

# 大语言模型辅助《化学反应工程》知识图谱构建—以气固相催化宏观动力学章节为例

徐文莉\* 王龙 汪磊 孙兵 阳青青 孔晗晗

三峡大学 材料与化工学院, 中国·湖北 宜昌 443002

**摘要:** 文章以气固相催化宏观动力学为切入点, 系统探讨了大语言模型(LLM)在《化学反应工程》课程动态知识图谱构建中的应用, 验证了 LLM 在知识解构、代码生成和动画联动等方面的独特价值, 总结了其实践路径与应用成效。研究发现, 合理利用 LLM 辅助图谱构建不仅能显著降低教师的技术门槛与资源迭代成本, 还能通过空间位置驱动知识展开的交互方式有效化解学生在面对复杂模型时的认知负荷, 促进工程思维的建立。本文研究结果可为人工智能赋能化工专业课程的智慧教学改革提供参考。

**关键词:** 大语言模型; 知识图谱; 化学反应工程; 动态可视化

## Large Language Model-assisted Knowledge Graph Construction for "Chemical Reaction Engineering" — A Case Study of the Gas-Solid Catalytic Macro-Kinetics Chapter

Xu Wenli\*, Wang Long, Wang Lei, Sun Bing, Yang Qingqing, Kong Hanhan

College of Materials and Chemical Engineering, China Three Gorges University, China Hubei Yichang 443002

**Abstract:** Taking the macro-kinetics of gas-solid catalytic reactions as an entry point, this paper systematically investigates the application of Large Language Models (LLMs) in the construction of dynamic knowledge graphs for the Chemical Reaction Engineering course. The unique value of LLMs in knowledge deconstruction, code generation, and animation linkage is verified, and the corresponding implementation pathways and application outcomes are summarized. The findings reveal that the rational use of LLMs to assist knowledge graph construction not only significantly lowers the technical barriers for instructors and reduces the cost of resource iteration, but also effectively alleviates students' cognitive load when confronting complex models through an interactive paradigm in which spatial positioning drives knowledge unfolding, thereby fostering the development of engineering thinking. The results of this study can provide a valuable reference for AI-empowered intelligent teaching reform in chemical engineering curricula.

**Keywords:** Large language model; Knowledge graph; Chemical reaction engineering; Dynamic visualization

## 0 引言

在国家高等教育数字化转型战略与新工科建设的双重驱动下, 培养具备复杂工程问题解决能力的新型化工人才已成为重要任务<sup>[1]</sup>。作为化工专业的核心课程,《化学反应工程》的教学质量直接影响学生创新思维与工程实践能力的培养。然而, 当前传统教学面临显著挑战, 抽象概念具象化不足、知识关联断裂、以及工业隐性经验传递低效<sup>[2]</sup>。这导致学生认知负荷加重、知识迁移受阻, 且学生学习过程中课堂信息过载、课后复习访问渠道受限, 进一步制约知识掌握程度。

知识图谱技术通过结构化语义网络为破解上述困境提供了新方向, 其可通过“知识节点—关系—属性”将知识脉络可视化。然而,《化学反应工程》课程中大多过程

需要基于模型才能深入理解, 现有技术虽能实现文本结构化, 但对模型可视化与动态解构缺乏有效支持<sup>[3-4]</sup>。对于专任教师而言, 独立构建知识图谱存在显著困难。目前的知识梳理和模型搭建需耗费大量时间, 动态维护成本高昂。此外, 动画渲染和交互界面开发要求掌握 Neo4j 图数据库、Cypher 查询语言及多模态编程能力, 远超教师技术能力范围<sup>[5-6]</sup>。近期基于图形开发及文本逻辑的大语言模型(LLM)为上述技术困难提供了新的路径。在知识解构层面, LLM 将课程知识深度拆解为颗粒化框架, 揭示跨章节概念的内在关联<sup>[7]</sup>; 在技术赋能层面, LLM 的核心价值在于代码生成能力, 其可自动输出知识图谱构建代码、模型可视化脚本, 显著降低技术门槛<sup>[8]</sup>。

鉴于此, 本研究针对《化学反应工程》课程特点, 以

“气固相催化反应宏观动力学”这一典型章节为例，探索 LLM 辅助知识图谱构建路径。依托 LLM 强大的语义解析能力，对复杂的反应工程知识进行细粒度拆解与重构，发挥 LLM 的代码生成特性，实现基于化工模型的知识图谱低成本构建与动态可视化。这不仅为专业教师提供了一套轻量化数字化资源建设方案，更期望通过可视化的知识脉络，有效化解学生的认知负荷，为新工科背景下的化工类课程智慧教学提供可落地的操作思路。

## 1 图谱构建总体设计目标及章节特征分析

### 1.1 《气固相催化宏观动力学》章节分析

《化学反应工程》的核心任务是探究工程放大过程中的传递现象与反应动力的耦合规律。作为全书承上启下的章节，“气固相催化宏观动力学”呈现出多尺度特征。从宏观反应器、催化剂床层到单个催化剂颗粒的研究尺度，跨尺度的空间转换极易导致学生概念混淆与认知脱节<sup>[9]</sup>。该章节的核心模型是以单颗催化剂为研究对象的气固相催化反应过程（如图 1）。反应物料需经历流体边界层传质、催化剂孔道渗透、吸附、表面反应、脱附等串联步骤，全程伴随着空间位置的推移与浓度 / 温度梯度的实时演变。基于静态图文的教学仅提供过程的切片化展示，难以呈现反应物分子在微孔内“边扩散、边反应”的动态轨迹，导致学生无法在脑海中建立连续的物理过程。此外，该章节包含密集的微分方程建立与求解逻辑。以“等温球形催化剂内扩散动力学方程”为例，其知识体系要求学生掌握推到逻辑，并拓展至其他模型中。在实际教学中，复杂的微积分推演极易加重学生的认知负荷，导致学生陷入纯数学求解的泥沼，而忽视了“坦克莱数”“西勒模数”及“能量释放系数”等无量纲准数背后的真实物理意义<sup>[10]</sup>。宏观动力学不仅涉及传质与传热，还直接决定反应的选择性与催化剂失活，操作参数之间的关联复杂。传统课件排版导致这些参数在不同小节中呈现碎片化分布，学生在处理“内扩散对复杂反应选择性影响”等综合问题时，难以调动全局知识网络，知识迁移严重受阻。



图1 气固相催化过程的多尺度耦合特征

### 1.2 融合模型与知识的动态图谱架构设计

针对上述教学过程中动态具象化不足与模型推导割裂

的痛点，本研究提出一种融合机理知识、数学模型、交互动画的三维知识图谱架构，实现反应过程的多维可视化表达（图 2）。具体而言，该架构首先依照气固相催化体系的内在逻辑，将复杂的课程文本解构为知识实体节点，将知识脉络中的关键数学方程与推导逻辑作为核心节点组融入图谱，建立起物理现象与数学符号的映射网络。在此基础上，设计基于时间的“七步反应”步进式直播界面，将微观物理动画与底层知识网络进行深度绑定，确立空间位置驱动知识展开的触发机制。在实际交互中，当动态仿真演示至特定空间位置时，系统将精准调用并呈现该步骤对应的核心数学模型与推导节点，并同步高亮弹出底层的相关知识点，以此实现物理过程推进—数学模型计算—知识网络拓扑的联动。

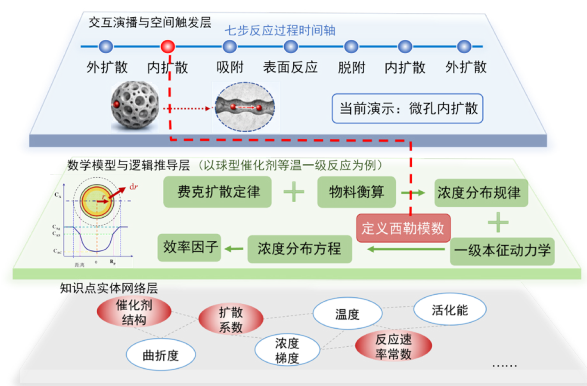


图2 融合模型与过程联动的动态知识图谱三维架构

## 2 LLM 辅助模型动态图谱开发过程示例

### 2.1 气固相催化反应知识脉络的可视化梳理

构建高质量动态交互图谱的前提，是将教材长文本转化为层级分明、逻辑清晰的结构化数据，以此作为 LLM 生成前端代码的底层语料。本研究借助思维导图工具（Xmind），对“气固相催化宏观动力学”章节进行了知识提取与关系重构，梳理过程严格遵循该章节的物理演进逻辑与数学推演逻辑（图 3）。首先明确从宏观反应器、催化剂床层到单一催化剂颗粒的研究对象，以气固相催化的经典“七步物理过程”为分类轴。将庞杂的知识点归纳至“外扩散（流体边界层传质 / 传热）”“内扩散（孔道内气体扩散与浓度 / 温度分布）”“本征动力学（吸附 - 表面反应 - 脱附）”三大核心模块下，明确了知识实体间的空间先后关系。重点对数学模型节点进行了逻辑链条梳理。例如，在“内扩散浓度分布”分支下，完整还原了等温过程球形催化剂的一级反应动力学推导全貌，建立物料衡算与费克定律应用，代入本征动力学方程，引入西勒模数简化偏微分方程进而获取宏观效率因子。这种脉络梳理将孤

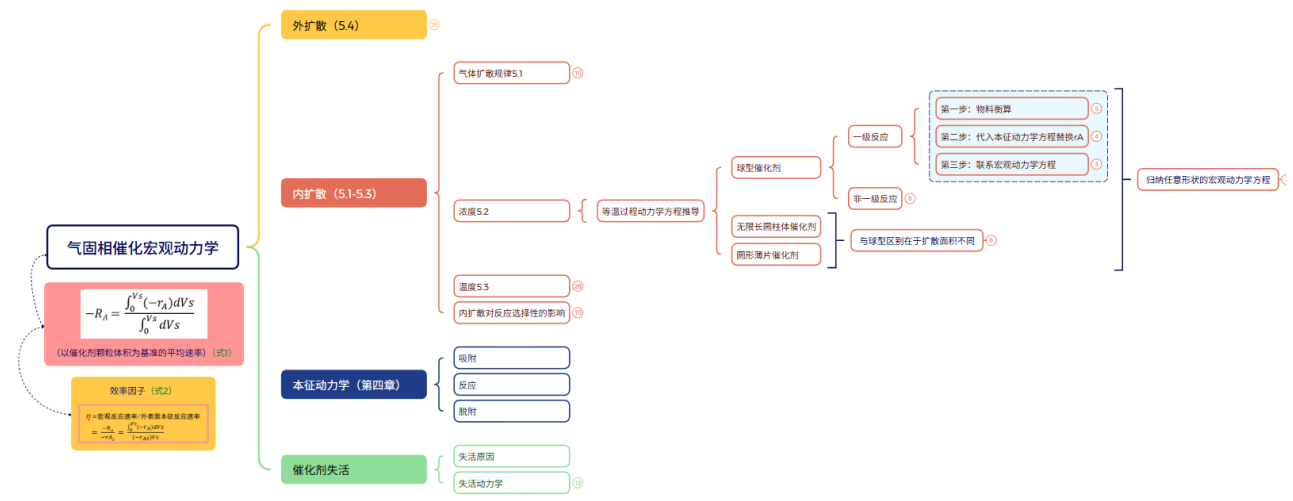


图3 基于Xmind的气固相催化宏观动力学知识脉络提取



图4 大模型提取知识的过程截图

立的公式符号还原为具有因果关联的推演网络。在确立物理骨架与数学模型后，将各类催化剂物性参数与操作条件作为底层“叶节点”挂载至对应模块。例如，将“西勒模数”挂载于内扩散机理下，将“坦克莱数”挂载于外扩散物料衡算下，并梳理出“反应级数差异对平行反应选择性影响”的逻辑分支。通过上述可视化梳理，本研究将原本碎片化的化工文本转化为具有严格“父子层级”与“时空顺序”的拓扑结构，为后续的节点弹窗联动提供了精确的触发锚点，更极大地提升了输入至大语言模型的语料质量，为实现低代码、高精度的图谱生成奠定了结构化数据基础。

### 2.2 LLM 辅助交互式图谱代码生成与部署

依托 LLM 强大的文本解析与代码生成能力，提出了一种从大纲到前端代码的生成与轻量化部署过程。首先，将 3.1 节中由 Xmind 梳理完成的树状导图导出为

Markdown 格式的结构化文本。随后，通过精心设计的提示词工程引导 LLM 进行代码生成。提示词的设计遵循角色设定、任务指令、数据注入、格式约束的原则。例如，向 LLM 输入指令：“你现在是一位资深的前端开发工程师与化工教育专家，请读取以下关于气固相催化宏观动力学的 Markdown 大纲，将其转化为基于 Apache Echarts 开源图表库的关系图配置代码。要求严格保留父子节点的层级关系，用不同颜色区分外扩散、内扩散、动力学等类别，并支持节点的点击展开与缩放。接收指令与语料后，LLM 能够精准识别文本中的层级缩进逻辑，自动完成数据结构的映射。大模型将核心章节转化为图谱的中心节点，将传质边界层、七步反应等转化为一二级分类节点，并将费克定律、西勒模数等底层概念解析为叶节点（图 4）。同时，LLM 自动生成了包含完整 HTML 骨架、JavaScript 逻辑处理以

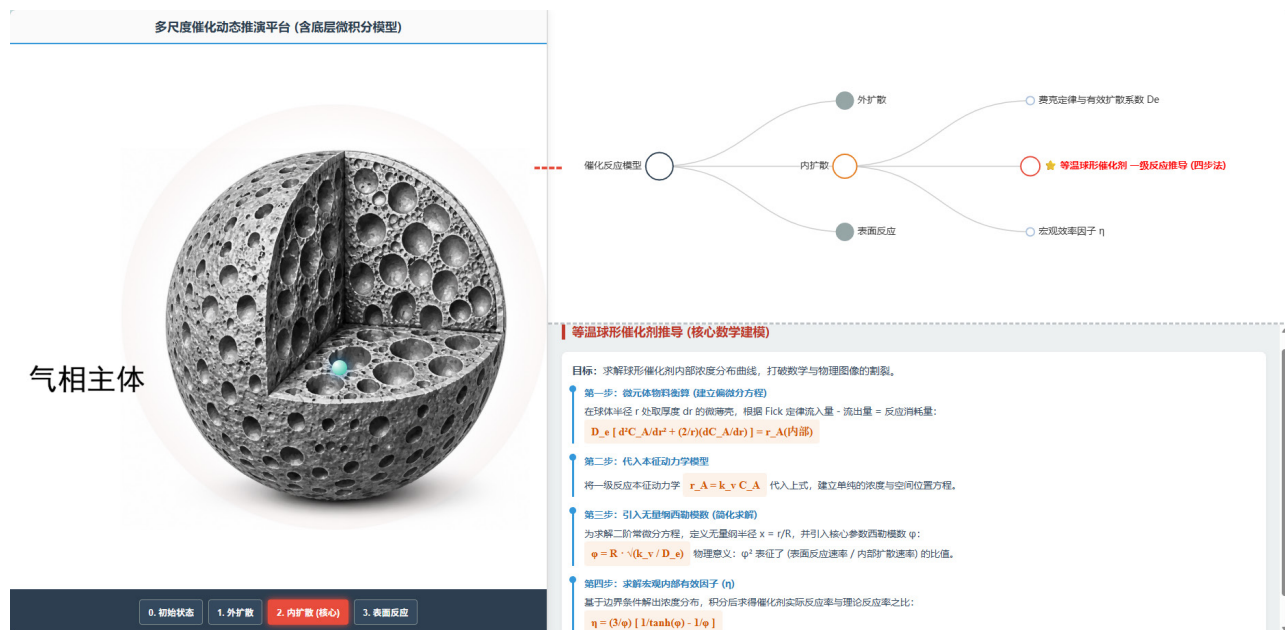


图5 大模型生成的动画-图谱联动界面与随动展开演示

及 Echarts 可视化配置项的源码，且自动配置了节点拖拽、力导向布局及悬浮高亮等交互功能。生成的代码无需搭建复杂的后端服务器或 Neo4j 等重型图数据库。专任教师仅需将 LLM 输出的代码保存为本地 .html 文件，双击即可在任何主流浏览器中流畅运行并展示动态网状图谱。当教学内容需要迭代时，教师无需修改底层代码逻辑，只需在 Xmind 中增加分支，重新输入给 LLM，即可实现图谱的更新。

### 2.3 反应动画与知识节点“随动展开”功能开发

通过向 LLM 输入排版指令，系统生成左右分栏的网页交互界面。左侧为基于 CSS/SVG 驱动的“气固相催化七步反应”空间模型演播区（模拟反应物分子穿过流体边界层、进入催化剂微孔的运动轨迹）；右侧为 3.2 节中构建的知识图谱导航区。双屏架构将具象的动态物理图像与抽象的公式逻辑网络置于同一视觉场域内，联动功能的核心在于底层的事件监听逻辑。专任教师通过自然语言向 LLM 下发指令：请编写一段 JavaScript 控制脚本，当左侧动画中的反应物分子到达催化剂孔道区域时，自动触发右侧图谱中内扩散节点的点击展开事件，并高亮其子节点。LLM 基于此指令，精准调用了 Echarts 开源库中的 dispatchAction 等控制接口，生成了状态同步脚本。该脚本能够实时捕捉左侧模型动画的运行状态（时间帧或空间坐标），并将其转化为控制图谱节点展开、折叠或高亮的触发信号。经过 LLM 的代码融汇，最终实现了高度拟真的动态沙盘效果（图 5）。在教学应用中，随着左侧模型动画的步进演播，右侧的知识图谱不再是一次性铺满屏幕，而

是呈现出随动生长的态势。例如，当动画演示至反应物在孔道内发生表面反应时，图谱中对应的本征动力学主节点瞬间点亮，并在其周围自动延伸出吸附等温线、反应速率常数等底层参数节点。这种空间位置驱动知识展开的联动机制，使得数学公式的出现严格符合物理过程的演进顺序，极大地降低了学生在面对复杂时空耦合模型时的认知负荷。

## 3 动态交互图谱在教学中的应用体验

### 3.1 学生基于过程动画的步进式学习

本研究重构的动态交互图谱，为学生提供了一条步进式的认知减负途径。在课前预习与课后复习环节，学生通过浏览器即可访问该轻量化资源。面对复杂的气固相催化宏观动力学，学生不再需要死记硬背全书的离散公式，而是跟随左侧反应物分子的运动轨迹进行探究。当空间演播触发右侧特定节点时，系统提供知识供给。这种将密集的数学方程分散至具体的物理时间轴上的设计，实现了复杂过程的降维解析。随堂测验表明，学生在处理受扩散控制的催化动力学综合分析题时，空间想象力与判断准确率显著提升（图 6）。

### 3.2 教师基于自然语言的图谱维护机制

在高等教育数字化转型背景下，专业课程资源的高频迭代与专任教师技术储备薄之间的矛盾日益突出。传统的知识图谱或仿真软件需要求助于专业程序员，维护成本高昂。本研究所构建的范式，赋予了一线化工教师极高的资源掌控权。以气固相催化反应宏观动力学章节的为例，展示了教师利用 LLMs 实现基于自然语言交互的有效途径，有望打破了数字化教学资源迭代的底层壁垒，实现了新工



图6 传统课堂学习与LLM辅助知识图谱教学效能对比（以单选题为例）

科教学内容的敏捷开发与可持续发展。

#### 4 LLM 赋能动态知识图谱的挑战与建议

《化学反应工程》作为化工专业承上启下的枢纽课程，其传统教学长期受限于物理图景抽象与数学模型割裂的困境。本研究以“气固相催化宏观动力学”这一典型多尺度章节为切入点，突破性地提出并实践了一种由大语言模型驱动的动态知识图谱构建与应用。依托 LLM 强大的文本解析与代码生成能力，打通了从 Xmind 结构化大纲到浏览器轻量化前端图谱的部署链路。摒弃了传统图谱静态、扁平的弊端，通过空间位置事件触发，将经典的七步反应动态过程与微积分推导耦合，有效化解学生在面对复杂多尺度工程计算时的认知负荷。该链路不仅可迁移至《化工原理》等具有强数理建模特征的工科基础课程，还可进一步结合 AI 智能体反馈技术，打造更加智慧的沉浸式虚拟教研生态，为破解传统硬核工科课程的教学痛点、提供了具有鲜明学科特色且极具操作性的创新实践路径。

#### 参考文献：

- [1] 刘宸宇, 张海晨, 乔卫红. 面向卓越化工人才培养的人工智能赋能表面活性剂化学与应用课程教学改革与实践[J]. 化工高等教育, 2026, 43(01): 32-38.
- [2] 孟宇, 白瑞, 慕苗等. 新工科背景下化学反应工程实验课教学改革探索[J]. 高教学刊, 2026, 12(S2): 147-150.
- [3] 郭艳, 石欣悦, 白军等. “化学反应工程”与虚拟仿真结合的课程改革[J]. 当代化工研究, 2025(12): 154-156.
- [4] 甘甜, 王超, 蒋云钟等. 基于时空动态知识图谱的

明渠实时调度模式智能识别研究[J]. 水利学报, 2025, 56(05): 646-658.

[5] 田海锋, 姚雯还, 唐小华等. 构筑“师生共同体”的“化学反应工程”混合式教学模式探讨[J]. 当代化工研究, 2025(07): 152-154.

[6] 穆肃, 谭梓淇, 骆珏秀等. 面向精准教研的立体知识图谱构建方法研究[J]. 电化教育研究, 2023, 44(05): 74-81.

[7] 李子轩, 王怀玉, 万诗瑜等. 基于大模型的中医体质学知识图谱构建研究[J]. 中国中医基础医学杂志, 2026, 32(04): 811-815.

[8] 王凯, 王铖吉, 涂用广等. 知识图谱融合大语言模型在有机电子学实验教学中的应用—有机太阳能电池器件制备[J]. 化学教育, 2026, 47(08): 87-92.

[9] 刘清龙, 罗国华, 宋焕巧. 化学反应工程案例教学设计探索—以气固相反应催化剂中的扩散过程为例[J]. 广东化工, 2025, 52(03): 151-153.

[10] 田海锋, 姚雯还, 唐小华等. 构筑“师生共同体”的“化学反应工程”混合式教学模式探讨[J]. 当代化工研究, 2025(07): 152-154.

基金项目：三峡大学 2025 年其他教学改革研究类项目“基于知识图谱的《化学反应工程》课程资源智能化重构”（J2025040）。

作者简介：\* 通讯作者：徐文莉（1995-），女，讲师，博士。