

“材料计算与模拟大学生创新实践”课程的教学改革与实践

马凤仓¹, 杨丽红²

(1. 上海理工大学 材料科学与工程学院, 上海 200093; 2. 上海理工大学 机械工程学院, 上海 200093)

摘要:“材料计算与模拟大学生创新实践”课程是为材料类本科学生开设的一门创新创业类课程, 该课程是将材料专业的基本原理与创新创业需求相结合的一种尝试。由于目前存在的一些客观因素和课程本身的特点, 学生在学习该课程过程中容易出现兴趣不高、解决问题能力差等问题。为此提出了针对课程特点, 紧密联系国内外最新进展和发展动态, 重在掌握方法的教学改革思路。通过引入国外实例, 突出课程的实际应用等方面来激发学生的热情, 从而提高了课程的教学效果。

关键词: 材料计算与模拟; 创新创业; 教学改革与实践

中图分类号: G 642.0 **文献标志码:** A **文章编号:** 1009-895X(2018)01-0085-06

DOI: 10.13256/j.cnki.jusst.sse.2018.01.017

Course Reform and Practice of Material Calculation and Simulation

Ma Fengcang¹, Yang Lihong²

(1. School of Materials Science and Engineering,

University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, China;

2. School of Mechanical Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, China)

Abstract: Innovative practices of Material calculation and simulation is a pioneering course for undergraduate majors in material sciences. It is an attempt to combine the basic principles of materials with the needs of innovation and entrepreneurship teaching. However, some problems often occur in students' learning this course, such as lack of interest, poor problem-solving skills, and so on. Therefore, a teaching reform is initiated, focusing on course characteristics, the latest developments in both the discipline and the learning processes. Enthusiasm of students is stimulated by introducing foreign examples and the practical experiences. Significant teaching effects are produced in this course.

Keywords: material calculation and simulation; innovation and entrepreneurship; course reform and practice

1912年约瑟夫·熊彼特提出了“创新”理论, 之后诞生了创新教育, 并在发达国家迅速兴起。在

1989年11月, 联合国教科文组织在北京召开了“面向21世纪教育国际研讨会”, 在此会议上明确

收稿日期: 2017-08-23

作者简介: 马凤仓(1973-)男, 副教授。研究方向: 医用钛合金和钛基复合材料。E-mail: mafengcang@163.com

提出了“创业教育”概念。1998年首次世界高等教育会议召开,发表了《21世纪的高等教育:展望与行动世界宣言》,进一步指出:“为方便毕业生就业,高等教育应主要培养创业技能与主动精神:毕业生将愈来愈不再仅仅是求职者,而首先将成为工作岗位的创造者。”^[1-2]

作为联合国教科文组织“创业教育”项目的成员国,我国早在1991年就试点创业教育,但当时主要限于在基础教育阶段。反观我国高校的创新创业教育则起步较晚。尽管我国在创新创业教育上已经取得了一定的成绩,但是,我国的创新创业教育整体还处于起步阶段,大学生创新创业能力远未达到国家人才战略的要求,其对实现创新型国家目标的作用还非常有限。多数高等院校创新创业教育仍处于空缺或流于形式,基本上是为了完成教学任务而走走过场,甚至“名存实亡”。

“材料计算与模拟大学生创新实践”课程是上海理工大学材料学院在材料类本科专业学生创新创业教育上的一次尝试。但是,在实践中发现,学生在学习过程中容易出现学习兴趣不高、解决问题能力差等问题。为了激发学生的学习热情,提高教学效果,提出了认识课程特点改进教学方法、明确课程核心内容阐明计算模拟方法原理、结合工程应用设计教学内容、突出实践特色激发学习兴趣、结合最新进展实例激发学生学习热情等,进行多方面教学改革思路,并在实践中取得了明显成效。

一、认识课程特点 改进教学方法

材料的计算与模拟方面的研究是近年来随着计算技术的快速发展而形成的一门新兴学科,它综合了理论化学、材料物理学、凝聚态物理学和计算机算法等多个相关学科。发展这门学科在于利用现代高速计算机,研究材料的各种物理、化学性质,深入揭示材料从微观到宏观的各类现象与性质,并对材料的结构和物性进行理论预测,从而达到设计和开发新材料的目的。“材料计算与模拟大学生创新实践”是联系材料学理论和实践的桥梁,本课程能够培养学生在材料制备前从理论上设计并预测新材料性质的能力^[3]。

但是,“材料计算与模拟大学生创新实践”同时又是一门十分抽象、理论性极强的课程,书中理论众多并伴随着众多陌生的符号、公式和注释,这往往使学生在在学习过程中望而却步。传统的教学通常是让学生在课堂上和课后反复做习题,最终可以达到灵活应用这些公式定律来解题的目的。但是,在这种教学方式下教学效果很不理想,学生学习兴趣不高,知其然而不知其所以然。古人云,授之以鱼不如授之以渔,我们想通过在教学过程中追本溯源,将计算模拟方法的来龙去脉讲述清楚,教给学生创造性的思维和方法,从而改善教学效果,达到教学目的。

二、明确课程核心内容 阐明计算模拟方法原理

材料的多尺度计算模拟方法主要有以下几种^[4]。

(一) 第一性原理法

第一性原理法基于密度泛函理论,是目前研究微观电子结构最主要的理论方法。

第一性原理计算方法用普朗克常数,光速,玻尔兹曼常数,电子静态质量和电子电荷电量这五个基本物理变量和研究体系的基本结构,基于量子力学和薛定谔方程,通过薛定谔方程的数值求解,预测材料的物理性质。第一性原理法不仅在电子结构研究中,如密度泛函理论、局域密度近似(LDA)和广义梯度近似(GGA)上,已经取得了很大的成功。而且,第一性原理法对于金属基态和半导体的结构和性质,如晶体结合能、晶格常数以及晶体力学性质也都能够给出与实验符合得很好的计算结果。此外,第一性原理法还能够比较精确地描述很多体系的电子结构,如电子态密度、能带结构、电荷密度、差分电荷密度和键布局等,光学性质,如复折射率、介电函数、反射光谱、光吸收系数及光电导等。因此,第一性原理法能够从微观理论角度揭示材料物理性质的起源,实现对材料结构和功能的控制,据此制备满足不同性能要求的新材料。

(二) 蒙特卡洛法

蒙特卡洛法也称统计模拟法,是20世纪40年

代提出的一种以概率统计理论为指导的数值计算方法,是指使用随机数来解决很多计算问题的方法。该方法通过在简单的理论准则基础上,采用反复随机抽样的方法,解决复杂系统的问题,可以模拟研究对象概率与统计类型的问题。与该方法相对应的是确定性算法。

蒙特卡洛法借助合适的概率模型也可以解决确定性问题,比如定积分问题等。随着计算机技术的不断发展,蒙特卡洛法已经广泛应用在固体物理、应用物理、化学、材料等领域^[5]。蒙特卡洛法能够模拟材料构成基本粒子如原子和分子的状态,与采用量子力学和分子动力学的方法相比,蒙特卡洛法计算更为简单,因此,可以实现很大体系的模拟。蒙特卡洛法还可以与统计物理的方法相结合,从而将组成材料的基本粒子的状态与其宏观性能相联系,是研究材料性能及其影响因素重要手段。

(三) 分子动力学法

分子动力学法是按照体系内部的动力学规律来研究材料性能的一种方法。该方法通过确定体系位形转变,计算体系中每个粒子的运动,然后根据特定的物理规律,给出材料组成的微观量(如分子的速度、坐标)与材料性质的宏观量(如温度、压力、比热容、弹性模量等)的关系。该方法属于一种确定性方法^[6]。

在分子动力学方法中,首先要建立一组体系内分子运动的薛定谔方程,通过求解分子的薛定谔方

程,来研究该体系各宏观量相关的微观量的基本过程。其次,基于波恩-奥本海默方法,将建立的薛定谔方程做近似,并将原子核的运动和电子的运动进行分开处理。由于原子核的运动满足经典力学规律,可用牛顿定律来描述,电子的运动符合量子力学理论。因此,原子核的运动可用经典动力学方法处理,而电子的运动则采用量子力学的方法。

三、结合工程应用设计教学内容,突出实践特色激发学习兴趣

针对学生在学习过程中没有学习目标,学习兴趣不高的问题,采取从教学内容设计上突出工程应用来激发学生学习兴趣的新措施。

(一) 教学内容设计

“材料计算与模拟大学生创新实践”课程的教学内容如图1。在设计的教学内容中,体现“理论与应用”相结合,继承了经典理论与方法(差分法求解温度场、浓度场等),发扬学科前沿知识,增强创新能力(材料科学中广泛应用的计算机软件介绍与实验)。通过优化课程内容,打通理论学习和实际工程应用的“壁垒”,突出教学内容的重点,促进相关课程的综合化。教学内容以实践教学、软件操作为主,理论讲解为辅,目的是增加学生分析问题并应用有关计算与模拟软件解决问题的能力,激发学生的学习兴趣。

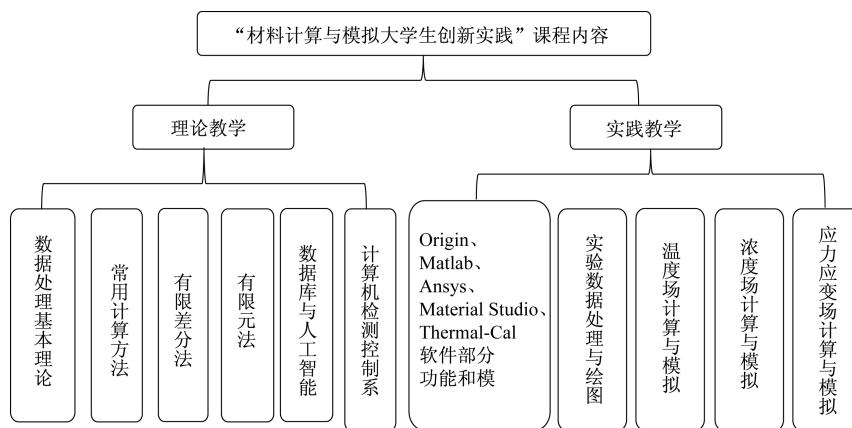


图1 “材料计算与模拟大学生创新实践”教学设计

Fig.1 Teaching content of the innovative course of material calculation and simulation for college students

(二) 上机操作和实践环节

在软硬件资源有限的条件下,为学生开设了 Origin, Matlab, Material Studio 和 ANSYS 等软件的学习和在工程中的应用的上机实践环节。在此基础上设计了四个模块的实验: Origin 在材料科学中的应用、ANSYS 在铸件温度场模拟、Matlab 在工件渗碳过程浓度场模拟、Matlab 在焊接过程中的温度场模拟。在“Origin 在材料科学中的应用”实验中,紧密结合当前学生正在开设的专业课程实验,如结合“材料热处理过程中氧化”实验,利用 Origin 软件进行数据处理,研究曲线表达的意义(见图2)。利用 Origin 软件进行数据处理绘制相图(见图3)。Matlab 在工件渗碳过程浓度场模拟和 Matlab 在焊接过程中的温度场模拟见图4。

为了让学生利用现有的条件充分发挥自己的创新思维和自主能力,精心设计实验内容和进行细致的上机操作指导,并且将其和计算机编程求解方

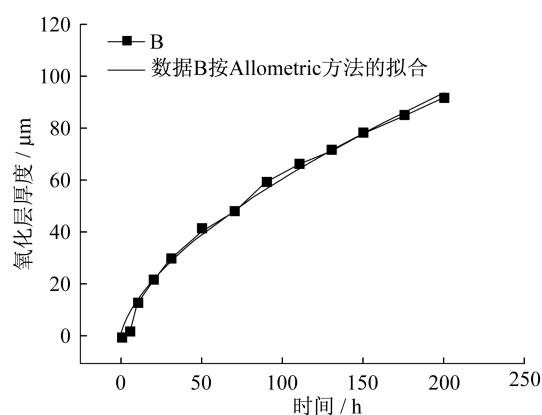


图2 Origin 软件对金属氧化层厚度实验数据的拟合处理
Fig.2 Fitting processing the oxide thickness of metal during experiment with Origin software

法相比较,不仅仅让学生掌握相关软件的应用和操作,更可以促使学生了解基础的理论知识。实验内容具有较大的选择性和较强的挑战性,学生可以展示自身的创造力,也在很大程度上激发了学生的学习积极性。

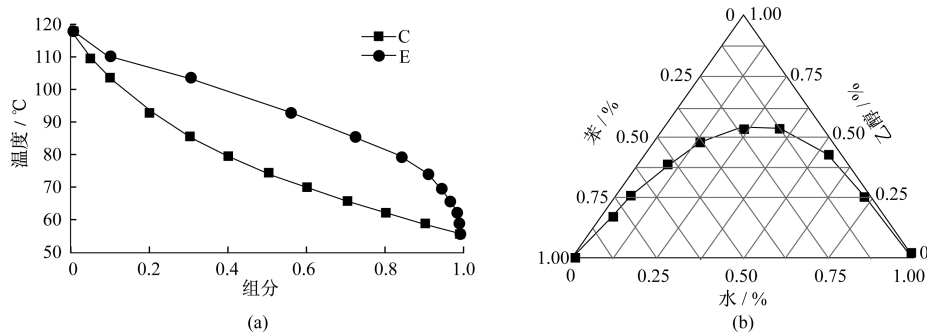


图3 Origin 软件绘制的二元(a)和三元(b)相图

Fig.3 Binary (a) and ternary (b) phase diagrams plotted with Origin software

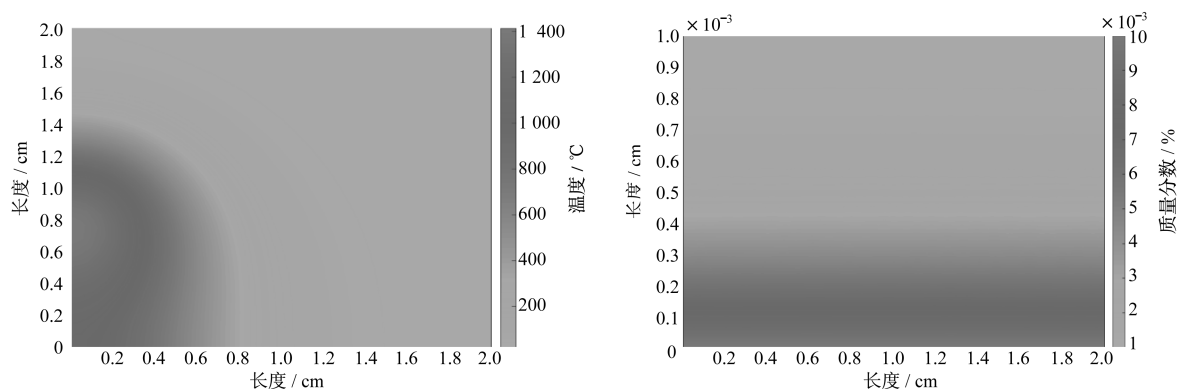


图4 利用 Matlab 软件模拟工件渗碳过程浓度场(a)和焊接过程中的温度场(b)

Fig.4 Temperature field during welding simulated(a) and concentration field during carburization(b) with Matlab software

四、结合最新进展实例激发学习热情

在教学中,将材料计算与模拟最新的发展引入到课程中以激发学生对课程的学习热情。例如,美国对材料计算与模拟非常重视,已在此领域部署了很多大型项目。2011年6月,奥巴马总统通过了一项5亿美元的“推进制造业伙伴关系”的发展计划,该计划提出借助政府、高校及企业的深入合作来进一步强化美国制造业,“材料基因组计划”^[7],其投资总额超过1亿美元。美国能源部主导的“材料和化学计算创新项目”(Innovation of Computational Materials and Chemistry)重点关注以下七个研究方向:1)极端条件材料;2)薄膜、表面和界面;3)自组装与软物质;4)化学反应;5)电子动力学、激发态、光捕获材料和工艺;6)强关联电子系统和复杂材料、超导、铁电、磁材料;7)分离和流体工艺等。2012年10月,在美国材料基因组计划的支持下,密歇根大学 John Allison 教授正在主导一个材料计算项目,旨在发现和制造先进材料,并使先进材料的开发速度加倍,缩短开发和产业化周期。该项目将建立一个名为“结构材料预测集成科学中心”(Predictive Integrated Structural Materials Science Center)的软件创新中心^[7-8]。2012年10月,在材料基因组计划的总体框架下,美国国家科学基金会宣布首次为“设计材料以彻底改变和规划未来”(Designing Materials to Revolutionize and Engineer our Future, DMREF)计划投入资金支持。项目设立了22笔共计1200万美元的资金,支持以下领域的研发:新型轻质刚性聚合物、飞机引擎和电厂用高耐久度多层材料、基于自旋电子学的新数据存储技术、热电转换复合材料、新型玻璃、生物膜材料、特种硬质涂层技术等^[9]。

在材料计算模拟研究上,日本突出了计算模拟研究技术研发与材料开发相结合的特色。日本文部科学省和经济产业省联合部署了一系列的战略和发展计划,如日本文部科学省在2002年启动了“生产技术先进仿真软件”的技术研发计划,目的是在能源和环境、纳米生物技术领域开发出世界一流的计算与模拟软件。研究的课题包括:1)下一代流体动力学模拟;2)中间件高性能计算;3)量子分子相互作用分析;4)纳米级器件模拟;5)下一代结构分析;6)下一代量子化学模拟;7)问题解决环境

平台。2009年,日本文部科学省和经济产业省又联合提出了“分子技术战略”,该战略主要研究电子状态控制、集成和合成控制、形态结构控制、分子变换技术、分子离子传输控制、分子设计与创造技术等^[10-11]。“间隙控制材料设计和利用技术”是日本科学技术未来战略研讨会提议的“间隙控制材料利用技术”计划的重要研究课题^[12]。“间隙控制材料利用技术”于2009年10月26日起实施。间隙控制材料设计和利用技术主要包括三项内容:1)间隙控制材料设计与合成:优化性能;2)间隙技术的实现差距:促进应用;3)通用平台技术:观察分析技术、原理。文部科学省提出的“实现能源安全的纳米结构控制材料研究和开发”战略、“柔性、大面积、轻量、薄型器件基础技术研究开发”等项目也都涉及材料计算设计与模拟。

五、教学效果

该课程提高了学生自主学习的积极性,通过理论教学和实验教学改革,使学生对数值计算基本理论、材料科学中的各种物理场的数值模拟、计算机在本专业的应用等方面的情况有较为全面的了解,能将课堂所学的理论知识付之于实践中,取得了良好的效果,学生的综合素质得到提升。不仅锻炼了学生的观察能力、分析能力、动手能力,提高综合应用知识的能力,学生的积极性和主动性也得到加强。很多学生自觉将所学习的软件应用在其他专业实验和科研中,学习了Origin软件后,自觉将该软件和专业课程紧密结合,用于实验数据处理中。

六、结束语

通过以上措施,学生对材料计算模拟学习兴趣明显增加,教学上也取得相应的教学成果。总之,将材料计算与模拟专业课程引入创新创业教育是可行的,它对于培养学生的创新能力具有重要的支持作用。

随着计算机技术的快速发展,计算与模拟技术在材料设计、合成、材料物理性质预测和评价等方面有许多突破性的进展,材料的计算与模拟已经和材料相关理论、实验一起成为材料研究的三大支柱。材料的计算与模拟已成为现代材料科学研究的必备手段之一,因此,开展材料计算与模拟的教学

在材料科学相关专业中是十分迫切的,尤其是把材料计算与模拟这门专业性和实践性较强的课程与大学生创新创业教育结合起来更值得在实践中不断改进。

参考文献:

- [1] 王丽娟,高志宏.大学生创新创业教育研究[J].中国青年研究,2012(10):96-99,109.
- [2] 吴泽俊.高校创新创业教育及其启示[J].南昌工程学院学报,2007,26(5):18-22.
- [3] 许鑫华,叶卫平.计算机在材料科学中的应用[M].北京:机械工业出版社,2003.
- [4] 高力明.计算材料学与材料结构的层次[J].陶瓷学报,2004,25(2):69-74.
- [5] 刘建军,尹新国,张金锋,等.材料学专业引入计算模拟方法教学的研究[J].淮北师范大学学报(自然科学版),2013,34(1):83-86.
- [6] 陈敏伯.计算化学——从理论化学到分子模拟[M].北京:科学出版社,2009.
- [7] 冯瑞华,姜山.国外材料计算学研究战略与计划分

析[J].科技管理研究,2014,34(3):34-39.

- [8] Ar L. Army invests \$ 120M in basic research to exploit new materials[EB/OL]. (2012-08-25) [2013-01-31] <http://www.arl.army.mil/www/default.cfm?page=1071>.
- [9] Hopkins J. Air Force Launches New Center at Johns Hopkins to Advance Structural Materials and Design for Aerospace Applications[EB/OL]. (2012-09-13) [2013-01-31]. <http://releases.jhu.edu/2012/09/13/air-force-launches-center-at-johns-hopkins-to-advance-structural-materials>.
- [10] 日本科学技术振兴机构研究开发战略中心.分子技术战略——分子水平新功能创造[EB/OL]. (2009-08-10) [2013-01-31]. <http://crds.jst.go.jp/output/pdf/09sp06s.pdf>.
- [11] NIMS.理论计算科学研究概要[EB/OL]. (2012-06-29) [2013-01-31]. http://www.nims.go.jp/cmssc/outline_e.html.
- [12] 日本科学技术振兴机构研究开发战略中心.间隙控制材料设计和利用技术[EB/OL]. (2009-08-10) [2013-01-31]. <http://crds.jst.go.jp/output/pdf/09sp05s.pdf>.

(编辑: 巩红晓)

(上接第17页)

- [2] 杨宪益.杨宪益对话集:从《离骚》开始,翻译整个中国[M].北京:人民日报出版社,2011.
- [3] 赵蘅.宪益舅舅百岁祭[M].哈尔滨:北方文艺出版社,2015.
- [4] 周作人.陀螺序[C]//罗新璋,陈应年.翻译论集.第二版.北京:商务印书馆,2009.
- [5] 陈西滢.论翻译[C]//罗新璋,陈应年.翻译论集.第二版.北京:商务印书馆,2009.
- [6] 王以铸.论诗之不可译——兼论译诗问题[C]//罗新璋,陈应年.翻译论集.第二版.北京:商务印书馆,2009.
- [7] 海岸.诗人译诗 译诗为诗[J].中国翻译,2005,26(6):27-30.
- [8] 杨宪益.漏船载酒忆当年[M].薛鸿时,译.北京:北京十月文艺出版社,2001.
- [9] 杨宪益.略谈我从事翻译工作的经历与体会[M]//杨宪益,董宁文.去日苦多.哈尔滨:北方文艺出版社,2015.
- [10] 范玮丽.金丝小巷忘年交[M].哈尔滨:北方文艺出版社,2015.
- [11] 林家骊.楚辞[M].北京:中华书局,2009.
- [12] 屈原.楚辞选[M].杨宪益,戴乃迭,译.北京:外文出版社,2010.
- [13] 荣立宇.霍克思译《红楼梦》诗词的诗学观照——从两首译诗说起[J].语言与翻译,2015(4):78-82.

- [14] 木心.1989—1994:文学回忆录[M].陈丹青,录.桂林:广西师范大学出版社,2012.
- [15] 王宏印.《红楼梦》诗词曲赋英译比较研究[M].西安:陕西师范大学出版社,2001.
- [16] Cao X Q. The Story of the Stone [M]. Translated by Hawkes D, London: Penguin Books Ltd, 1973.
- [17] 康慨.杨宪益:大翻译家和他的时代[EB/OL]. (2009-12-10) [2015-03-28]. <http://www.chinanews.com/cul/news/2009/12-10/2010948.shtml>.
- [18] 黄乔生.杨宪益与鲁迅著作英译:很熟悉也很关心[EB/OL]. (2010-02-11) [2016-01-25]. <http://www.chinanews.com/cul/news/2010/02-11/2121783.shtml>.
- [19] 杨宪益.银翘集——杨宪益诗集[M].福州:福建教育出版社,2007.
- [20] 付智茜.翻译家精神研究:以杨宪益、戴乃迭为例[J].上海翻译,2014(3):45-47,85.
- [21] 余冠英.冠英说诗[M].北京:商务印书馆,2014.
- [22] 陶渊明.汉魏六朝诗选[M].杨宪益,戴乃迭,译.北京:外文出版社,2003.
- [24] 许渊冲.新世纪的新译论[C]//海岸.中西诗歌翻译百年论集.上海:上海外语教育出版社,2007.

(编辑: 朱渭波)