

# 《材料信息学导论》课程开设的初步探讨

◆雷毅敏

(西安电子科技大学先进材料与纳米科技学院 710071)

摘要:随着材料科学的发展和因特网的迅速发展,材料信息的数据量非常庞杂,由此产生了一门新兴的交叉学科,即材料信息学。材料信息学涉及到海量材料科学数据的管理、筛选、运用,并最终实现材料信息的资源共享和知识创新、材料科研效率的大幅提升以及新材料研发的经济成本和时间成本的大幅降低。材料信息学的发展有利于解决材料科学面临的挑战,顺应了当代材料科学技术发展的大趋势。然而,材料信息学的发展需要面临很多问题,如何通过开设基础课程来加快信息学人才的培养是关键问题之一。本文将从材料科学材料信息学导论课程的开展展开讨论,探索材料信息学导论课程在教学内容设置和教学方式方面的构想,对未来材料相关专业开设本课程提供一定的思路。

关键词:材料信息学导论;材料科学;课程开设

## 1、引言

随着新材料、新技术、新工艺和新方法的不断出现,材料信息的数据量越来越庞杂。在现如今的新材料研发过程中,如何最大限度地从已有的海量数据中高效、快速、准确的挖掘有价值的信息,并最大限度整合材料信息资源,从而加速新材料的研究进程,是摆在材料研究工作者面前的一道难题。毋庸置疑,材料信息学的发展对中国的材料科学研究具有重要的意义。

材料信息学的发展需要复合型人才,要求对材料科学和计算机科学都比较熟悉。目前材料信息学发展的最大障碍就是材料信息学专业人才匮乏,必须加快我国材料信息学专业人才的培养。在此,可以建议高等院校材料院系开设材料信息学相关课程,争取在材料信息学人才培养方面发挥更加积极的作用。在现有基础和条件下,考虑到材料信息学的交叉性和应用性的特点,开设该领域课程是需要很多新举措和创新手段的。对于如何在课程教学过程中最大化的培养学生的材料信息学素养是需要不断探索和逐步完善的。

## 2、《材料信息学导论》课程的定位和教学目的

这门课程定位“导论”,是希望通过这门课的讲授让学生建立起材料信息学的基本概念,实现从传统的材料学向材料信息化的认知过渡。相比传统的材料学教学,《材料信息学导论》更应该强调的材料工程应用特点以及对材料分类和性能的体系性认知,其教学重点有别于某类材料的具体性能、微观结构、表征分析等。另外,由于材料信息学和信息技术交叉的特点,在课程教学过程中应该强调使用材料数据库和相关的材料选择软件,但不涉及数据库平台搭建和软件编程技术。

对于材料专业学生,本课程的教学目的在于帮助学生理解材料科学在实际工程中是如何实现信息化应用的,并建立“设计为导向”的材料工程学认知。对于非材料专业其他工程类专业的学生,本课程的教学目的在于帮助学生如何从成为一名合格工程师的角度,学会利用材料数据库软件实现产品设计中的材料选择。

## 3、《材料信息学》课程的开设思路

开设《材料信息学导论》课程,首先必须让学生明确这门课程的材料信息学的研究对象就是材料信息。在材料科学研究和工程中的使用包括材料信息的产生、信息的获取、信息的存储与显示、信息的传递、信息的利用、信息的转化、知识的产生、新信息的产生等几个阶段。课程的研究内容可以从八个方面展开:(1)材料信息的形成机理、类型及特征;(2)材料信息的表征、标准化和共享;(3)材料信息的存储、管理和利用;(4)材料信息的关联性理论;(5)材料信息的可视化;(6)材料信息的知识挖掘;(7)材料信息学应用研究;(8)材料数字化科研协作环境的搭建。在对以上内容进行展开讲解的过程中,要时刻对比传统材料学课程的内容,让学生真正理解和掌握材料信息学的基本理论和内涵。

## 4、《材料信息学》课程的教学手段

材料信息学一经提出,在材料学术界和工业界引起了巨大的反响。国外纷纷建立专门研究机构开展研究。美国和欧洲在材料

信息学领域处于领先地位,在组合材料科学研究的基础上,许多机构开始建立数据库系统辅助材料设计和材料组合设计,并致力于材料信息学方面的研究。Symyx 技术公司开发了进行材料组合和测试的仪器设备(Symyx Tools)及用于实验管理,大量实验结果的获取、存储和分析的软件(Symyx Software)。Accelrys 公司旗下的软件产品 Materials Studio 是 Accelrys 专为材料科学领域开发的可运行于 PC 机上的新一代材料计算软件,其中 MS Matinformatics 是 Materials Studio 软件中的一组材料信息学产品,用于对组合材料数据进行管理和分析。另外剑桥大学 M. Ashby 教授牵头的 GRANTA 公司的 CES EDUPACK 材料信息学教学软件,也是一个集数据库和材料设计为一体的软件平台。因此,在本课程的授课过程除了讲授部分,还可以增设实践环节,让学生使用如 CES EDUPACK 之类较成熟的软件,帮助学生快速领悟材料信息学的研究内容,并迅速掌握材料设计的基本思路。

## 5、总结

材料信息学是材料科学认知与信息化技术相融合的一门交叉学科,也是伴随着信息技术发展而兴起的新型学科。材料信息学导论课程的开设的最终目标培养一批具有材料信息学素养的材料科研工作者,让他们一方面更快捷的借助庞大的数据库研发出更丰富种类的新材料,另一方面可以让大大节省研发材料的经济和时间成本。

## 参考文献:

- [1]材料信息学基础及材料信息学平台工程应用研究[D].魏群义,重庆大学,2008年.
- [2]Krishna Rajan. Informatics for Materials Science and Engineering [M], Butterworth-Heinemann 出版社,2013年
- [3]Michael Ashby, Kara Johnson. Materials and Design: The Art and Science of Material Selection in Product Design (2nd Edition) [M], Butterworth-Heinemann 出版社,2002年

作者简介:雷毅敏(1986-),女,讲师,主要从事材料科学相关领域的教学科研工作。

