

基于物理与机器学习相结合的《软物质与分子模拟》 课程思政的实践探索

冯梅, 王艳, 孙婷婷, 徐碧军
浙江科技大学理学院应用物理系, 浙江 杭州 310023

DOI: 10.61369/VDE.2025110022

摘要 : 在人工智能快速发展的时代背景下, 高校教育正面临理念重塑与路径创新的双重挑战。“立德树人”始终是高等教育的根本任务, 而课程思政是实现这一目标的关键路径。《软物质与分子模拟》是一门面向研究生开设、融合物理、化学与生命科学的交叉前沿课程, 承担着理论深化与能力培养的双重使命。本文围绕分子动力学模拟、自由能微扰计算 (FEP) 与机器学习等核心内容, 探索其在蛋白质相互作用研究、突变分析与药物分子设计等教学场景中的实践价值, 特别强调人工智能在蛋白理性设计与亲和力优化中的赋能作用。通过构建以技术前沿引领内容更新、以科研案例驱动实践教学的课程体系, 并系统融入科学精神、方法论训练与价值观引导, 实现专业教育与思想政治教育的有机融合。本研究展示了“科研导入 + AI赋能 + 思政润育”的多维融合式教学改革路径, 为新时代研究生课程思政建设提供了可借鉴的实践范式。

关键词 : 分子动力学模拟; 自由能微扰计算; 机器学习; 课程思政

Practical Exploration of Curriculum Ideological and Political Education in "Soft Matter and Molecular Simulation" via Integration of Physics and Machine Learning

Feng Mei, Wang Yan, Sun Tingting, Xu Bijun

Department of Applied Physics, School of Sciences, Zhejiang University of Science and Technology, Hangzhou, Zhejiang 310023

Abstract : In the era of rapid development of artificial intelligence, higher education is facing the dual challenges of conceptual reconstruction and path innovation. "Fostering virtue through education" has always been the fundamental task of higher education, and curriculum ideological and political education is the key path to achieve this goal. "Soft Matter and Molecular Simulation" is an interdisciplinary frontier course for graduate students, integrating physics, chemistry and life sciences, with the dual mission of deepening theories and cultivating abilities. Focusing on core contents like molecular dynamics simulation, free energy perturbation (FEP) calculation and machine learning, this paper explores their practical value in teaching scenarios such as protein interaction research, mutation analysis and drug molecular design, with special emphasis on the enabling role of artificial intelligence in rational protein design and affinity optimization. By building a curriculum system where cutting-edge technologies drive content updates and scientific research cases fuel practical teaching, and systematically integrating scientific spirit, methodological training and value guidance, the organic integration of professional education and ideological and political education is realized. This study presents a multi-dimensional integrated teaching reform path of "scientific research introduction + AI empowerment + ideological and political nurturing", providing a referential practical paradigm for the construction of curriculum ideological and political education for graduate students in the new era.

Keywords : molecular dynamics simulation; free energy perturbation calculation; machine learning; curriculum ideological and political education

引言

在人工智能加速变革教育教学方式的时代背景下，高校亟需探索理念更新与路径创新的深度融合之道。习近平总书记强调，要坚持把立德树人作为中心环节，把思想政治工作贯穿教育教学全过程。这为课程思政提出了明确方向。课程思政作为落实这一理念的重要途径，正在成为高校教育教学改革的关键抓手。作为自然科学核心的物理学，不仅是认识世界的工具，更承载着科学精神与方法论。如何将这些深层价值融入教学，培养学生正确的价值观与科研品质，是物理类研究生课程思政的重要命题^[1]。《软物质与分子模拟》是一门面向物理类研究生的交叉前沿课程，涵盖了统计物理基础、分子动力学模拟、自由能计算方法，以及聚焦蛋白质-蛋白质、蛋白质-配体、TCR-pHLA复合物等典型生物体系的高阶模拟案例，致力于培养学生在分子尺度上建模、计算、分析复杂生命系统的能力^[2]。

近年来，大规模仿真模拟与自由能计算方法成为推动生物分子从结构认识走向功能理解的关键手段。分子动力学（MD）模拟能够在原子水平研究生物分子的相互作用机制，揭示实验手段难以捕捉的动力学过程。2013年诺贝尔化学奖的授予标志着生物研究从定性观察走向定量分析的历史转折^[3]。与之配套的自由能评估方法，自由能微扰（FEP）为研究蛋白突变结合亲和力变化提供了严谨可复现的理论工具，凭借其物理基础扎实和预测精度高的特点，在抗体工程、药物设计和免疫识别等研究中发挥了日益突出的作用，已成为推动分子生命科学迈向量化的核心技术之一。

在此基础上，人工智能技术的快速发展进一步推动了分子模拟与计算生物学的融合。2024年诺贝尔物理学奖与化学奖分别授予神经网络与计算蛋白质设计领域的重大突破，以及AlphaFold3等模型的兴起，推动“数据驱动+理论模拟”成为生物分子研究的新范式。这些进展为《软物质与分子模拟》课程的内容改革提供了丰富素材和强大动能，使课程能够引入AI辅助蛋白设计、基于机器学习的自由能估算、突变预测等前沿模块，进一步提升其实用性与时代性^[4]。

《软物质与分子模拟》课程正是立足物理学科基础与交叉前沿内容的结合点，从“分子模拟计算-自由能评估-人工智能预测-蛋白质设计应用”逐步搭建教学框架。课程还特别强调课程思政的重要性。新时代高等教育强调“立德树人”，课程思政已成为高校教学改革的关键内容，引导学生形成正确的价值观、世界观与科学观，不仅是课程教学内容的拓展，更是育人理念的再升级。作为一门涉及统计物理、热力学原理与复杂系统行为的课程，《软物质与分子模拟》具备开展价值引导与科学精神培育的内在潜力。因此，本文立足于《软物质与分子模拟》课程教学改革实际，将思政元素与物理学训练相结合，构建知识传授与价值引领并重的“深度+广度”双向课堂，引导学生实现“知识-能力-思政”统一，为新时代高校人才培养提供思政与科技融合的实践路径^[5]。

一、课程教学现状分析

（一）教学内容与产业发展脱节

目前课程内容中经典理论占比较高，尚未充分对接人工智能辅助药物设计、生物分子模拟等新兴热点，难以满足学生了解产业前沿的需求。随着生物医药和先进材料技术的快速发展，分子模拟已成为研究软物质结构与动力学行为的核心工具。尤其在药物研发中，计算机辅助药物设计方法——如分子动力学模拟和自由能计算——已成为解析药物与靶点相互作用机制的关键手段。因此，更新课程内容体系、增强与前沿应用的融合，势在必行^[6]。

（二）实践教学环节薄弱

尽管课程涵盖了部分建模与模拟流程，但实践教学仍缺乏系统性与完整性，难以有效支撑学生科研能力的培养。目前国内虽有部分课程尝试将分子模拟引入本科与研究生教学，但普遍存在理论偏重、实践薄弱、前沿案例缺乏等问题。以浙江科技大学《软物质与分子模拟》课程为例，仍需加强实践训练模块建设，推动理论教学与科研实操的深度融合，并结合课程思政理念，实现“知识-能力-价值”的一体化育人目标^[7]。

（三）思政元素融合不足

当前课程中尚未充分挖掘蕴含的科学精神、学术伦理和价值引导内容，课程思政的系统性设计与实施路径尚不完善。物理学与机

器学习本身具有严谨的科学逻辑与深刻的思维方法，是开展科学精神与科研规范教育的理想载体。然而，在实际教学中，这一潜力往往被忽视，缺乏与专业内容融合的育人设计，导致价值引领功能难以有效落地。在“课程思政”深化推进的背景下，亟需建立系统的思政元素融入机制，将知识传授与人格培养紧密结合^[8]。

二、教学改革设计

为顺应学科交叉融合与技术前沿发展的趋势，提升研究生课程的系统性、实践性与育人功能，本课程从教学内容结构、教学方法手段等方面进行系统改革，探索科研导向与任务驱动融合的教学路径。

构建“基础-工具-应用”三层次教学结构。结合软物质物理与分子模拟的知识体系和研究范式，将课程内容划分为六大核心模块，逐层递进、系统展开：软物质概念与统计物理基础；分子动力学模拟的基本理论与算法；蛋白质结构与功能基础；分子建模实践与模拟结果分析；自由能微扰（FEP）方法的原理与实操；分子模拟在蛋白工程与药物设计中的应用，及其与机器学习的融合方法^[9]。课程强调理论与实践并重，通过“概念讲授+案例解析+软件操作”的教学策略，帮助学生构建从物理建模、计算模拟到科研问题解决的知识链条，全面提升其科研素养与应用

能力。

教学方法改革：科研导向与任务驱动相结合。为增强课程的实战性与研究导向，教学中引入“科研引领、任务驱动”的方法改革：

引入真实科研案例：依托教师团队的最新研究成果，如蛋白-蛋白突变结合自由能分析、TCR-新抗原-HLA复合物识别模拟等，讲解 FEP 计算的基本流程、关键技术与易错环节，增强学生对真实科研问题的理解与参与感^[10]。

设计模块化实训任务：构建完整的计算流程教学单元，例如利用 GROMACS/NAMD 平台完成一个蛋白-配体体系的自由能计算任务，覆盖系统准备、结构建模、参数文件生成、模拟执行与数据分析等环节，实现教学任务闭环、技能传授系统化^[11]。

鼓励开展自主研究项目：引导学生基于自身研究兴趣选择具体蛋白体系，独立设计突变模拟方案、完成模拟任务并撰写简要科研报告，在实践中提升其问题意识、科研能力与表达能力，逐步培养科研创新意识。

课程思政建设：科学精神与价值引领相融合。课程思政是新时代高等教育“立德树人”根本任务的核心抓手，《软物质与分子模拟》课程作为一门面向研究生的交叉学科课程，在兼具理论深度与技术前沿的基础上，更应积极承担起思想政治教育的职责。在教学改革过程中，我们结合学科特点与时代背景，从科学精神传承、价值观引导、方法论训练与行为规范塑造等多个维度，系统构建课程思政融入路径，力求实现“知识传授、能力培养与价值引领”的三重统一^[12]。

科学精神的渗透：从学科史看科研与探索本源。课程充分挖掘分子模拟与自由能计算发展背后的科学史背景，背后凝聚着数代科学家追求真理、严谨求证的科研精神。通过介绍 2013 年与 2024 年诺贝尔奖相关成果，展示物理、生物与人工智能深度融合的前沿变革，帮助学生树立“基础学科推动技术革命”的历史视野与信念根基^[13]。

价值观引导：从技术能力到国家战略服务意识的提升。通过引导学生理解蛋白质理性设计与药物分子筛选在抗肿瘤药物、AI 疫苗设计等领域的现实应用，帮助学生意识到专业所学不仅是工具，更是一种服务社会、报效国家的能力，引导学生思考自身学习、实践如何与国家重大需求接轨，增强社会责任感与使命感^[14]。

科研伦理与行为规范：构建“可信可复现”的科研品质。在分子模拟实操过程中，特别强调科研工作的规范性、可重复性与数据可靠性。通过模拟操作报告、数据分析可追溯性检查等手段，强化学生对“真实数据、严谨模型、透明流程”的认识，养成良好的科研行为习惯^[15]。

三、结束语

《软物质与分子模拟》课程面向交叉融合的学科发展趋势，课程亟需与科技前沿接轨，系统引入分子动力学模拟、自由能计算与机器学习等先进方法，构建“理论—技术—应用”一体化教学体系，实现交叉学科背景下理论教学与科研训练的深度融合。

课程思政为专业课程注入了新的育人内涵，通过“沉浸式”方式深度嵌入教学，润物无声地实现价值引领，构建起“知识传授—能力提升—价值养成”三位一体的教育闭环。未来，课程将进一步拓展教学内容、教学实践，不断丰富课程思政的深度与广度，推动形成科研导向与价值引领协同共进的高水平课程育人体系。

当然，我们所做的还只是课程教学改革中的初步尝试，仍有许多方面有待进一步完善。未来，我们将继续坚持“以学生为中心”的教学理念，进一步优化教学内容结构，丰富案例资源，探索更契合当代研究生特点的教学方式。同时也希望在教材建设、课程思政素材打磨等方面持续推进，不断提升课程育人实效，为构建系统化、高水平的交叉类课程体系积累更多实践经验。

参考文献

- [1] 王晨曦. “互联网+教育”背景下开展线上线下混合式教学的探讨 [J]. 教育现代化, 2019, 6(44): 68-69.
- [2] 习近平. 思政课是落实立德树人根本任务的关键课程 [J]. 求是, 2020(17): 4-16.
- [3] 李国娟. 课程思政建设必须牢牢把握五个关键环节 [J]. 中国高等教育, 2017(23): 30-31.
- [4] 蔡铁权. 物理学史与物理教育 [J]. 浙江师大学报(自然科学版), 2000(3): 34-41.
- [5] 彭芳麟. 计算物理基础(附光盘)[M]. 高等教育出版社, 2010.
- [6] 梁昆淼. 数学物理方法(第四版)[M]. 高等教育出版社, 2010.
- [7] 周晰. 软物质的分子建模与模拟 [M]. 科学出版社, 2021.
- [8] 弗伦克尔. 分子模拟: 从算法到应用 [M]. 化学工业出版社, 2002.
- [9] 弗伦克尔. 分子模拟: 理论与实验 [M]. 化学工业出版社, 2016.
- [10] A.V. 芬克尔施泰因. 蛋白质物理 [M]. 科学出版社, 2013.
- [11] 唐孝威. 物理·生理·心理·病理 [M]. 浙江大学出版社, 2009.
- [12] 唐孝威. 神经教育学: 心智、脑与教育的集成 [M]. 浙江大学出版社, 2016.
- [13] 吴岩. 建设中国“金课” [J]. 中国大学教学, 2018(12): 4-9.
- [14] 龚晓嘉. 综合性高校在实践教学中培养新工科创新型人才的探索 [J]. 高教学刊, 2017(12): 141-142.
- [15] 林健. 深入扎实推进新工科建设—新工科研究与实践项目的组织和实施 [J]. 高等工程教育研究, 2017(5): 18-21.