

重庆大学化学化工学院 AI 化学与智能创造微专业

《AI 科学智能体与前沿应用》

课程教学大纲

一、课程名称：AI 科学智能体与前沿应用

二、学时和学分：32 学时，2 学分

三、授课对象：面向全校理工医类专业本科三年级及以上学生开放，重点支持化学与材料、化工与制药、生物与环境、计算机与自动化、信息与人工智能等方向学生开展“智能体—工具—工作流—系统交付”一体化的交叉学习；对特定平台或框架经验不作硬性要求，但建议具备基本编程能力、信息检索与数据处理素养，并具备将问题结构化与工程化表达的学习意愿。

四、先修课程：建议先修《Python 编程与化学数据科学》《化学信息学与数据基础》，具备基础编程能力、数据处理与信息检索能力；同时建议完成《计算化学与模拟导论》《化学人工智能方法与应用》，以理解模型构建逻辑、适用边界与不确定性特征，从而更好地将知识、模型与工具整合为可规划、可执行、可复现的智能体工作流。

五、开课单位：化学化工学院

六、授课教师：

序号	教师姓名	工号	职称	所在单位
1	左赵宏	10286	讲师	化学化工学院
2	深势科技 工程师			北京深势科技有限 公司

七、课程描述：

《AI 科学智能体与前沿应用》是一门面向新一代“智能体驱动科研与工程范式”的实践导向型课程，系统讲授从单一模型调用到端到端智能体系统构建的完整路径。课程以“120 分钟速通构建第一个 Agent”为起点，逐步引导学生掌握工具调用与 MCP 协议、提示工程、智能规划、检索增强生成（RAG）、多智能体协作、长期记忆与稳定性工程等关键模块，并通过综合实践项目完成一个可运行、可复现、可审计的智能体系统原型，

使学生真正理解智能体如何作为“数字科研执行者”参与真实科研与工程流程。

本课程定位为微专业中“智能决策与执行编排层”的核心课程，承接上游的建模与知识能力（如计算化学与化学 AI），并与《自动化实验系统工程基础》在执行层形成协同：本课程解决“如何做出决策、如何规划任务、如何调度工具”，而后者解决“如何将决策落地为可运行的物理与计算系统”。课程重点培养学生从“会用工具”跃迁到“能构建系统”的能力，使其能够将模型、知识、工具、流程与反馈机制整合为可持续运行的智能系统，而非停留在单次对话或孤立脚本层面。

本课程突出“工程化智能体构建”这一主线，具有三方面鲜明特色：一是速通式入门与系统化进阶并行，通过快速构建第一个 Agent 降低门槛，再逐步引入规划、RAG、多智能体与稳定性工程，帮助学生形成整体认知；二是强调工具协同与 workflow 工程化，围绕 MCP 协议、函数调用、日志追溯与复现打包，训练学生构建可扩展、可审计的智能 workflow；三是真实科研场景深度嵌入，以知识获取、实验规划、自动化分析与代码生成等问题为载体，最终产出“证据包”式系统交付物，强化规范意识、系统意识与责任意识。

表 教学环节对应的教学内容

教学环节	课程核心内容
智能体速通理解与构建	智能体基本概念；Agent workflow（感知—规划—执行—反馈）；完成第一个 Agent 原型；端到端最小可用系统（MVP）
MCP 协议与工具生态构建	MCP 协议原理；工具注册与调用机制；为 Agent 添加工具；自定义 MCP 工具开发；工具链协同
提示工程与 Agent 对齐	经典 Prompt 范式（CoT、ToT 等）；Agent 专属 Prompt 设计；系统提示与行为约束；鲁棒性与失败模式分析
智能规划与推理机制	经典规划器范式（FSM、HTN、PDDL 思想）；ReAct、Plan-and-Execute；反思与自纠错
RAG 与知识增强	RAG 原理；向量数据库；文档解析；Chunking；检索策略；知识约束与可解释输出
多智能体系统	多智能体架构；角色分工与通信协议；协同决策；冲突消解；第一个多 Agent 系统
稳定性与智能增强	多模态感知；记忆系统；长期任务稳定性；日志系统；失败恢复；Agent 可靠性工程
前沿算法+工程洞察	Agent 前沿算法综述；工业级 Agent 系统架构；评测基准；伦理与安全
端到端综合实践	自主选题；构建完整 Agent 系统；工具链集成；形成可复现证据包；

八、教学目标

教学环节	知识贡献	能力贡献	素质贡献
智能体速通理解与构建	理解智能体的基本定义、工作范式与闭环结构（感知—规划—执行—反馈）；掌握 Agent 系统的基本组成	能快速搭建最小可用 Agent 系统（MVP），实现端到端运行；具备从 0 到 1 构建系统原型的能力	建立系统化认知与工程导向意识，形成“先跑通、再优化”的实践精神
MCP 协议与工具生态构建	掌握 MCP 协议原理、工具注册与调用机制、接口规范与工具编排逻辑	能为 Agent 添加和开发工具，构建可扩展的工具链与功能生态	形成模块化思维与接口意识，增强协作与可维护性观念
提示工程与 Agent 对齐	理解经典 Prompt 范式与 Agent 专属提示结构；理解对齐、约束与失败模式	能为 Agent 设计稳定、可控、可解释的提示策略，提高输出质量与鲁棒性	培养对可靠性、可控性与责任边界的重视，形成审慎使用 AI 的职业素养
智能规划与推理机制	掌握经典规划器范式（FSM、HTN 思想）；理解 ReAct、Plan-and-Execute 等机制	能构建具备任务分解、自我反思与多步推理能力的 Agent	形成复杂问题拆解意识，增强逻辑性与问题结构化能力
RAG 与知识增强	理解 RAG 原理、向量检索、知识约束与可解释输出机制	能构建面向真实知识库的 Agent，实现检索、融合与推理一体化	树立“证据优先”的科研观，增强对事实、来源与引用规范的重视
多智能体系统	理解多智能体的协作架构、角色分工、通信与冲突消解机制	能设计并实现基础多 Agent 系统，完成协作决策与任务分工	培养协同意识与系统协作观，增强对复杂系统涌现行为的理解
稳定性与智能增强	理解多模态感知、长期记忆、失败恢复与鲁棒性工程原理	能为 Agent 设计记忆系统、日志系统与恢复机制，提升长期稳定运行能力	强化工程可靠性与安全意识，形成“可持续运行”的系统观
前沿算法 + 工程洞察	理解 Agent 领域的前沿算法趋势、工程架构与伦理风险	能对新方法进行分析、比较与合理选型	培养技术前瞻性、批判性思维与社会责任意识
端到端综合实践	理解完整 Agent 系统的构成要素与交付规范	能独立完成一个可运行、可复现、可审计的 Agent 系统	形成工程责任感、规范意识与成果导向的职业素养

九、教学方法：

本课程采用“理论讲授 + 系统化实践 + 场景化案例”的线上混合式教学模式。理论部分聚焦科学智能体的基本范式与关键机制，围绕任务分解与目标管理、提示对齐、智能规划、工具调用（含 MCP）、检索增强（RAG）、多智能体协作与稳定性工程等核心模块，强调为何这样设计、如何评估智能体的可靠性与可控性，以及如何通过证据链验证输出可信度；实践部分以分阶段任务驱动为主线，组织学生逐步完成从 0 到 1 的 Agent

搭建、工具链集成、 workflow编排与可追溯日志建设，并通过真实科研场景（文献/专利检索、知识抽取、自动化分析与代码生成等）开展小项目训练；最终以端到端综合实践实现知识整合与迁移应用，形成可运行、可复现、可审计的智能体系统与“证据包”式规范化产出。

十、考核及成绩评定方式：

本课程采用过程性评价与终结性评价相结合的方式，突出“智能体是否可运行、 workflow是否可复现、知识与数据是否可追溯、决策过程是否可解释”的工程化与证据导向评价原则，重点考查学生将模型、知识与工具整合为可执行智能系统的能力。具体构成为：

- **平时作业与阶段性上机实践(40%)**：包括 Agent 基本构建、工具调用练习、Prompt 设计、规划器与 RAG 模块实现、日志与记忆系统配置等，侧重对核心概念的理解与操作规范性；
- **阶段性系统任务(30%)**：以功能完整的子系统为载体（如工具增强 Agent、知识增强 Agent 或多智能体协作模块），提交系统说明、流程图、代码与运行日志，考查模块化设计与系统集成能力；
- **期末综合项目或开卷报告(30%)**：完成一个端到端可运行的科学智能体系统，并进行答辩，重点评价其任务规划合理性、工具协同能力、输出可解释性、复现完整性与工程稳定性，最终形成“证据包”式规范化交付物。

十一、教材/参考书目：

1. 教材

《人工智能：一种现代方法（第4版）》，清华大学出版社

2. 中文参考教材

- 1) 《机器学习》，周志华著，清华大学出版社
- 2) 《自然语言处理入门与实战》，人民邮电出版社
- 3) 《信息检索导论》，机械工业出版社
- 4) 《软件工程：实践者的研究方法》，机械工业出版社
- 5) 《大模型时代的人工智能系统设计》，电子工业出版社
- 6) 《知识图谱：方法、实践与应用》，电子工业出版社

3. 英文参考教材与资源

- 1) Russell, Norvig, *Artificial Intelligence: A Modern Approach (4th ed.)*
<https://aima.cs.berkeley.edu>
- 2) Lewis et al., *Retrieval-Augmented Generation for Knowledge-Intensive NLP Tasks* (RAG 经典论文)
<https://arxiv.org>
- 3) LangChain Documentation (Agent/工具调用/工作流编排实践)
<https://python.langchain.com>
- 4) LlamaIndex Documentation (RAG/数据连接器/索引与检索编排)
<https://docs.llamaindex.ai>
- 5) OpenAI Cookbook (函数调用、结构化输出、RAG 实践范式)
<https://cookbook.openai.com>
- 6) Weaviate / FAISS / Milvus Documentation (向量检索与工程实现选型参考)
<https://weaviate.io/developers>
<https://faiss.ai>
<https://milvus.io/docs>