器不断学习，以达到准确回应(图2)。

图2详细展示在Python的下属编辑环境Matplotlib(一个可视化库)中，利用DeepSeek编写并验证代码以生成动态图像的过程。通过与GAI的深入反复交流，最终成功编写了能够模拟酸碱中和滴定实验动态图像的代码(见补充材料附录1)。在Matplotlib中运行附录1的代码，即可呈现出用 $0.1 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ 的硫酸分别滴定 $50 \text{ mL } 0.05 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ 、 $0.1 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ 、 $0.2 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ 浓度的氢氧化钠溶液的实验动态图像(图3)。

按照图1所示的以酸碱中和滴定为例的指令“投喂”流程，在其他GAI大模型中进行对比实践，DeepSeek在执行复杂的化学实验图像模拟任务方面具有显著优势。DeepSeek通过先进的算法能自动生成化学实验动态图像代码，省去了人工输入参数和调节的繁琐步骤，降低了因人为操作引入误差

的可能。当然，多种GAI大模型在化学实验教学领域的研究应用仍有待于进一步探索和实践，发展各自优势。

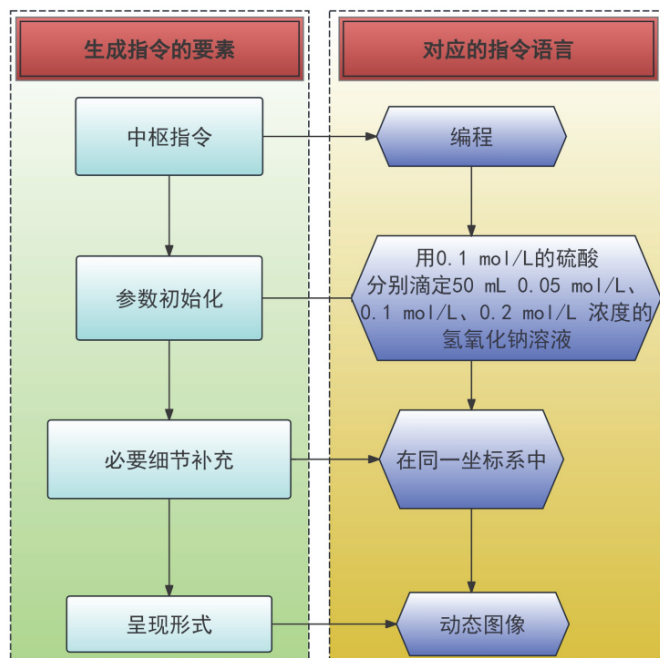


图1 以酸碱中和滴定为例的指令“投喂”流程

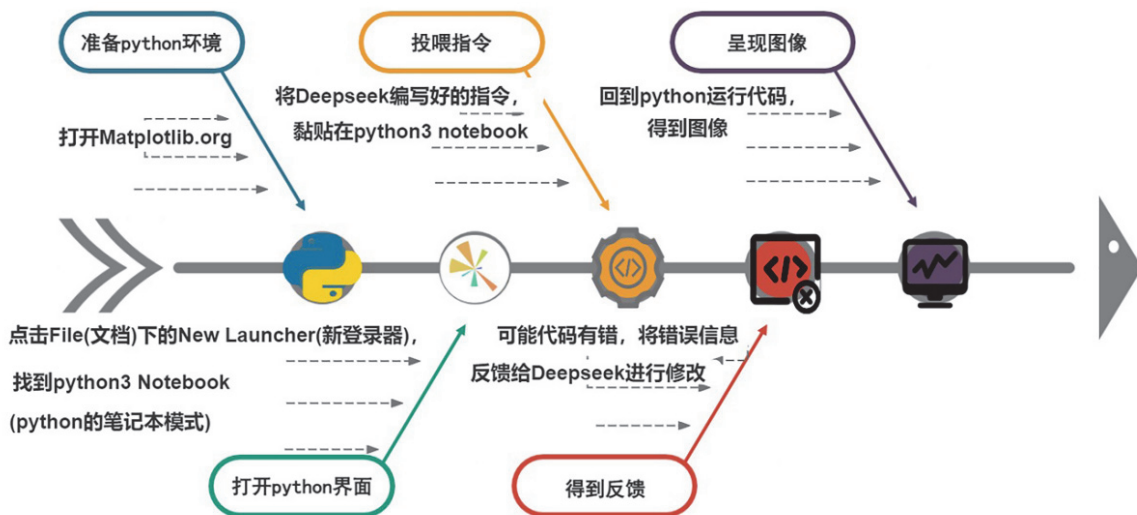


图2 与GAI深度交流的流程

1.2 分析实验图像代码的编写逻辑

接下来，阐述GAI如何模拟酸碱中和滴定化学实验结果的全过程，展示了从数据准备到模型优化的每个步骤的科学性和必要性^[9,10]。在训练阶段，人工智能通过酸碱中和滴定相关实验数据的收集和预处理，抽取数据内部隐含的知识结构和规律，获得酸碱中和滴定原理的语言理解能力(图4)。在这一实验中， $0.1 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ 硫酸滴定不同浓度的氢氧化钠溶液会对应不同的滴定曲线。GAI模拟的动态图像可以同时呈现这种滴定过程中pH值的变化。

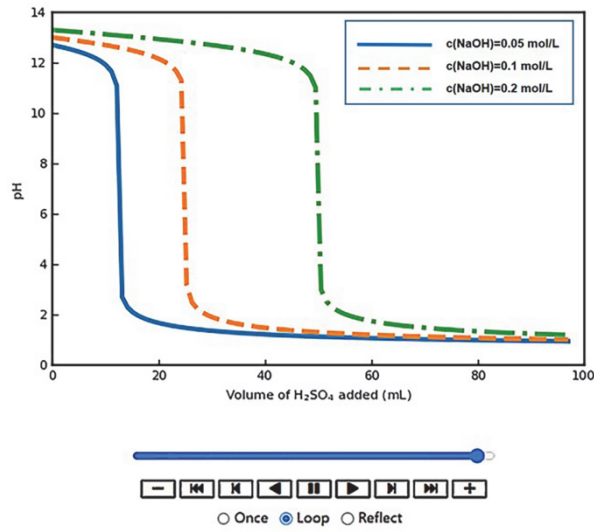


图3 0.1 mol·L⁻¹ H₂SO₄(aq)分别滴定50 mL 0.05 mol·L⁻¹、0.1 mol·L⁻¹、0.2 mol·L⁻¹ NaOH(aq)的动态图像截图

通过点击蓝色进度条下的几个操纵键，可以操作滴定的进程

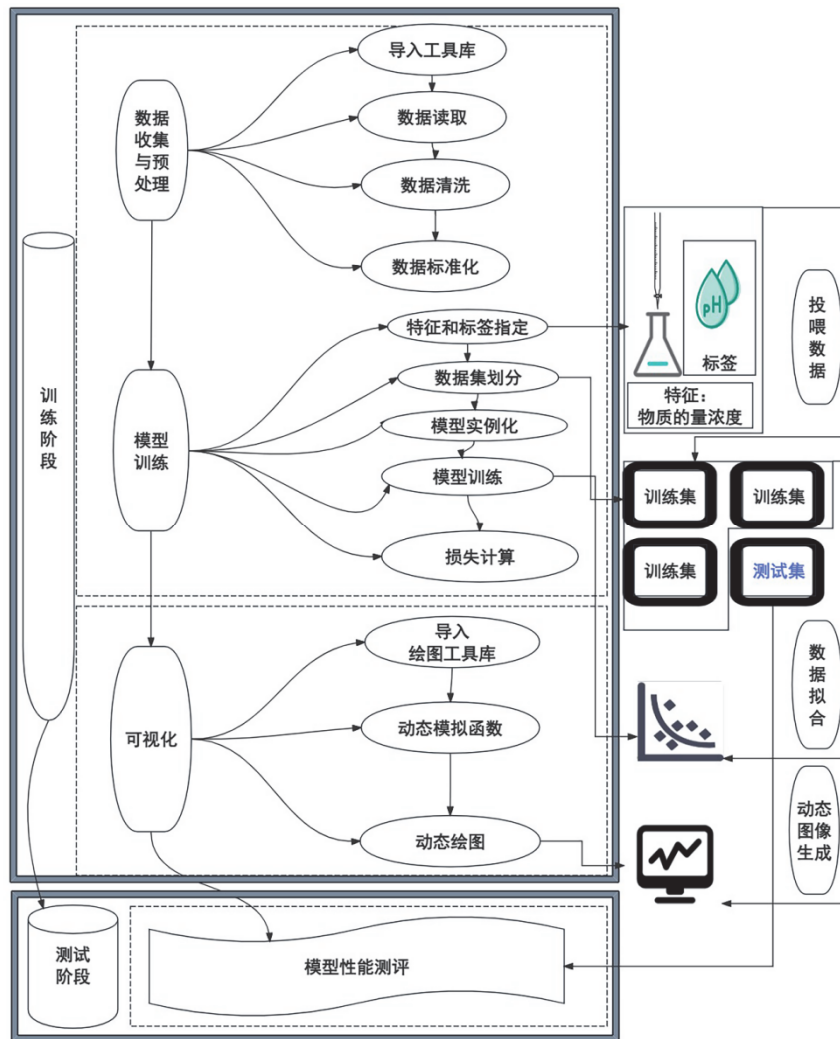


图4 人工智能编写实验图像代码的逻辑

第一步的“数据收集与预处理”环节对于GAI编写实验图像代码的成功建立至关重要。在实验中，我们精确记录了酸与碱的体积和浓度数据，对不同浓度的NaOH和H₂SO₄溶液的数据进行读取、清洗和标准化处理，保证预训练的有效性和准确性，为人工智能深度学习的训练打下了坚实的基础。第二步是“模型训练”，这一部分对应实验中滴定曲线的形成。首先，明确物质的量浓度为特征变量，以pH为标签。之后，形成了以训练集为主，测试集为辅的两类数据集。训练集的数据通过线性拟合，得到最佳公式，然后又通过均方误差(MSE)计算工具，尝试弥补训练集的损失。之后，过渡到“可视化”阶段，这是动态图像生成的关键。首先，将代码导入绘图工具库Matplotlib，然后进行动态模拟函数的处理，实验中pH值随滴定剂体积变化实时呈现，并通过动画效果直观展现出滴定的全过程。人工智能编写的动态实验图像模拟代码及其对应的技术解释见表1。

训练阶段后，人工智能学习到丰富的语境信息，形成对输入数据的深层理解，具备了一定的编写实验图像精准模拟代码的能力。在测试阶段，“模型性能测评”是验证实验图像程序泛化能力和稳定性的重要阶段。我们将来自Matplotlib运行代码后的错误提示，反馈给GAI，继续进行调修，完善了测试集。上述研究过程形成了一个“实验图像代码生成+调优”的范式。

2 化学实验动态图像模拟的实践思考

酸碱中和滴定的教学在实践中面临着挑战，要求学生有实验原理分析能力和图像数据处理能力。学生对图像中突变范围、理论终点和实验终点(指示剂变色点)的认知理解情况直接决定了其对酸碱中和滴定原理的理解。通过“实验图像代码生成+调优”的范式绘制的同一浓度硫酸滴定不同浓度的氢氧化钠的动态对比图(图3)，这是传统实验操作所不能短时间完成的。溶液中弱电解质分布系数图是酸碱中和滴定实验衍生出的一类比较复杂的化学实验图像。由于微观粒子相对含量是无法通过实验操作直接观察到的，学生往往难以厘清每种微粒的变化趋势。我们借助上述开发的“化学实验动态图像程序模型”，成功绘制了磷酸分布系数的动态曲线图(图5)。磷酸分布系数曲线的动态图直观体现了在磷酸溶液中随着氢氧化钠不断加入，体系中各种微观粒子相对含量的变化过程，帮助学生突破认知障碍。

上述两个酸碱中和滴定图像的动态模拟实例可作为教学素材，对引导学生形成认识水溶液中离子反应与平衡的基本思路，发展学生的微粒观、平衡观和守恒观具有重要意义。我们还可以将“实验图像代码生成+调优”的范式应用在各式酸碱中和滴定曲线和弱电解质分布系数图像等动态图像模拟中，帮助学生理解电离平衡常数的含义，认识电离平衡的影响因素和溶液的酸碱性。相对于手持技术数字化实验^[1]，GAI模拟酸碱中和滴定动态图像更高效，更便捷，可避免由于区域间经济差异和教师培训成本高等诸多因素的影响，手持技术数字化实验普适推广的困难。

3 人工智能大模型模拟化学实验图像的前景

通过上述在GAI大模型模拟酸碱中和滴定动态图像的代码编写与程序开发的实践研究，GAI大模型利用其深度学习方法来进行复杂和抽象的思考，并根据反馈和建议来不断改进其代码输出，建立了一个“实验图像代码生成+调优”的范式(图6)。该范式通过“投喂”指令和基本数据，可形成实验图像模拟代码的编写。这一范式为GAI大模型生成“化学实验动态图像程序模型”提供了明确的路径，通过化学领域专业数据和先验知识对上游通用大模型进行微调，可应用于不同化学实验图像模拟的场景，从而提升大模型对化学实验图像场景的有效理解。GAI大模型在推动实验预测与理解复杂化学现象方面展现出巨大潜力，“化学实验动态图像程序模型”可应用于各类化学图像的教学中，如沉淀溶解平衡、水解平衡等。

表1 GAI编程的框架与程序语言(以酸碱滴定为例)

步骤	逐级步骤	代码	解释
数据收集与预处理	导入 工具库	<pre>import numpy as np import pandas as pd</pre>	导入数值处理库和数据处理库，用于后续的数据操作
	数据读取	<pre>data = pd.read_csv('titration_data.csv')</pre>	读取CSV文件格式的数据
	数据清洗	<pre>data_cleaned = data.dropna()</pre>	删除包含缺失值的行，确保数据集的完整性
	数据 标准化	<pre>data_normalized = (data_cleaned - data_cleaned.mean())/data_cleaned.std()</pre>	对数据进行标准化处理，使其均值为0，标准差为1，便于模型训练
模型训练	特征和 标签指定	<pre>X = data_normalized.drop ('pH', axis=1) y = data_normalized['pH']</pre>	“X”包含除了“pH”之外的所有特征，“y”是目标变量“pH”
	数据集划分	<pre>from sklearn.model_selection import train_test_split X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.2, random_state=42)</pre>	导入数据集划分工具，用于将数据划分为训练集和测试集，其中训练集和测试集分别占80%和20%，随机种子为42
	模型实例化	<pre>from sklearn.linear_model import LinearRegression model = LinearRegression()</pre>	导入线性回归模型并实例化，用于拟合数据
	模型训练	<pre>model.fit(X_train, y_train)</pre>	使用训练集数据拟合模型，找到最佳的线性回归公式
	损失计算	<pre>from sklearn.metrics import mean_squared_error train_loss = mean_squared_error(y_train, model.predict(X_train)) test_loss = mean_squared_error(y_test, model.predict(X_test))</pre>	导入均方误差(MSE)计算工具，计算训练集和测试集上的损失
可视化	导入绘图 工具库	<pre>import matplotlib.pyplot as plt from matplotlib.animation import FuncAnimation</pre>	导入绘图工具库和动画工具库，用于数据可视化和动态模拟
	动态模拟函数	<pre>def update(frame) plt.clf() pred #NAME? (X_test[:frame]) plt.plot(np.arange(frame), pred, label='Predicted pH') plt.plot(np.arange(frame), y_test[:frame], label='Actual pH') plt.legend()</pre>	定义一个函数update，用于动态绘制预测值和实际值的对比图
	动态绘图	<pre>fig, ax = plt.subplots() ani = FuncAnimation(fig, update, frames=len(X_test), repeat=False) plt.show() plt.rcParams['animation.html'] = 'jshtml' ani</pre>	创建动态可视化图表，展示预测值和实际值的对比，并生成HTML格式的动画

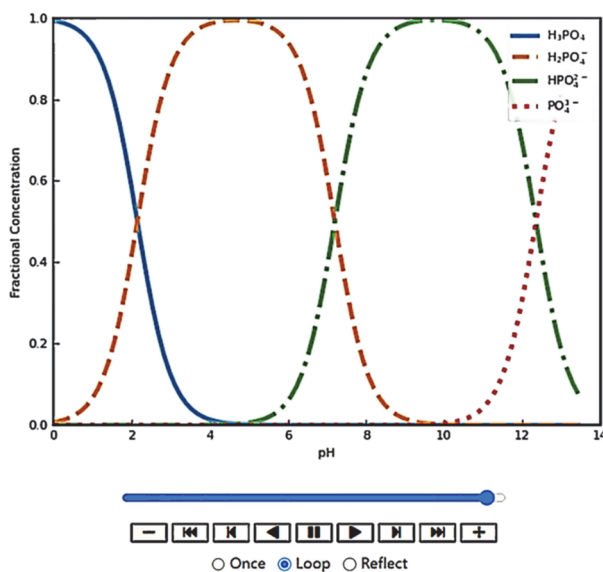


图5 H_3PO_4 分布系数曲线的动态图像截图

通过点击蓝色进度条下的几个操纵键，可以操作滴定的进程

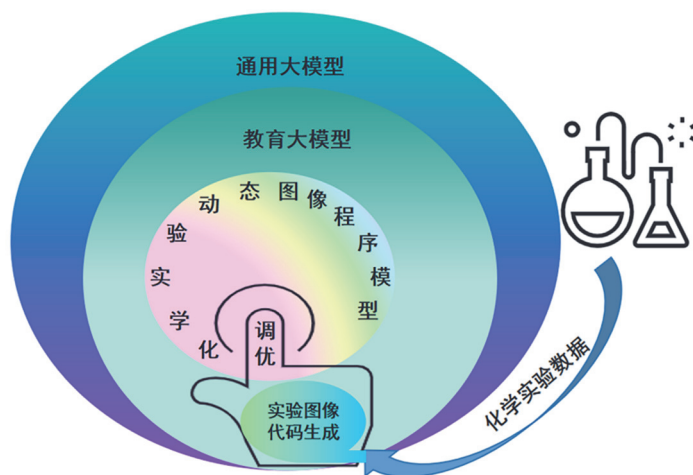


图6 “实验图像代码+调优”的范式

4 结语

“实验图像代码生成+调优”范式的研究表明，GAI作为学习者和教育者的工具，不仅实现了化学实验图像问题的程序化、可视化和动态化，也促进了师生课堂的有效互动。在与人工智能协作共处的智慧教育发展过程中，我们应该认识到，尽管GAI是一个功能强大的模型，能够按照预先编程的算法高效运作，但它并不具备教师所具有的创造力。因此，教师依旧是教学内容的设计者、使用者和监督者，而人工智能扮演信息的处理者和呈现者，助力教师利用智能技术不断创新和调整教学方式，使用智能技术真正惠及教学研究。

致谢：于文昊(香港中文大学计算机科学与工程专业博士在读)在人工智能编写实验图像代码的文本表达从计算机专业角度给予建议。

补充材料：可通过链接<https://www.dxxh.pku.edu.cn>免费下载。

参 考 文 献

- [1] 荀渊. 华东师范大学学报(教育科学版), **2023**, *41* (7), 56.
- [2] 卢宇, 余京蕾, 陈鹏鹤, 余胜泉. 电化教育研究, **2023**, *44* (6), 38.
- [3] 曹培杰, 谢阳斌, 武卉紫, 杨媛媛, 沈苑, 左晓梅, 黄宝忠. 现代教育技术, **2024**, *34* (2), 5.
- [4] 吴砥, 李环, 陈旭. 开放教育研究, **2023**, *29* (2), 19.
- [5] 翟红林, 张晓昀, 曹晶晶. 大学化学, **2024**, *39* (1), 63.
- [6] 杜静, 赵温涛, 冯霞, 马骁飞. 大学化学, **2021**, *36* (1), 2005078.
- [7] 张天龙, 张容玲, 汤宏胜, 李延, 李华. 大学化学, **2024**, *39* (8), 365.
- [8] Kim, S.; Jeon, I.; Kang, S. *J. Chem. Educ.* **2024**, *101*, 1771.
- [9] Goodfellow, I.; Bengio, Y.; Courville, A. *Deep learning*; The MIT Press: New York, NY, USA, 2016; pp. 485–490.
- [10] Lecun, Y.; Bengio, Y.; Hinton, G. *Nature* **2015**, *521*, 436.
- [11] 朱成东. 化学教育(中英文), **2023**, *44* (19), 41.