

化学信息学课程教学改革探索

纪长城

顺德职业技术学院 广东 佛山 230011

[摘要]随着数据科学的蓬勃兴起，数据分析已成为科研和工业生产中不可或缺的重要手段。化学信息学作为化学与信息技术相结合的交叉学科，其重要性日益受到关注。化学信息学不仅涉及化学数据的收集、处理和分析，还涵盖了化学知识的挖掘和应用，为化学研究提供了全新的视角和方法。然而，在大数据时代背景下，传统的化学信息学课程教学内容、方法及考核方式已难以满足当前社会对人才培养的需求。因此，对化学信息学课程进行教学改革，构建适应大数据时代需求的化学信息学课程教学体系，已成为当前化学教育亟待解决的问题。

[关键词]化学信息学；大数据时代；教学改革；创新能力；综合素质

[中图分类号] G642 **[文献标识码]** A **[文章编号]** 1687-9534(2025)-0045-35 **[收稿日期]** 2025-03-21

一、化学信息学课程内容改革

（一）传统课程内容分析

传统化学信息学课程内容主要侧重于介绍化学信息学的基本理论和方法，包括化学数据的来源和存储、化学信息的提取和处理、化学模型的构建和应用等方面。然而，在大数据时代背景下，这些传统内容已难以满足当前社会对人才培养的需求。一方面，传统课程内容过于理论化，缺乏与实际应用的紧密结合，导致学生难以将所学知识应用于实际问题的解决中；另一方面，传统课程内容未能及时跟上大数据技术的发展步伐，缺乏对新技术的介绍和应用，导致学生难以掌握最新的化学信息学技术。

（二）课程内容改革方向

针对传统化学信息学课程内容存在的问题，我们进行了以下改革方向：

1. 引入大数据技术和方法：将大数据技术和方法引入化学信息学课程中，包括数据挖掘、机器学习、数据可视化等，使学生掌握最新的化学信息学技术。

2. 加强实践环节：增加实践环节，通过案例分析、实验操作等方式，使学生能够将所学知识应用于实际问题的解决中，提高实践能力和创新能力。

3. 拓展应用领域：拓展化学信息学的应用领域，包括药物研发、材料科学、环境监测等方面，使学生了解化学信息学的广泛应用前景。

（三）改革后的课程内容

改革后的某大学化学信息学课程内容包括以下三个部分：

1. 化学信息学基本理论和概念：介绍化学信息学的基本概念、发展历程、应用领域

及重要性等,使学生了解化学信息学的基本框架和知识体系。

2. 化学数据处理和分析方法:介绍化学数据的来源、存储、预处理、特征选择、模型建立、预测分析等方面的知识和技术,包括线性回归、主成分分析、偏最小二乘法等常用的化学信息学模型,以及线性判别分析、支持向量回归(SVM)和朴素贝叶斯等机器学习和数据挖掘算法。

3. 化学信息学应用实践:结合实际应用案例,介绍化学信息学在药物研发、材料科学、环境监测等领域的应用,包括数据的收集与处理、模型的构建与应用、结果的解释与分析等方面。同时,通过实验操作、案例分析等方式,加强学生的实践能力和创新能力培养。

二、化学信息学课程教学方法改革

(一) 传统教学方法分析

传统化学信息学教学方法主要采用“灌输式”教学,教师将教学内容详细讲解后,让学生自行查阅资料或自学。这种教学方法虽然能够传授知识,但存在以下问题:一方面,学生被动接受知识,缺乏主动性和创造性;另一方面,理论与实践脱节,导致学生难以将所学知识应用于实际问题的解决中。

(二) 教学方法改革方向

针对传统化学信息学教学方法存在的问题,我们进行了以下改革方向:

1. 以问题为导向:以实际问题为导向,引导学生主动思考和解决问题,激发学生的学习兴趣 and 求知欲。

2. 以学生为中心:以学生为中心,注重学生的主体性和个性发展,关注学生的需求和兴趣点,提供个性化的教学服务。

3. 多种教学方法相结合:采用多种教学方法相结合,包括案例教学、翻转课堂、讨论式教学等,提高教学效果和学习效率。

(三) 改革后的教学方法

改革后的某大学化学信息学课程教学方法主要包括以下几个方面:

1. 案例教学法:结合学生在大学期间参加过的科研项目 and 实际化学问题,采用案例教学法讲解相关理论知识,并结合实际问题进行讨论。通过案例的讲解和分析,引导学生从实际问题出发,在解决实际问题的过程中掌握相关理论知识。

2. 翻转课堂法:通过教师在课堂上讲解理论知识以及案例分析过程,引导学生由被动学习转变为主动学习。学生在课前通过预习和观看视频等方式了解相关知识,课堂上则进行互动讨论 and 实践操作,提高学习效率。

3. 讨论式教学:采用线上线下相结合的教学模式,鼓励学生积极参与讨论,并对讨论内容进行归纳总结。通过讨论式教学,培养学生的批判性思维和团队协作能力。

三、化学信息学课程考核方式改革

(一) 传统考核方式分析

传统化学信息学考核方式主要采用单一的考试形式,以考试成绩作为评价学生学习效果的主要依据。这种考核方式存在以下问题:一方面,考试成绩受主观因素影响较

大，难以全面反映学生的学习效果；另一方面，单一的考核方式缺乏对学生实践能力和创新能力的评价。

（二）考核方式改革方向

针对传统化学信息学考核方式存在的问题，我们进行了以下改革方向：

1. 多元化评价：采用多元化的评价方式，包括平时成绩、实验报告、课程论文、期末考试等，全面反映学生的学习效果。

2. 注重实践能力评价：注重对学生实践能力和创新能力的评价，通过实验报告、课程论文、实践操作等方式，考察学生的实践能力和创新能力。

3. 强化过程评价：强化过程评价，关注学生的学习过程和成长历程，通过课堂参与度、作业完成情况等方式，评价学生的学习态度和努力程度。

（三）改革后的考核方式

改革后的某大学化学信息学课程考核方式主要包括以下几个方面：

1. 平时成绩：根据教学计划对学生课堂出勤情况、课堂练习及作业情况进行记录和评价，占总成绩的 30%。

2. 实验报告：根据实验报告的格式、内容及完成情况进行评价，考察学生的实践能力和创新能力，占总成绩的 20%。

3. 课程论文：要求学生撰写与课程内容相关的论文，通过论文的开题答辩、中期检查和最终答辩等环节进行评价，考察学生的科研素养和创新能力，占总成绩的 30%。

4. 期末考试：根据学生在课程中所学内

容及应用知识解决复杂问题的能力来进行考试内容及权重设置，包括理论考试和实践操作两部分，占总成绩的 20%。

四、化学信息学课程教学改革效果分析

（一）学生综合素质提升

通过化学信息学课程的教学改革，学生的综合素质得到了显著提升。一方面，学生的理论素养和实践能力得到了提高，能够更好地掌握和应用化学信息学技术解决实际问题；另一方面，学生的创新能力和团队协作能力得到了培养，能够积极参与科研项目和实践活动，提出创新性的解决方案。

（二）教学质量提高

化学信息学课程的教学改革也促进了教学质量的提高。一方面，教师的教学方法更加灵活多样，能够更好地激发学生的学习兴趣 and 求知欲；另一方面，教师的教学内容更加丰富实用，能够更好地满足学生的需求和兴趣点。同时，教学改革的实施也促进了教师之间的交流和合作，提高了教师的教学水平和专业素养。

（三）社会认可度提升

随着化学信息学课程教学改革的不不断深入，社会对某大学化学信息学课程的认可度也得到了提升。一方面，越来越多的企业和科研机构开始关注某大学化学信息学专业的毕业生，并给予高度评价；另一方面，某大学化学信息学专业的学生在各类竞赛和科研项目中也取得了优异的成绩，进一步提升了专业的社会声誉。

五、结论

本文通过对某大学化学信息学课程的教学改革进行深入探索和实践,构建了适应大数据时代需求的化学信息学课程教学体系。改革后的课程内容更加丰富实用,教学方法更加灵活多样,考核方式更加全面客观,有效提升了学生的综合素质和教学质量。然而,随着大数据技术的不断发展和化学信息学领域的不断拓展,化学信息学课程的教学改革仍需不断深化和完善。

参考文献:

- [1]陈泓,曹庆文,李梦龙.化学信息学发展现状[J].化学研究与应用.2004,(4).
- [2]邵学广,蔡文生.化学信息学及其课程建设[J].大学化学.2002,(3).
- [3]李梦龙,刘志刚,刘冀昆.信息化学研究进展[J].化学研究与应用.2002,(1).
- [4]徐筱杰.化学信息学的涵义及教育[J].大学化学.2002,(1).

Exploration of Teaching Reform in Chemical Informatics Course

Ji Changcheng

Shunde Vocational and Technical College, Foshan, Guangdong 230011

Abstract: With the flourishing of data science, data analysis has become an indispensable and important means in scientific research and industrial production. As an interdisciplinary field that combines chemistry and information technology, the importance of chemical informatics is increasingly being recognized. Chemical informatics not only involves the collection, processing, and analysis of chemical data, but also encompasses the mining and application of chemical knowledge, providing new perspectives and methods for chemical research. However, in the context of the big data era, the traditional teaching content, methods, and assessment methods of chemical informatics courses are no longer able to meet the current demand for talent cultivation in society. Therefore, reforming the teaching of chemical informatics courses and constructing a teaching system that adapts to the needs of the big data era has become an urgent problem to be solved in current chemistry education.

Keywords: Chemical Informatics; The era of big data; reform in education; innovation ability; comprehensive quality