

面向AI与大数据时代的《计算材料学》课程教学改革与实践

王 融, 施 越, 贾 碧, 邱永江

重庆科技大学材料与新能源学院, 重庆 沙坪坝

收稿日期: 2025年8月1日; 录用日期: 2025年9月1日; 发布日期: 2025年9月11日

摘 要

当下我们正处于人工智能与大数据技术深度变革材料科学的时代, 传统的《计算材料学》课程授课教学模式因此面临着新一轮革新需求。本文紧密围绕工程教育专业认证标准的核心要求, 深入探索人工智能与大数据技术在课程教学改革中的多渠道融合路径。通过教学内容体系重新架构、智能化实践平台线上建设、教学方法机制深度创新以及课堂课下评价体系多维度优化, 进而全面提升学生运用现代计算工具解决复杂材料设计问题的综合能力, 强化数据驱动思维, 为培养符合新材料产业新时代高质量发展需求的复合型工程人才提供教育支撑。

关键词

《计算材料学》, 人工智能, 大数据, 工程教育认证, 教学改革

Teaching Innovation and Practice of “Computational Materials Science” in the AI and Big Data Era

Rong Wang, Yue Shi, Bi Jia, Yongjiang Di

College of Materials and New Energy, Chongqing University of Science and Technology, Chongqing

Received: Aug. 1st, 2025; accepted: Sep. 1st, 2025; published: Sep. 11th, 2025

Abstract

We are currently witnessing a profound transformation in materials science driven by artificial intelligence (AI) and big data technologies. Against this backdrop, the traditional teaching model of

the “Computational Materials Science” course faces an urgent need for reform. This study closely aligns with the core requirements of engineering education accreditation standards and systematically explores multiple integration pathways of AI and big data into curriculum reform. By reconstructing the course content framework, developing intelligent online practice platforms, innovating teaching methodologies, and optimizing multidimensional assessment systems both inside and outside the classroom, this reform aims to comprehensively enhance students’ ability to apply modern computational tools to address complex problems in materials design. Moreover, it seeks to strengthen data-driven thinking and provide educational support for cultivating interdisciplinary engineering professionals who meet the demands of high-quality development in the emerging materials industry.

Keywords

“Computational Materials Science”, Artificial Intelligence, Big Data, Engineering Education Accreditation, Teaching Reform

Copyright © 2025 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

材料科学研究范式正在经历从经验驱动向数据驱动的历史性转变。随着以人工智能为核心驱动力的材料模拟、高通量平台搭建以及全球材料基因组计划的深入推进，正在深刻重构新材料研发的全产业链条[1][2]。我国《“十四五”国家战略性新兴产业发展规划》明确将人工智能与新材料产业的深度融合列为重点发展领域，这对高等院校材料类人才培养体系提出前所未有的挑战。工程教育专业认证标准明确指出，合格的本科毕业生必须掌握现代工程工具的应用能力以及解决复杂工程问题的方案设计能力。

当前《计算材料学》课程体系仍以量子力学基础理论、分子动力学模拟原理及商业软件操作训练为主体框架，尚未系统整合机器学习算法、材料数据库智能挖掘等前沿技术模块，难以满足新时代对材料类工程人才的迫切需求[3][4]。从教育学视角来看，这种局限与 Kolb 提出的“经验学习周期”存在明显偏差：当前教学环节尚未充分支持学生在“具体经验 - 反思观察 - 抽象概念化 - 主动实验”的循环中完成能力生成。同样，问题驱动学习(PBL)的核心理念——以真实复杂问题为驱动、强调跨学科知识整合与团队合作——在课程设计中也未得到充分体现。本研究将以工程教育认证标准为改革导向，融合经验学习与 PBL 的教学理念，系统探索人工智能与大数据技术赋能下的课程教学改革路径。通过重构教学内容体系、设计智能化实践平台、开展项目驱动式教学以及建立多维度评价体系，力图推动学生在“理论 - 实践 - 反思 - 创新”的闭环中成长，进而培养符合新时代新材料产业发展需求的复合型工程人才[5][6]。

2. 课程现状与核心挑战

《计算材料学》作为材料类学科的核心课程，其教学内容通常涵盖密度泛函理论基本原理、分子动力学模拟方法、有限元分析等计算体系；教学目标则侧重于理论推导能力培养与商业软件操作训练。在当前工程教育认证持续深化和 AI 冲击传统产业领域的社会背景下，该课程面临三个维度的结构性挑战。

一是教学内容与技术发展存在显著代差。人工智能技术在材料科学领域的前沿应用，例如基于机器学习的原子间势函数开发、材料逆向设计算法实现等关键内容，尚未有效融入教学知识体系。学生对 Materials Project、OQMD 等国际开放材料数据库的访问能力与数据挖掘技巧普遍薄弱，难以对接产业界

日益增长的材料信息学人才需求。

二是实践能力培养机制存在系统性缺陷。传统实验教学局限于商业软件界面操作训练，学生缺乏处理真实工业材料数据集、编写自动化分析脚本以及开发智能预测模型的实战经验。这种脱节现象导致工程认证标准强调的复杂工程问题解决能力培养效果不佳，毕业生难以快速适应企业研发环境。

三是教学模式呈现单一化倾向。以教师演示操作、学生被动模仿为主体的授课方式，严重抑制了学生的探索性思维与技术创新能力。跨学科协作训练环节的缺失，使得学生难以应对新材料开发中常见的多尺度建模、多物理场耦合等复杂工程场景。

以上课程设计缺陷显著制约了《计算材料学》课程设计和当前 AI 赋能产业变革的契合程度，由此致使材料相关学科培养的毕业生和社会的发展出现明显的脱节。

3. 教学改革的理论框架与实施路径

为此，围绕着兼顾传统计算材料学知识的教授以及 AI 相关知识的普及，本课程教学改革的核心思路是让学生了解计算，了解 AI，并可以通过 AI 相关知识去真正解决实际问题。因此我们不再满足于教学生怎么点软件按钮，而是带着他们从产业需求出发，像工程师那样思考。即我们通过真实的产业需求，围绕钢铁行业、石油行业以及新能源领域真实的材料需求，从材料的性能出发，借助 AI 模型构建以及相关材料学基础知识，逆向设计并预测相关高性能材料，将其作为我们课堂上的真实项目作业布置给学生，引导培养其发现问题、分析问题、解决问题的能力素养，并将课堂教学知识和产业需求贯通起来，培养其工程师的能力。由此，我们的课程改革将主要围绕以下四个层次。

3.1. 教学内容系统性重构

我们把课程分成三个台阶来爬。第一个台阶打基础，密度泛函理论和分子动力学这些经典内容保留，但强化 Python 编程训练。现在学生都要学会用脚本自动化处理数据，比如写个程序自动分析不同温度下材料的相变过程。

第二个台阶熟练运用智能技术。机器学习这块我们设计了很多贴近实际应用的实验，比如让学生用神经网络预测半导体材料的带隙。例如可以通过随机森林算法筛选光伏材料，发现某种钙钛矿材料的性能特别好，将其与光伏产业的现状相结合，诱导学生进一步探究的兴趣。

第三个台阶直通产业应用。这里引入了企业真实案例，像中广核委托某研究所的金属合金腐蚀预测项目。学生可以根据有关数据库或真实场景的腐蚀数据，建立预测模型，预测金属种类和对比对腐蚀性能的影响。这种实战训练让学生真切感受到，课堂上学的东西真的能解决工厂里的难题。

3.2. 教学平台智慧化重塑

开发更受学生欢迎的云平台和虚拟实验项目。可以根据不同的应用场景，将不同材料性能的数据库架构在局域网上，方便学生的调取和利用。同时根据真实的材料表征实验，设计线上模拟学习的程序。例如设计“透射电镜图像智能识别”实验，根据真实上传的金属缺陷图片，系统自动标注位错位置，再让学生写代码改进识别精度，既提高学生对基础材料表征的认知，又锻炼学生动手解决科学问题的能力。

3.3. 上课方式需求式引领

课前我们会在平台发布些“开胃小菜”，比如十分钟的微课视频讲解随机森林原理，搭配 Materials Project 数据库的探索任务。调动学生的积极性和趣味性，引导其课堂学习的专心深入。课堂上按专业分组协作，金属组的同学研究高温合金优化，陶瓷组攻克燃料电池涂层，高分子组则设计柔性电子材料。通过不同的数据库数据和机器学习架构，完成课前发布的相关任务，并以小组形式在课堂上汇报分享。

课后实践直接对接企业需求。根据学院同企业签订的产学研合同，真实地去了解企业的需求。以新能源电池材料为例，学生通过云端协作平台，可以高效完成了一千多种正极材料的高通量计算，再借助机器学习发掘出特征因素，辅助企业研发人员去设计开发满足相关需求的新材料。

3.4. 考核方式实践化导向

评价方式更关注学生解决问题的全过程。课前准备占总成绩 20%，主要去检查学生的采集数据质量和算法设计思路。主动鼓励学生利用课余时间，深入去钻到布置的项目任务中去，主动去思考，去设计，去撰写脚本。

课堂表现占总成绩 30%。主要通过学生的项目答辩情况，去评估学生的分工协作能力和基础的计算材料学知识素养。同时跨组提问环节也能间接反映学生的问题分析能力和沟通交流能力。

实践成果占总成绩 50%。根据布置的项目内容，可以要求学生将代码上传到 GitHub，并撰写项目任务书作为归档资料。最后的方案报告要经得起评阅老师的推敲，符合真实的产业应用场景规范。

4. 改革实践典型案例

课程教学改革特色主要体现在通过项目化设计，紧密围绕课前自主学习、课堂深度互动与课后实践拓展三个环节展开，旨在培养学生解决复杂工程问题的能力。

4.1. 课前数据挖掘实践

在人工智能的时代，开放的数据库是重中之重。课程利用开放数据库(如 Materials Project 等)自主搜集特定材料的原始数据。初期，学生普遍面临数据格式多样、处理困难等问题(学生反馈数据处理任务艰巨)。然而，经过数次系统训练，学生逐渐掌握了数据清洗、整理的技巧，并对这种探索性学习方式产生浓厚兴趣，这种源于自主探索的发现所带来的成就感远胜于被动接受教材知识。

4.2. 课堂协作建模攻关

课堂教学聚焦实际问题解决。例如，金属材料专业方向的学生小组需开发位错显微图像的自动识别模型。在实践过程中，他们发现传统图像处理算法对模糊图像的识别率过低，难以满足实际需求。因此，课堂小组可以通过尝试不同计算方法和思路，进行模型构建与参数调试，进而深刻体验到创新方法攻克技术难关的价值。

4.3. 课后模拟验证与综合提升

课后环节要求学生将课堂开发的预测模型结果，通过分子动力学(MD)模拟进行验证。这一过程常出现理论与模拟结果不符的情况，成为关键的“反思与排查”阶段。此类试错经历可以使学生深刻认识到工程实践中细节把控与系统性验证的重要性。最终形成的综合研究报告，不仅包含技术方案，更注重问题分析逻辑的严密性。

该教学模式成功将前沿研究(数据挖掘、机器学习、分子模拟)与真实工程问题紧密结合，有效促进了智能计算设计与工业实践需求的深度融合，显著提升了学生应对复杂材料工程问题的综合能力。

5. 结论

项目化课程改革摒弃了以往“学不致用”的教学痛点，本文以《计算材料学》课程为例，探讨了人工智能大数据时代下计算类相关课程的教学改革模式。通过项目化设计，将课程教学从纯理论化转变成实践导向式。学生通过理论 - 数据 - 算法 - 应用的全链条训练，真正掌握了用智能工具解决工程难题的

本事。然而,未来改革还在路上,例如以后可以通过和国内其他高校搭建的材料智能设计云实验室合作,让学生随时随地共享数据,开展计算设计,催生更有趣的教学创新。材料相关领域的教育工作者应更关注人工智能大数据时代带来的课堂巨大颠覆性变革,努力提升我国材料领域工程教育质量,为培养具有国际竞争力的优秀人才作出贡献。

参考文献

- [1] 范志强,姚静. 人工智能时代高等教育变革探索[J]. 中国教育技术装备, 2020(20): 3-4, 7.
- [2] 贾保先. 人工智能时代高校教师职业发展路径探析[J]. 职教发展研究, 2019(3): 53-57.
- [3] 顾峰, 由园, 芦宏, 张丽, 于岩, 樊丽权. 基于应用型人才培养模式的计算材料学课程教学改革[J]. 高师理科学刊, 2025, 45(5): 101-104.
- [4] 高旺, 李昕. “计算材料学”课程教学改革探 [J]. 武汉轻工大学学报, 2024, 43(4): 103-107.
- [5] 李宜江. 人工智能时代教师的使命及其角色扮演[J]. 教师发展研究, 2023, 7(3): 68-73.
- [6] 翁伟斌, 李敬来. 人工智能时代教育的应对[J]. 教育理论与实践, 2020, 40(25): 3-7.