

Application of Data Visualization in the Teaching of Amorphous Structure

Yongchao Liang*, Gang Xian

School of Big Data and Information Engineering, Guizhou University, Guiyang Guizhou
Email: *20113248@qq.com

Received: Aug. 4th, 2020; accepted: Aug. 19th, 2020; published: Aug. 26th, 2020

Abstract

Data visualization technology is widely used in the field of scientific research, but its application in the field of education is obviously insufficient. As a result, how to apply data visualization technology in education and teaching has been widely concerned by international and domestic scholars. Based on domestic teaching materials, this paper summarizes the problems faced by amorphous structure in teaching, and introduces data visualization technology to enrich the explanation of amorphous structure in teaching materials. It compares the differences between amorphous structure and crystal structure to deepen students' understanding of amorphous structure. Using 3D visualization and animation to display amorphous structure greatly expands students' horizon, and enriches teaching content without adding learning tasks. It can improve students' interest and efficiency in learning abstract amorphous structure.

Keywords

Data Visualization, Teaching of Amorphous Structure, Amorphous Formation, Microstructure

数据可视化在非晶结构教学的应用

梁永超*, 先 刚

贵州大学大数据与信息工程学院, 贵州 贵阳
Email: *20113248@qq.com

收稿日期: 2020年8月4日; 录用日期: 2020年8月19日; 发布日期: 2020年8月26日

摘 要

数据可视化技术广泛应用于科学研究领域, 但是在教育领域的应用却明显不足, 这种环境下, 如何将数
*通讯作者。

据可视化技术应用于教育教学, 受到了国内外学者广泛关注。本文以国内教材为基础, 总结非晶结构在教学中面临的问题, 并引入数据可视化技术丰富教材中对非晶结构的讲解, 对比非晶与晶体结构的差异以加深学生对非晶结构的理解。采用三维可视化图及动画展示非晶结构, 极大地拓展学生视野, 在不增加学生任务的前提下丰富教学内容, 提升学生对抽象非晶结构的学习兴趣和效率。

关键词

数据可视化, 非晶结构教学, 非晶形成, 微观结构

Copyright © 2020 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

按材料结构划分, 固体材料可分为非晶体、晶体以及介于非晶体与晶体之间的准晶体三大类。晶体材料研究时间较早, 因此在结构的研究上较完整, 可用七个晶系十四个布拉菲格子三十二个空间点群描述晶体结构。但相对于无序无规则结构的非晶材料来说, 研究开始时间较晚, 且原子排列没有周期性, 即原子的排列从总体上是无规则的, 但是近邻原子的排列又具有一定的规律。因此, 单从理解上, 非晶结构的教學存在诸多困难。

作为材料学研究重点之一, 很多教材中都有提到, 教学中也作为重点讲解对象, 国内的教材中以王绪威主编[1]高等教育出版社出版的《非晶态材料及应用》、惠希尔和陈国良主编[2]化学工业出版社的《块体非晶合金》、徐勇和于美杰[3]主编化学工业出版社的《非晶态合金原子结构及结晶动力学》等为主, 其中最经典的教材以及最受欢迎的是黄昆主编[4]高等教育出版社出版的《固体物理学》也涉及非晶结构的教學内容。在这些教材中, 从非晶材料的结构、非晶固体特性、非晶材料应用等多个方面详细介绍了非晶材料。

教材在学生學習知识的过程中起到理论引入作用, 但非晶结构长程无序的特点导致非晶结构比较复杂, 想要在教材的基本概念上引入更加生动形象的拓展对教學提出巨大挑战。教學的核心关注点是学生对知识的掌握水平, 由于常年教學, 教师对知识有足够的掌握往往会认为学生也能轻松理解, 为了节约时间而忽略学生的学习和知识掌握状况。例如: 长程无序, 学生对“无序”有基本印象却对“长程”没有任何概念, 老师也疏于基本知识的详解。基础薄弱的学生对知识理解不足, 久而久之对理论知识感到枯燥无味, 失去學習兴趣, 缺乏學習主动性, 这有悖于“兴趣引导學習”的教育理念。

传统教學限制多。非晶结构的讲解离不开原子间的相互作用以及运动规律, 这些只有在一个三维空间中才能更好地描述清楚非晶结构的动态形成过程。对于一些隐晦难懂, 理论性强的知识点, 采用传统“粉笔 + 黑板”或者单纯的“PPT + 白底黑字”很难让学生掌握知识, 对定理、专业名词、公式没有深刻的体会, 于是学生只会在“难, 学不会”与“不想学”之间形成恶性循环。

多媒体教學无疑是教學改革深入发展的重要组成部分, 它可以把文本、图形、声音、图像、动画、视频等多种信息集成在一起[5], 把用语言文字和静态二维画面难以描绘出的空间结构, 生动地描绘出来。在非晶结构的教學中, 作为一名研究多年非晶结构形成及演变的教师, 结合自身研究方向, 借助可视化技术优化教學内容。采用计算机从原子角度模拟非晶结构的形成过程, 再通过可视化技术制作出动态过程, 同时描绘出非晶结构的短程、中程、长程微观结构, 做出“模拟示意图”, 这对非晶结构的讲解十

分有利。故使用数据可视化方法, 将各种非晶结构理论知识简化到图中展示, 以图解释非晶各种专业名词和知识, 让学生可以更容易理解非晶结构。

2. 可视化对教学的调整

采用计算机模拟原子间的相互作用和关系, 将获取的微观结构信息通过数据可视化在三维立体图上展现出来是研究材料微观结构的常用方法之一。在不增加学习任务的前提下, 引入三种简单易懂描述非晶结构的研究方法, 以增强学生的学习兴趣和学习积极性, 将抽象概念转换为简单的二维图像和立体图像分析, 在图像中了解非晶微观结构和解释基本概念, 拓展学生视野。

文中的数据是用分子动力学模拟方法, 模拟在 1×10^{12} K/s 高冷速下的快速凝固过程获取的, 其中非晶体数据来自 $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{60}$ 合金, 晶体数据来自 $\text{Fe}_{10}\text{Ni}_{90}$ 合金。

2.1. 双体分布函数可视化图

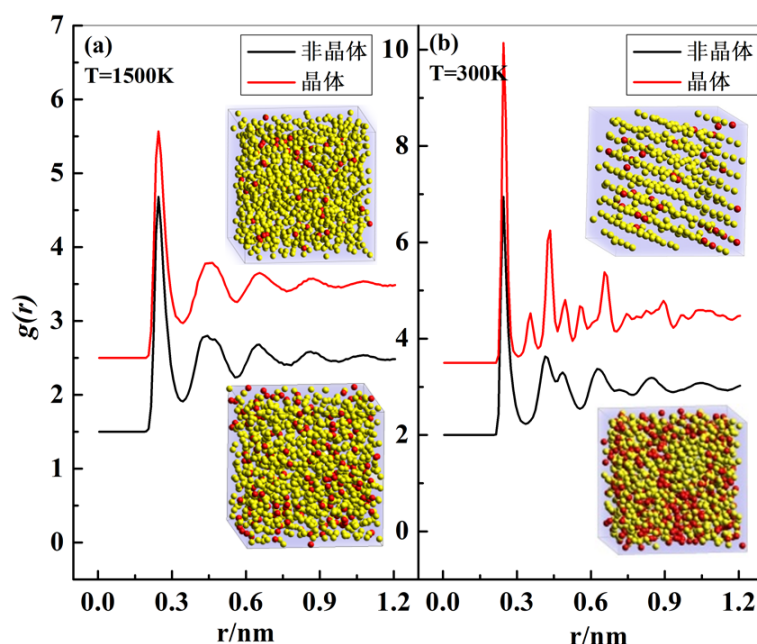


Figure 1. The pair distribution function curves of amorphous and crystal materials at 1500 K (a) and 300 K (b)

图 1. 非晶和晶体材料在 1500 K (a)和 300 K (b)时的双体分布函数

双体分布函数作为材料学基本分析方法之一, 通常被教材引用来描述材料的原子统计信息[6]。双体分布函数是指以原子为中心, 半径在 r 到 $r + dr$ 球壳内的平均原子数, 可以了解到该函数是对所有原子统计平均的结果, 其图像中峰与坐标轴围成的面积表示中心原子周围的近邻原子数目。

对于非晶结构的原子分布的统计信息结合双体分布函数, 让学生加深对非晶结构的理解。如图 1 所示, 非晶与晶体材料在半径 r 上的原子分布概率明显不同。在 1500 K 的初始温度下, 晶体和非晶的原子排列都比较混乱, 看不出区别, 而 $g(r)$ 函数曲线也差不多一致。经过快速凝固降温到 300 K 时, 晶体和非晶的原子排列出现明显区别, 晶体变得长程有序, 而非晶仍然看起来和初始温度下的排列一样混乱, $g(r)$ 函数也出现了明显的差异, 晶体出现很多尖锐的分峰, 非晶第二峰分裂。通过这样的对比, 学生不仅可以了解双体分布函数的分析方法, 而且还可以深刻体会到晶体和非晶的差异, 使得学生对非晶的理解更深入。

2.2. 非晶与晶体能量可视化对比

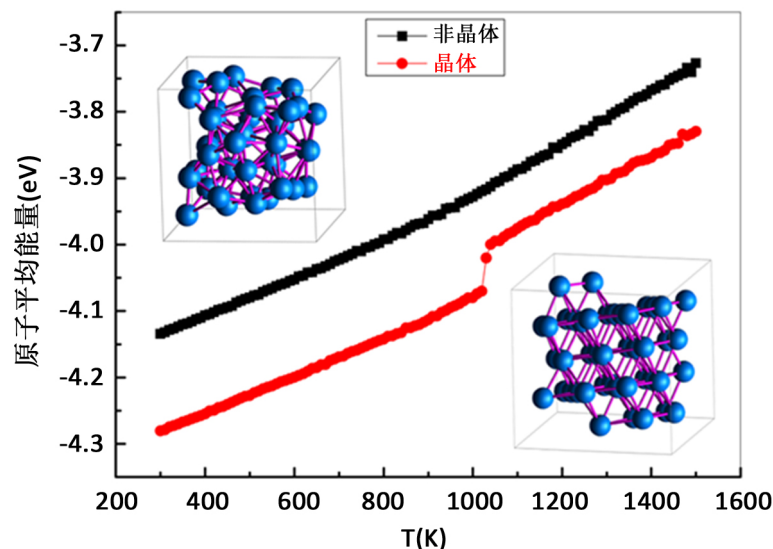


Figure 2. Average potential energy of atoms in amorphous and crystal materials evolves with Temperature

图 2. 非晶和晶体中的原子平均能量随温度的变化

作为一种简单且有效的分析手段,系统的原子平均能量随温度的变化能真实客观地反映快速凝固过程中系统微观结构的变化规律[7]。如图 2 所示,非晶和晶体从 1500 K 的高温液态逐渐凝固,最终在 300 K 凝固成固体时的原子平均能量变化,可以看到两者区别明显。在实际的应用中,晶化的过程会伴随着相变,即能量突变,而非晶的能量变化趋向于线性。为了让学生更好的理解这个应用,特地把能量对应的局域结构图可视化出来,可以清晰的观察到非晶结构中原子的空间分布信息,有助于具体分析和讲解。在实际教学中可以让学生更多的了解两者的区别,加深对非晶结构的理解,同时这是实际研究的应用,可以帮助学生了解材料学的研究方法。

2.3. 非晶结构可视化演示

在很多教材中,对非晶结构的短程有序性和长程无序性概念主要通过二维的结构切面图来描述,难以观察到非晶结构的三维空间结构特点,可以通过使用三维的可视化图来描述空间中的微观结构信息。视频是描述非晶微观结构最有效,最形象的方法,采用一个小视频来动态描述非晶结构动态变化将会极大的激发学生学习兴趣和学习积极性,引入视频教学对非晶结构的教有重大意义。

将计算机模拟出的原子分布数据导入可视化软件 Ovitto,可以自动生成动态的原子运动信息,虽然该可视化软件不能具体地描述非晶瞬间的空间结构,但是对于教学仍然有很大的启发作用。它将静态的原子分布信息转换为动态信息,对于学生而言,可以开阔学生的视野,打破了对知识似懂非懂的“凭空想象”,对培养学生的创新思维能力有提升效果。

如图 3 的晶体形成动画截图所示,晶体在 1500 K 的高温液态时,原子散乱分布在空间中,但是在凝固过程中的某一温度开始,晶体开始凝固形成亚稳定结构,然后迅速形成以 fcc (如图 5 所示)为主的晶体结构,这个时候可以通过最终的结构组态给学生解析什么叫长程有序。如图 4 的非晶形成动画截图所示,原子从散乱分布在空间慢慢聚合一起,非晶没有来得及形成稳定结构就被冻住形成亚稳态结构,以局域有序的 ico (如图 5 所示)为主,但整体还是呈现无规则分布,这时可向学生解析什么叫长程无序和短程有

序结构。因此，凝固状态下的非晶结构在短程即在几个中心原子间的排列有一定的有序规则，当离中心原子距离较远后，非晶原子排列无有序规则，而晶体材料中的原子排列同样有序。

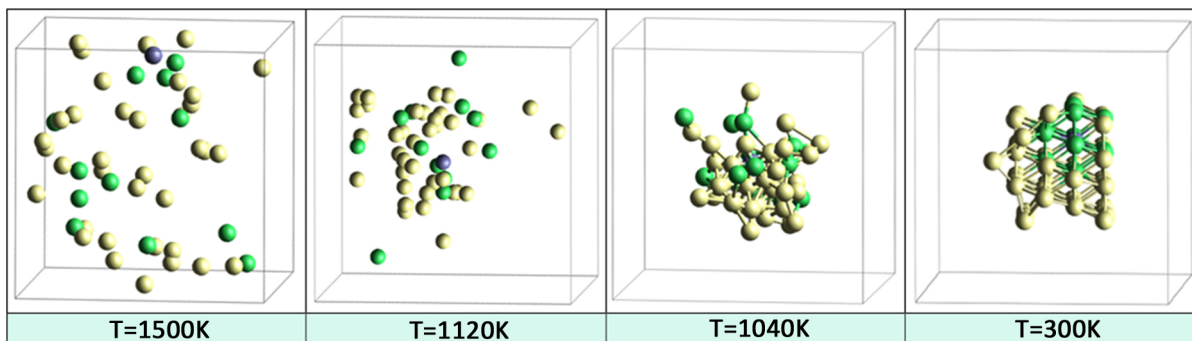


Figure 3. Screenshot of crystal material during dynamic solidification process from 1500 K to 300 K. (Purple atoms are fcc central atoms, green atoms are nearest neighbors, yellow atoms are others)

图 3. 晶体材料从 1500 K 到 300 K 动态凝固过程截图(紫色原子是 fcc 中心原子，绿色原子是其外围原子，黄色原子是其它原子)

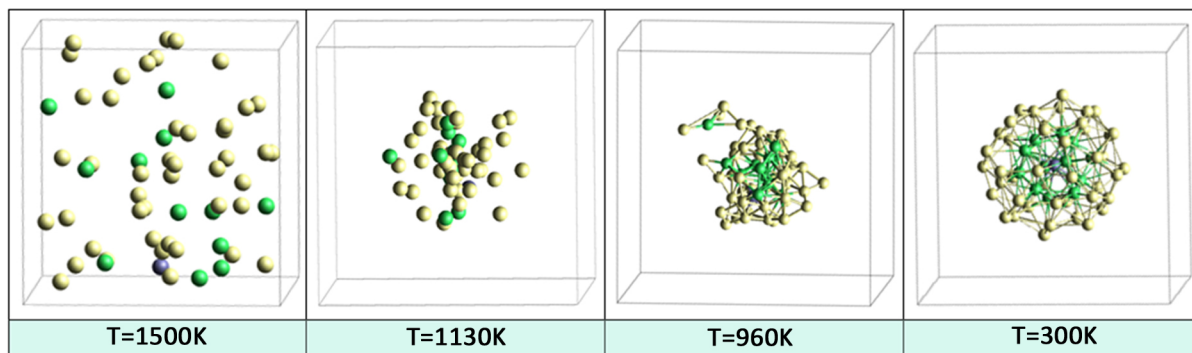


Figure 4. Screenshot of amorphous material during dynamic solidification process from 1500 K to 300 K. (Purple atoms are fcc central atoms, green atoms are nearest neighbors, yellow atoms are others)

图 4. 非晶材料从 1500 K 到 300 K 动态凝固过程截图(紫色原子是二十面体中心原子，绿色原子是其外围原子，黄色原子是其它原子)

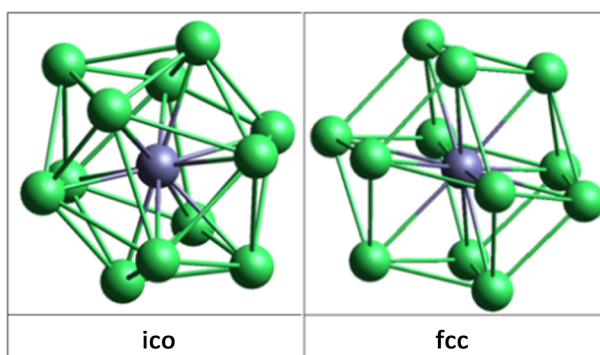


Figure 5. The microstructures of Icosahedron and Face Center Cubic

图 5. 二十面体 ico 结构和 fcc 结构

从这个动画中可给学生讲解非晶和晶体的原子平均能量图和双体分布函数为何区别如此之大，让学生对非晶结构的形成有一个更加深入的了解。

3. 教学成果总结

用有关非晶结构的各种可视化图,以直观、形象、动态的方式详细讲解抽象的理论知识。同时,通过这种方式将有效降低讲解非晶结构知识点的难度,也给教师的教学提供新思路,不再局限于传统多媒体的抽象理论知识讲解。将数据可视化技术应用于非晶结构的讲解,丰富了非晶结构教学内容。根据学生反映,有趣的动画展示极大的提高学生的兴趣,学生表示更愿意以这种方式去接受新的知识。文中提到了几种非晶材料研究的手段,学生反映这有利于拓展眼界,开阔视野,最重要的是拉近与材料学研究的距离,让科学不再那么神秘。

4. 小结

非晶结构的讲解难度大,首先是教学内容难度大,理论知识抽象,学生反映课堂内容枯燥无味,缺乏学习兴趣。其次,传统教学限制多,多媒体教学应用不足,这对学生知识的拓展、理解能力的提升有巨大阻碍。为提高学生学习效率,降低讲解非晶结构的难度,教师可以利用数据可视化技术,引入材料学研究方法即双体分布函数以及原子平均能量图,既不增加课堂内容难度又很大程度上丰富教学内容。除此之外,运用层次分明,富含教学信息的非晶和晶体三维可视化图,给学生视觉冲击力,能极大地吸引学生学习兴趣,增强学生学习自主性。非晶结构可视化演示也让学生了解到非晶结构的形成过程是一个随温度降低从无序到短程有序的过程,让学生对非晶结构的形成有一个清晰的思路。总之,利用数据可视化技术是讲解非晶结构特点的新思路,也是一次有效的尝试。

基金项目

国家自然科学基金(11964005)。

参考文献

- [1] 王绪威. 非晶态材料及应用[M]. 北京: 高等教育出版社, 1992.
- [2] 惠希尔, 陈国良. 块体非晶合金[M]. 北京: 化学工业出版社, 2007.
- [3] 徐勇, 于美杰. 非晶态合金原子结构及结晶动力学[M]. 北京: 化学工业出版社, 2015.
- [4] 黄坤著, 韩汝琦, 改编. 固体物理学[M]. 北京: 高等教育出版社, 1988.
- [5] 李克东, 黄晓地, 谢幼如. 多媒体技术教学应用[M]. 北京: 电子工业出版社, 1996.
- [6] Haile, J.M., Johnston, I., Mallinckrodt, A.J. and McKay, S. (1993) Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods. *Computers in Physics*, **7**, 625. <https://doi.org/10.1063/1.4823234>
- [7] Ahmed, E., Akhter, J.I. and Ahmad, M. (2004) Molecular Dynamics Study of Thermal Properties of Noble Metals. *Computational Materials Science*, **31**, 309-316. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2004.03.020>