

AI-empowered instructional innovation in computational materials science courses

Chuanlong Wang Mengyu Zhu Xiaoxiao Huang Jiangyun Zheng

Anqing Normal University, Anqing, Anhui, 246133, China

Abstract

Under the backdrop of the development of new engineering disciplines and the digital transformation of education, the course of computational materials science is confronted with teaching bottlenecks such as theoretical abstraction, high practical thresholds, and rapid knowledge iteration. In response to these issues, this study systematically explores the ways in which artificial intelligence (AI) can drive innovative teaching in this course. The article first analyzes the current situation and challenges of the computational materials science course, then explains the empowering advantages of AI technology in knowledge visualization, practical lightweighting, and personalized teaching, and finally proposes specific methods and implementation strategies for the deep integration of AI and computational materials science teaching from three dimensions: reconstructing the curriculum system, innovating teaching models, and optimizing practical platforms and evaluation systems. The goal of this research is to provide a systematic solution and practical reference for addressing the existing problems in the teaching of computational materials science and cultivating compound innovative talents with both materials science knowledge and AI application capabilities.

Keywords

AI; computational materials science; instructional innovation; new engineering; digital transformation

人工智能赋能计算材料学课程教学创新研究

王传龙 朱梦钰 黄晓晓 郑江云

安庆师范大学, 中国·安徽 安庆 246133

摘要

在新工科建设以及教育数字化转型的大背景下, 计算材料学课程面临理论抽象, 实践门槛较高, 知识迭代迅速等教学瓶颈。针对这些问题, 本研究系统地探究人工智能推动课程教学实现创新的途径。文章首先解析计算材料学课程的现状以及面临的挑战, 然后说明人工智能技术在知识可视化, 实践轻量化, 教学个性化等方面具备的赋能优势, 最后从重构课程体系, 创新教学模式, 优化实践平台与评价体系这三个维度, 提出人工智能与计算材料学教学深度融合的具体办法及实施策略。本研究的目标在于为解决计算材料学教学方面存在的难题, 以及培育具备材料科学知识 with 人工智能应用能力的复合型创新人才, 提供系统化的解决方案与实践参考。

关键词

人工智能; 计算材料学; 教学创新; 新工科; 数字化转型

1 引言

随着新材料产业成为支撑国民经济先导产业与国防建设的关键, 材料研发模式正经历从经验试错向理论预测与智能设计的深刻变革。计算材料学作为连接材料理论与实验的

桥梁学科, 通过计算机模拟手段实现材料成分、结构与性能的关联分析与预测, 其重要性日益凸显^[1]。然而, 作为一门深度交叉学科, 传统计算材料学课程教学长期存在理论艰深晦涩、软件操作复杂、实验条件受限、教学内容与前沿技术脱节等问题, 难以满足新工科对创新型、复合型人才培养的要求。

近年来, 以大数据、机器学习为代表的人工智能技术迅猛发展, 并加速与材料科学研究融合, 催生了材料基因工程、高通量计算与智能设计等新范式。这为破解计算材料学教学痛点提供了全新视角与技术工具。将人工智能技术系统性融入计算材料学课程教学, 不仅是顺应教育数字化发展趋势的必然选择, 更是深化教学改革、提升人才培养质量、服务国家重大战略需求的关键举措。本研究旨在梳理课程现

【基金项目】 安庆师范大学校级质量工程项目(项目编号: X2025aikc001, 2024aqnujyxm72, 2024aqnujyxm60); 安徽省高等学校省级质量工程项目(项目编号: 2024sx085, 2024cywzy025); 国家级大学生创新创业训练计划项目(项目编号: 202510372041)。

【作者简介】 王传龙(1992-), 男, 中国安徽阜南人, 博士, 讲师, 从事光电功能材料与器件研究。

状,分析人工智能的赋能潜力,并系统构建其赋能教学创新的方法体系,以期对相关课程的教学改革与实践提供理论参考与实践范式。

2 计算材料学课程研究现状

2.1 教学模式传统单一,理论与实践割裂

当前,许多高校的计算材料学课程仍采用以教师为中心、理论讲授为主的传统模式。教学内容侧重于量子力学基础、数值算法原理等复杂理论的推导与阐释,教学手段多依赖板书与多媒体课件^[2]。这种模式导致抽象的理论概念难以直观理解,学生容易陷入枯燥的公式记忆,却无法建立理论与实际材料问题之间的联系。同时,理论教学与上机实践往往安排脱节,有限的实践课时常被软件安装调试、基础操作练习所占据,学生难以进行深入的探究性与设计性学习,理论与实践“两张皮”现象突出。

2.2 实践教学条件受限,创新能力培养不足

计算材料学具有较强的实践性,但是传统的实践教学严重依赖实体计算机房以及像 VASP, Materials Studio 这类专业商业软件,由此衍生出软硬件投入数目大,维护成本高,平台兼容性欠佳等许多情形。由于课时与资源的限制,实验项目大多以验证性质和模仿性质为主要特征,只是对教材案例进行重复操作,缺乏针对真实科研问题或工程需求的具有挑战性的任务^[3]。学生在动手实践时大多仅在软件操作的表层进行,对于计算流程的设计,参数的物理含义,结果的深度解析与阐释这类关键能力的训练存在缺失,而此便限制了他们解决复杂工程问题的能力以及创新思维的培育。

2.3 教学内容更新滞后,与前沿及产业需求脱节

计算材料学是一门正处于迅猛发展进程中的领域,尤其是与人工智能,大数据技术相互交叉融合的时候,产生了众多崭新的方法以及工具,例如机器学习势函数,高通量筛选平台相关的便是。但是课程教材以及教学内容的更新存在较长周期,并且通常处于滞后于学科前沿发展的状态^[4]。在教学过程中,与材料数据库(如 Materials Project)的应用以及机器学习在材料性能预测方面的应用这类新兴内容相关的教学占比较小。这使得学生所掌握的知识体系与当下科研范式以及产业界对“计算+AI”复合技能的需求之间产生落差,进而对人才培养的适配性和竞争力造成影响。

3 人工智能技术赋能优势

3.1 实现知识降维与可视化,破解认知壁垒

人工智能技术,特别是具有可视化与交互特性的部分,能够把计算材料学中很多抽象的原子模型,电子结构以及模拟过程等,以动态,立体且直观的方式进行呈现。比如借助三维可视化以及动画展现分子动力学模拟中原子随时间的运动轨迹,或者利用交互式图表解释能带结构和物性关系,如此便可将很多晦涩难懂的微观机理转化为易于被感知的视觉信息。这在很大程度上削减了学生的认知负担,助力他

们突破数学与物理公式设置的阻碍,能够直观领会“结构-性能”关联的内在本质,进而引发学习兴趣,稳固理论方面的基础。

3.2 推动实践教学轻量化与智能化,拓展学习边界

人工智能技术能够搭建虚拟仿真实验平台以及云端计算环境,在此情况下,学生无需在本地安装繁杂的专业软件,借助浏览器即可访问高性能计算资源,从而完成从建模,计算到结果分析的整个流程。此情形打破了时空以及硬件方面的许多限制,达成了实践在形态上的“轻量化”效果。与此同时 AI 可充当智能助手融入平台之中,当学生遇到软件出现报错情况,参数设置不恰当等问题时, AI 能给予实时提示以及相应解决方案,从而降低操作方面的门槛。另外借助开源材料数据库以及 AI 算法,学生能够开展传统情况下无法开展的高通量虚拟筛选,材料性能快速预测这类研究性实践活动,进而极大地拓宽学习的深度与广度。

3.3 支持个性化学习与精准评价,提升教学效能

人工智能能够记录并解析学生在学习平台上的全流程行为数据,比如视频的观看时长,习题解答的正确比率,代码调试的次数,仿真结果的精准程度等等。依据这些数据, AI 系统能够识别每位学生各自存在的知识薄弱之处以及技能欠缺所在,并且可以动态推送出有不同差异的学习资源,练习题目或者拓展案例,从而达成“针对不同资质的学生实施不同教育”的效果。在评价领域当中, AI 能够助力开展过程性评价,它并非仅仅将目光聚焦于最终的报告,还会从多维度,更为客观的角度去评估学生的模型构建逻辑,参数选取的合理性以及数据分析方法等许多方面,从而推动评价方式从单纯的考核朝综合能力评价的方向转化。

4 人工智能赋能计算材料学课程教学创新方法

4.1 重构“基础-融合-创新”三级递进课程体系

课程体系的重构是教学创新的根基。首先,在基础夯实层面,有必要在课程起始阶段全方位新增或强化人工智能与数据分析的基础模块,此举旨在为学生构建稳固的数字素养基础^[5]。这涵盖了对 Python 编程语言核心语法的讲解,以及对科学计算库应用的阐释,对机器学习基本算法原理和实现的细致解析,还有对学生熟练查询并运用 Materials Project 等大型材料数据库的指导。在该阶段的教学当中,需要重突出对工具的把握以及思维的初步启迪,以此促使学生具备对材料数据进行处理的基础能力。

其次在深度融合的阶段计算材料学核心课程开展教学的时期将 AI 知识与传统教学内容进行有机结合与编织。拿讲授密度泛函理论为例,除了呈现其基本原理之外,还需引入机器学习势来加快 DFT 计算或者修正其系统误差这类前沿方法。在分子动力学方面,把“机器学习势函数的开发与应用”相关内容纳入进来,对传统经验势和基于深度学习的势函数在精度,效率以及适用范围等方面的不同之处进行对

比。此阶段教学的目标在于让学生知道，人工智能不只是一个独立的工具，更是能够提升与拓展传统计算方法效能的关键技术。

最后，在创新实践层面而言，去设计高阶的项目式课程或者毕业设计这类环节。学生组建跨学科的小组，选取比如“借助图神经网络对高熵合金相稳定性进行预测”“运用生成对抗网络（GAN）设计新型有机光伏材料分子”这类前沿的课题。项目需要综合运用多尺度模拟，涵盖从密度泛函理论（DFT）直至相场法等方法以及人工智能算法，来达到从对文献开展调研，构建数据集，进行模型训练与优化，开展性能预测到对结果进行分析验证的完整流程。在该阶段其目标在于培育学生的交叉创新思维，并且让他们具备应对复杂前沿科学问题的综合能力，达成从知识学习者向技术应用者以及初步创新者的转化。

4.2 创新“智能预诊 – 沉浸交互 – 研创闭环”教学模式

教学模式的革新是落实课程理念的关键环节。课前借助智慧教学平台布置预习任务，同时依靠 AI 分析预习数据，精准找出教学的重难点所在，以此为教师备课以及学生自主学习提供指引。在课程进行过程中，运用以真实问题或者科研案例作为依据的“翻转课堂”以及“项目驱动”这两种教学方法。教师借助 AI 可视化工具开展生动的原理讲解，学生们在云端虚拟仿真平台中分组协同合作，经历问题界定，方案谋划，模拟运算直至结果解析的整个流程。AI 智能助教能够提供实时的辅助，进而打造出具有沉浸式与交互式特点的学习体验。在课后构建起“计算模拟，实验验证（或与文献进行对比）以及模型优化”的研创闭环。倡导学生将课程项目与毕业论文，创新竞赛相互关联，借助 AI 工具持续对自身的模型及方案开展迭代优化，以此培育科研思维与工程实践能力。

4.3 构建“虚实共生 – 产教协同”的智能化实践与评价生态

通过整合校内校外的各类资源，构建一个智能教学实践平台，该平台集成多尺度计算模拟工具，AI 建模模块以及大型材料数据库。此平台需具备虚实结合的特性，一方面要有高水准且高度逼真的虚拟仿真情况，另一方面还能够与实际实验对接（即数据能够来自实际实验并为之对接）。要深化产教融合，我们可引入企业提供的真实工程案例，技

术难题以及产业数据集，且与企业导师一道共同设计实践项目，以此让学生接触产业前沿领域。在评价体系构建的层面，创设出以知识，能力，素养作为三个维度的评价模型。我们需降低期末笔试的权重，同时加大对项目报告，模型性能，算法创新性，团队协作以及实验设计等方面能力的过程性评价的比重。借助人工智能工具来协助进行作业批改，代码查错以及报告相似性检测工作，以此提高评价的效率，并且将教师评价，同伴互评和企业导师评价相结合，从而形成评价主体以及评价方式的多样化状况。另外将科技报国，工匠精神，学术诚信这类思政元素巧妙地与案例教学以及实践项目相融合，以此达成价值塑造的目标。

5 结语

人工智能技术的蓬勃发展为计算材料学课程教学改革注入了强大动力。面对传统教学的诸多挑战，主动拥抱并深度融合人工智能，是提升课程质量、培养符合时代需求创新人才的必然路径。通过系统性地重构课程内容体系，创新智能化教学模式，构建开放协同的实践平台，并实施科学全面的评价方式，能够有效化解理论认知困难、实践条件局限、前沿对接不足等核心问题。未来，随着生成式 AI、数字孪生等技术的进一步发展，人工智能赋能计算材料学教学的深度与广度将持续扩展。教育工作者需持续更新理念，加强跨学科协同，在推进技术应用的同时关注伦理教育，方能真正构建起虚实共生、学研贯通、智能赋能的育人新生态，为国家新材料战略的实施输送更多拔尖创新人才。

参考文献

- [1] 单斌,陈征征,陈蓉. 计算材料学:从算法原理到代码实现[M]. 华中科技大学出版社,2023.
- [2] 刘艳侠,孙嘉兴,邱巍,王逊. 研究性教学模式的实践研究——以《计算材料学》课程为例[J]. 辽宁大学学报(自然科学版), 2015,42(04):330-337.
- [3] 郁亚娟,郭兴明,陈人杰. 基于混合式教学法的计算材料学系列课程教改实践[J]. 中国材料进展,2021,40(12):1015-1022.
- [4] 高旺,李昕. “计算材料学”课程教学改革探索[J]. 武汉轻工大学学报,2024,43(04):102-107.
- [5] 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(05): 100-104.