

建设基于学术创新的融合式“材料设计理论与应用”课程

王清¹, 李震², 于丽梅³, 康慧君¹, 杜立辉¹, 董闯¹

¹大连理工大学材料科学与工程学院, 辽宁 大连

²大连理工大学机械工程学院, 辽宁 大连

³大连理工大学化工学院, 辽宁 大连

收稿日期: 2022年4月20日; 录用日期: 2022年5月19日; 发布日期: 2022年5月26日

摘要

材料设计(即材料基因组计划)是解决当前材料领域“卡脖子”问题, 提升先进材料研发能力和应用水平的关键。面向国家重大战略需求, 培养践行自主创新的高水平人才至关重要。在“材料设计理论与应用”研究生课程中, 以融合式教学理念为指导, 将材料设计理论经典实例和高水平科学研究应用成果集成教学案例库。在课程教学中, 将课堂讲授、线上教学平台案例拓展学习与学生材料设计课程论文并行, 达成学科学术前沿与课程体系的融合, 课程教学线上与线下学习的融合, 创新思维训练与学生探究式学习的融合, 形成以高质量精英人才培养为目标的课程融合式教学。

关键词

材料设计, 科教融合, 学术创新, 案例应用

Construction of the Integrated “Material Design Theory and Application” Course Based on Academic Innovation

Qing Wang¹, Zhen Li², Limei Yu³, Huijun Kang¹, Lihui Du¹, Chuang Dong¹

¹School of Materials Science and Engineering, Dalian University of Technology, Dalian Liaoning

²School of Mechanical Engineering, Dalian University of Technology, Dalian Liaoning

³School of Chemical Engineering, Dalian University of Technology, Dalian Liaoning

Received: Apr. 20th, 2022; accepted: May 19th, 2022; published: May 26th, 2022

文章引用: 王清, 李震, 于丽梅, 康慧君, 杜立辉, 董闯. 建设基于学术创新的融合式“材料设计理论与应用”课程[J]. 教育进展, 2022, 12(5): 1678-1684. DOI: 10.12677/ae.2022.125260

Abstract

Materials design (*i.e.*, the Materials Genome Project) is the key to solving the current “stuck neck” problem in the field of materials and improving the research and development ability and application level of advanced materials. In order to meet the national strategic needs, it is important to cultivate high-level talents who practice independent innovation. In the graduate course of “Material Design Theory and Application”, the classic examples of material design theory and the application results of high-level scientific research are integrated into the teaching case library under the guidance of the integrated teaching concept. The classroom teaching, the case expansion learning of the online teaching platform and the students’ course paper of material design are carried out synchronously during the course teaching. Through this teaching method, we can achieve the integration of academic frontier and curriculum system, online and offline learning of curriculum teaching, innovative thinking training and students’ inquiry learning, and form a curriculum integrated teaching with the goal of cultivating high-quality elite talents.

Keywords

Material Design, Science-Education Integration, Academic Innovation, Case Application

Copyright © 2022 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

发展先进材料是高端制造业强国战略的物质基础，是高新技术发展的先导。其中，材料设计，即2011年全球启动的“材料基因组计划”，是大幅度提升新材料研发能力和应用水平的关键。它以变革传统离散型的、经验试错法的研发模式，建立理论(计算)/实验/数据库相融合、协同创新的研发方法为基本理念，以揭示基本单元元素组合-组织结构-基本性质之间的内禀关系为基本科学内涵，洞察材料基本物性、发现新材料、预测新效应、实现材料按需设计。我国新材料研发和应用起步较晚、基础较弱、投入有限，虽进步很快，但整体水平与先进国家仍有较大差距，尤其在国家重大工程及国家安全领域，其主要表现为原始创新能力较差、整体研发能力不强、核心技术和知识产权的缺乏。因此，在材料科学的发展形势与国家高端技术自主创新的背景下，为材料、机械及化工领域培养材料设计方向的精英人才显得日益重要。

大科学时代，科研、教学和工程应用紧密的关联是当代高等教育改革的核心与共识。2020年，教育部针对研究生教育发布《关于加快新时代研究生教育发展的意见》，其中指出要瞄准科技前沿，深化科教融合以加强研究生知识创新和实践能力的培养，以超常规方式加快培养一批紧缺人才，为国家解决“卡脖子”问题和推进科技创新做出贡献。为此，在双一流高校中，与材料设计相关的课程陆续开设，针对该方向精英人才培养的需求，我校《材料设计理论与应用》研究生课程历经近十年的建设，形成了“从材料设计出发，先介绍材料设计的基本理论与原理，再结合材料设计实际案例阐述理论方法的应用”的课程特色。近年来，为响应习总书记“实现两个一百年奋斗目标，必须坚持走中国特色自主创新道路”的号召，推动研究生教育的高质量、内涵式发展，《材料设计理论与应用》课程进行了内容优化与教学模式、手段及考核评价等的全方位改革，将材料设计方法和先进材料研发的科学研究前沿成果嵌入到课

成教学中，基于学术创新思维培养，形成了独具特色的研究生课程的科教融合。

2. 基于学术创新的课程教学与科学研究融合

2.1. “材料设计理论与应用”教学案例库

《材料设计理论与应用》课程涉及的材料设计方法包括一系列经典理论方法如第一性原理模拟计算(密度泛函方法等)、分子动力学、相场模拟、有限元分析等方法，还包括近年来在新材料研发和性能预测方面展现出独特潜力的机器集成学习方法以及作者课题组研创的，隶属于材料结构和成分基因的团簇结构及团簇式成分设计方法等。上述材料设计方法的综合运用可建立材料成分与组织和性能的关联，能大幅提升先进材料的研发效率，是课程的核心教学内容。

材料设计理论方法涵盖了从纳观→细观→宏观的多尺度模拟计算方法。而每种理论方法是一大类，又有许多细分的方法。因此，有限的课堂教学中将理论原理、方法及应用的细节都逐一讲授成为课程的教学难点所在。在实际教学中，结合具体案例来阐明材料设计理论、方法及应用显得尤为重要。经过多年积累与优化，围绕常用的六大材料设计理论，为每种理论、方法精选、编撰 3~5 个典型案例，形成可嵌入线上教学平台的教学案例库，部分案例示例如图 1 所示。材料设计教学案例库既包含设计方法的经典案例，又包含与材料领域高水平研究成果相关的应用实例。

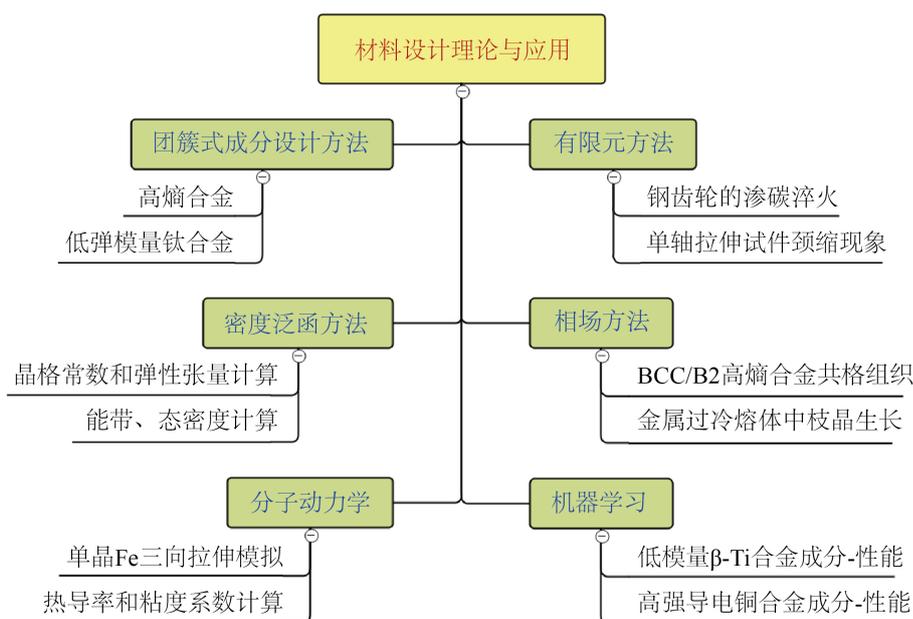


Figure 1. The structural framework of the teaching case library and some examples of teaching cases

图 1. 教学案例库的结构框架和部分教学案例示例

以“团簇成分式嵌入的机器学习低模量 β -Ti 合金成分与性能”科学研究前沿成果教学案例为例，介绍一下按照“研究背景 - 设计瓶颈问题 - 优化及解决办法”的模块化模式构建的教学案例。

2016 年，Nature 期刊报道了美国哈佛福德学院 Raccuglia 等人的研究工作[1]，通过机器学习失败或不成功的实验数据建立了无机 - 有机杂化材料结晶过程反应模型，并预测了新化合物的形成条件，预测精度可达 89%，这意味着机器学习方法有望改变传统的材料研发方式；此后，机器学习得到了国内外材料研究学者们的广泛关注，并应用于不同领域的研究中。然而，对于高性能复杂工程合金成分与性能的

机器学习, 由于各合金体系数据库多为小样本空间集, 只单独采用机器学习方法构建合金成分-性能关联时, 精确度不够高。因此, 研究者们将机器学习与给定体系中的一些特征物理和冶金参数相结合, 大大增强了机器学习方法的预测能力。目前, 这些特征参数大多用来表征合金的微观组织结构特性, 还未见有与合金成分关联的参数。由此, 合金体系成分关联是设计的瓶颈问题。

我们将团簇成分式作为成分特征参数嵌入到机器学习中, 结合表征合金 BCC- β 结构稳定的特征参数 MO 当量 MO_{eq} , 在成分 \rightarrow 性能的正向设计(Loop I)中, 如图 2 所示, 采用多种算法(如极限梯度提升 XGBoost 等)学习合金成分与性能之间的关系 $E = f(c_i)$, 以确定适用于该体系的最佳机器学习模型; 而在性能 \rightarrow 成分逆向设计(Loop II)中, 利用遗传算法(GA)对合金成分进行寻优; 由于一个目标值会给出很多组合合金成分, 如给定弹性模量为 $E = 55$ GPa 时, 机器学习模型可预测出 85 个合金成分, 大大增加了搜索最优合金成分的复杂性和实验验证的难度; 为解决此难题, 利用团簇成分式作为约束条件, 用以限制组元间的添加量及其相互匹配, 这样在给定任一弹性模量值时, 机器学习模型只需预测出 3~5 个合金成分, 极大降低了逆向设计合金成分的复杂性。更重要的是, 机器学习模型的预测结果有配套的实验验证, 实验结果表明测试的预测合金的弹性模量与机器学习模型计算值高度一致。该案例体现了合金团簇成分式嵌入到机器学习模型中的优越性[2]。

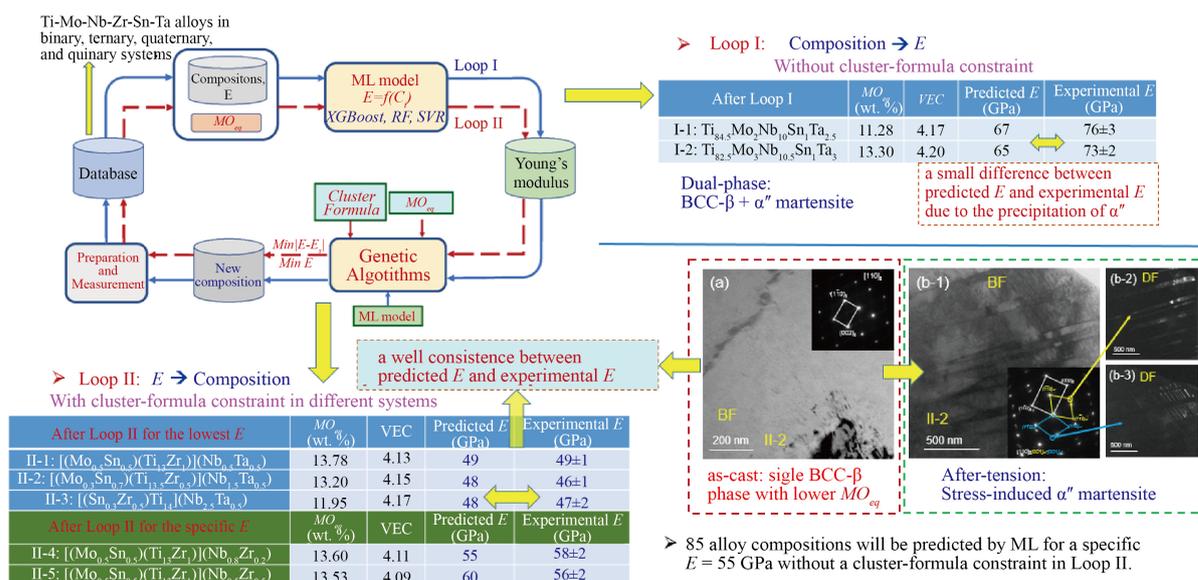


Figure 2. Schematic diagram of machine learning composition-property cycle for low elastic modulus β -Ti alloys

图 2. 低弹性模量 β -Ti 合金的机器学习成分-性能循环示意图

该前沿学术成果改编的教学案例, 环环相扣地实景展现给学生理论模拟与实验结合如何实现高性能合金设计, 机器学习方法核心思想及其预测精度提高与计算方法选择内在关联。一个案例, 将几部分的课程教学内容串联, 亦使研究生将材料设计理论计算与实验相结合提升研发效率的研究思想入脑入心, 课程核心教学的知识传授和更高层次的研究思想方法一并通过案例传递。

目前, 材料设计教学案例库已完成了 20 个具体教学案例。在课堂授课中只选用具有典型意义和代表性的案例来让学生理解各类理论方法的设计思路、方法、研究流程等, 但所有案例均上传在“大连理工大学金课建设平台”——《材料设计理论与应用》课程下, 选课学生们可随时就教学案例进行线上观摩学习和讨论, 课程教学内容大大丰满, 同时提高了课程知识体系的深度和广度。

2.2. 材料设计典型案例的微视频

限于 AI 时代的材料设计软件众多与授课课时有限, 学生们很难在短时间内熟练掌握材料设计的基本理论、方法及其应用。将现阶段发表在材料领域顶刊的、与材料设计理论密切相关的高水平最新研究成果凝练总结, 按照团簇式成分设计、第一性原理密度泛函计算、分子动力学、相场模拟、有限元分析和机器学习法分类, 将涵盖从微观到宏观的多尺度计算的算例以微视频形式拍摄成教学资源, 上传到课程线上平台。线上的不同材料设计算例的微视频, 与线下课堂授课相呼应, 让研究生们真正掌握材料设计原理、模拟方法, 并学会如何综合优化不同方法将其应用到自己的研究课题中。

以“多组元合金中 BCC/B2 共格组织”微视频为例, 说明微视频的组织建设思路。有序相纳米粒子在无序固溶体基体上的共格析出是高温合金的特有微观组织, 例如球形或方形 L12- γ' 纳米粒子在面心立方 FCC- γ 基体上的共格析出使得 Ni 基和 Co 基高温合金具有优异的抗高温蠕变性能。然而, 由于有序 B2 相与体心立方 BCC 固溶体相之间大的成分差异使得很难实现对 BCC/B2 共格组织调控; 这需要在多组元体系中, 合理匹配 BCC/B2 两共格相的成分, 以获得适当的点阵错配度。我们利用团簇式成分设计方法在 Al-Fe-Co-Ni-Cr 多主元高熵合金体系中设计系列合金成分, 获得了三种典型形貌的共格组织: 球形、方形纳米粒子及编织网状的调幅分解组织。基于 Chan-Hilliard 方程, 利用 COMSOL Multiphysics 软件建立该体系高熵合金相场模型, 研究 BCC/B2 共格组织的动态演化行为, 结果表明不同共格组织的形成主要受控于 BCC/B2 相的点阵错配度和弹性模量各向异性[3], 如图 3 所示。不同共格组织形貌会对合金的宏观性能产生影响, 由此, 在该系列中, 方形 B2 纳米粒子在 BCC 基体上共格析出使得高熵合金在高温下表现出优异的力学性能, 而球形 BCC 纳米粒子在 B2 基体上共格析出会使得合金展现优异的软磁性能 [4]。

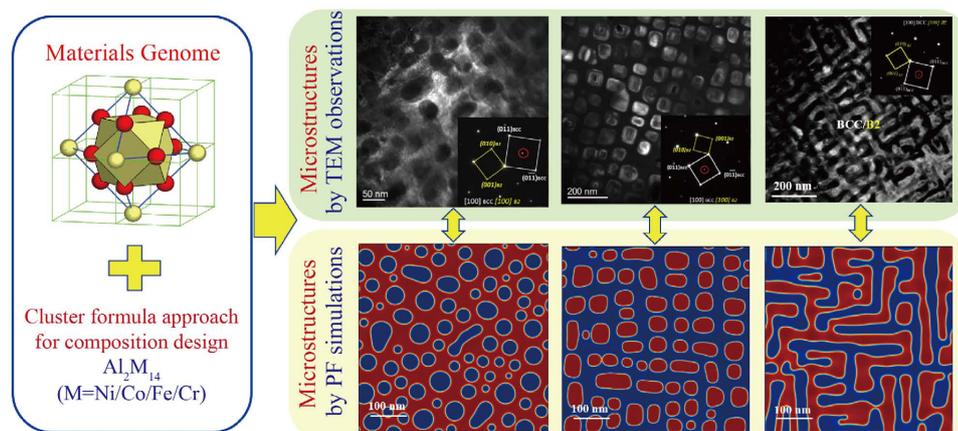


Figure 3. Design and phase field simulation of BCC/B2 coherent microstructure in Al-Fe-Co-Ni-Cr high-entropy alloy [3]

图 3. Al-Fe-Co-Ni-Cr 高熵合金中 BCC/B2 共格组织设计与相场模拟[3]

微视频案例可以将案例研究背景的图、文和动态结构, 案例研究思路, 计算软件参数设置, 动态模拟过程, 研究者的分析、解析案例过程和结论凝练过程依次展现给学习者, 将软科学的思维过程呈现出来, 可以极大地提高学习效果, 实现学术创新思维的传递。

2.3. 教学案例的应用实践

课程体系和内容通过基于学术创新实现科教融合, 在课程教学实施中通过教学案例库和微视频教学

资源建设和应用实现线上、线下教学融合。在课程的考核评价中,突出设计考察学生实际操作和研究思维、创新能力等教学目标的考核作业。学生考核大作业按照学期循序渐进,具体过程如下:指导学生查阅与自己课题相关文献(第五周前完成);以小组形式进行讨论和分析现有文献中给定的材料设计算例,给出具体设计方案,并计算机模拟论证,重现文献中的算例(第九周前完成);同学之间、师生之间就模拟计算结果分析,提出修正方案或者深入研究方向及实施方案;最后学生总体归纳前期工作后,以固定模板撰写课程大论文(课程考试周前线上课程平台提交完成)(具体流程见图4)。

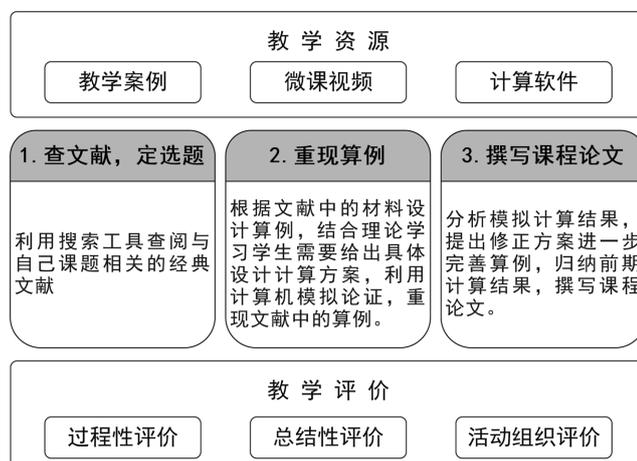


Figure 4. A blended teaching model based on teaching cases
图4. 基于教学案例的混合式教学模式

学生课程考核论文部分正在逐步积累、完善中。学生的课程考核作业可作为拓展案例储备,优化完善的题目可纳入课程教学案例库。教学考核实践,既使得研究生们学习材料设计方法、模拟计算机软件,又进一步融会贯通所学材料设计方法;通过让学生们开展自主探究学习,潜移默化地强化学生研究思维的养成。以教学案例和微视频教学资源支持,以研究生课程教学质量提升为目标,实现知识传授和能力培养的教学融合实践,期望形成研究生课程教学改革可借鉴的范式。

3. 结语

基于学术创新的“材料设计理论与应用”课程建设,课程体系和内容的科教融合,拓宽了知识的深度和广度,使得课程高阶教育目标有了坚实的基础。基于材料设计教学案例和高水平研究成果微视频的教学资源建设,为课程教学实现线上、线下融合教学提供支撑,为推进式、实操型课程考核办法的实践提供保障。通过课程综合改革,实现课程低阶知识传授目标与高阶教学目标——学生的自主探究学习,强化研究思维训练等融合。

研究生课程教学质量提升和实现内涵式发展在高等教育体系改革中十分重要。研究生学术研究思维养成和创新能力提高是国家战略达成的重要保障。《材料设计理论与应用》课程的建设 and 改革实践形成了初步的经验,今后结合国家材料科技领域的重大需求和人才储备需要,将进行深入的探索和实践,并将成熟的素材推广到本科生的《材料科学基础》专业必修课程。

基金项目

大连理工大学研究生教改基金资助项目“材料设计理论课程的科教融合与学术创新实践”(编号: JG_2021041);教育部高等教育司产学研协同育人项目“材料设计与工程应用的产教一体化改革”(编号:

202102379005)。

参考文献

- [1] Raccuglia, P., Elbert, K.C., Adler, P.D., Falk, C., Wenny, M.B., Mollo, A., Zeller, M., Friedler, A.A., Schrier, J. and Norquist, A.J. (2016) Machine-Learning-Assisted Materials Discovery Using Failed Experiments. *Nature*, **533**, 73-76. <https://doi.org/10.1038/nature17439>
- [2] Yang, F., Li, Z., Wang, Q., Jiang, B.B., Yan, B.J., Zhang, P.C., Dong, C. and Liaw, P.K. (2020) Cluster-Formula-Embedded Machine Learning for Design of Multicomponent β -Ti Alloys with Low Young's Modulus. *NPJ Computational Materials*, **6**, Article Number: 101. <https://doi.org/10.1038/s41524-020-00372-w>
- [3] Li, J.L., Li, Z., Wang, Q., Dong, C. and Liaw, P.K. (2020) Phase-Field Simulation of Coherent BCC/B2 Microstructures in High Entropy Alloys. *Acta Materialia*, **197**, 10-19. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2020.07.030>
- [4] Ma, Y., Wang, Q., Zhou, X.Y., Hao, J.M., Gault, B., Zhang, Q.Y., Dong, C. and Nieh, T.G. (2021) A Novel Soft-Magnetic B2-Based Multiprincipal-Element Alloy with a Uniform Distribution of Coherent Body-Centered-Cubic Nanoprecipitates. *Advanced Materials*, **33**, Article ID: 2006723. <https://doi.org/10.1002/adma.202006723>