

依托智算平台的《计算材料学》实践教学方案探索

李艾琳

中国民航大学理学院 天津 300300

摘要: 为了探索本科课程《计算材料学》实践项目的教学实施方案,课程组教师选择了依托某智算中心进行实践教学项目的移植开发适配,开发了一套利用智算平台保障《计算材料学》实践教学质量的授课方案,经过两年的探索迭代,已基本可以满足实践教学的要求。同时还对比了同类型课程的计算材料学教学实验实践开展情况,总结出本课程可以借鉴的内容。总结实践课的实施过程可以得出结论,充分利用智算平台可以为《计算材料学》实践教学提供教学质量的保障,符合教育数字化和学科交叉融合的发展需求。

关键词: 计算材料学;高密度计算;实践教学

前言

1 课程性质与内涵

党的二十大首次将“教育数字化”写入报告,以数字化转型为契机,人才培养机制和教育治理方式等方面将不断重塑。在这一大背景下,加强本科教学的“数字化”属性,运用数字化工具保障教学质量成为了高校教师面临的课题和挑战之一。《计算材料学》为我校材料化学专业必修课程,为理论含实践课,包含理论课32学时和实践课4个项目(32学时)。计算材料学(computational materials science)是对材料的组成、结构、性能以及服役性能进行计算机模拟与设计的学科,包括材料科学、物理、计算机、数学、化学等。在理论教学方面,课程需要夯实基础,综合运用基础知识和理论;另一方面,需要培养学生的实践操作能力,即能够综合运用基础理论和软件解决材料模拟与设计的问题。因此,课程中的实践部分的完成质量对于课程整体教学效果具有至关重要的影响。

2 实践项目与实践教学环境

《计算材料学》课程的基本框架如图1所示,主要包括三大部分,分别是蒙特卡洛模拟方法、分子动力学模拟方法和量子化学计算方法中,采用理论讲解和项目式学习相结合的教学模式,每一章节配有模拟方法对应的实践项目,学生将能够通过实践学习到利用计算材料学的方法和工具解决实际问题的整个流程,培养数智建模能力和研发设计能力。四个实践项目分别是“高性能计算平台基本操作和数据处理”(8学时)、“巨正则系综蒙特卡洛方法模拟多孔材料对甲烷气体的吸附曲线”(8学时)、“利用分子动力学软件包模拟粒子的扩散行为”(8学时)和“使用ORCA量子化学计算软件对小分子/离子团簇进行结构优化和单点能计算”(8学时)。

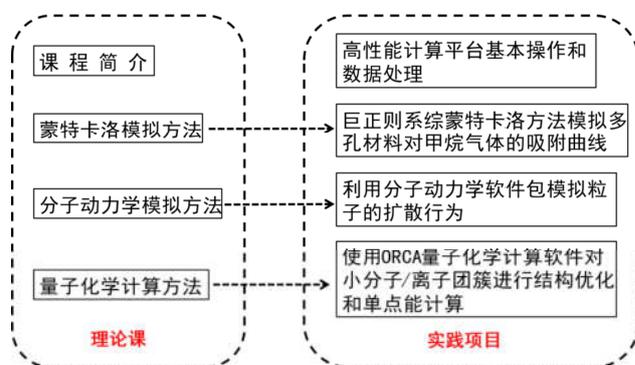


图1 《计算材料学》课程基本架构

为了满足实践教学条件,学校于2022年启动了“化学模拟与计算实验室”教学实验室建设。在建设教学实验室、保障实践教学质量的同时,一些特殊的环境条件对实践教学造成了一定的挑战,问题主要集中在两个方面:一是实践教学的线上线下载衔接,二是实践场地受到限制。如何在这些特殊条件下开展实践教学并获得不低于在教学实验室授课的效果,课程组教师围绕这一问题进行了为期两年的积极探索。得益于近年来国内在智算中心方面的飞速发展,课程组教师开发了一套利用智算平台保障《计算材料学》实践教学质量的授课方案,文章后续将围绕智算平台的优势、实践课实施过程、对比与评价等内容展开。

3 实践教学与智算平台

在“东数西算”工程的背景下,高性能计算领域取得了大量的创新成果。国内目前修建较早的超算中心基本已达到满负荷运转,主要为高校和科研院所提供算力支撑,因此这类超算中心适用于科研项目,但并不适用于计算材料学的教学实践。为了满足《计算材料学》实践项目的教学需求,课程组列出了可选平台须满足的条件,其中包括:(1)集成化的操作界面,对于初学者友

好；(2) 预装软件齐全，实践项目所需软件应已经安装，或者在技术团队的支持下可以安装；(3) 系统运行稳定且排队等待时间少，保证实践课期间学生随时可以登录和提交计算任务；(4) 账户管理简单可靠，可设置管理员和子账户，确保教师可查看指导学生子账户。经过多方比较和试用，课程组教师选定了某智算中心作为合作单位，开通了管理员账户并在该平台上开发出实践教学授课方案。

4 实践课实施过程

在智算平台上进行实践课开发与开展科研项目的工作流程完全不同，具体差别体现在下述几点：首先，目标受众不同，实践课的受众是材料化学专业的二年级本科生，其计算机操作经验和编程水平与研究生或专职科研人员有一定的差距，过于复杂的操作指令或者缺少帮助文档会增加其学习难度，但完全图形化的界面则与计算材料学实际科研中所使用的工具差别较远，智算平台的shell命令行的操作难度适中，在实际授课过程中发现学生普遍可以接受shell命令行操作，并且学生参与实践后表示可以深刻体会到操作精准和细致认真的重要性。其次，课程受众为本科生，因此课程实践项目的预期目标并非像完成科研项目一样追求效率、难度和创新性，而是关注于其与理论课知识点的呼应以及方法的一般性和普适性，另外，科研工作中提交计算任务或许集中或许分散，但实践课上课时间固定，学生完成实践作业的时间也一般比较固定。第二点差别在于管理模式的不同，科研项目可以课题组全员使用同一个账户，分设不同文件夹管理，而实践教学中需要考虑学生的过程性评价和方便教师登录账户进行修改指导，因此课程组与技术支持团队沟通后，在管理员账户下设置了十余个子账户，并要求每个学生选择固定的子账户创建个人文件夹进行实践操作。在这种管理模式下，教师可以通过管理员账户检查每个子账户的任务计算时间，并且可以通过登录子账户对学生的操作进行指导和修改，不受空间和时间的限制。第三点差别在于成本分析的角度不同，虽然科研项目和实践教学都需要考虑机时使用成本，即机时费用，但是实践教学还需要额外考虑教学团队的人力维护成本，例如新课或新实践项目开发、已有实践项目内容调整、课程管理和数据统计等等，而且可持续性也是利用智算平台开展实践教学需要考虑的，这其中包括了学校的因素，例如特殊环境条件解除后，回归线下教学实验室的上课环境，也包括了超算中心的因素，如果超算中心逐渐满负荷运转，提交计算任务排队几率升高，其可持续性都会降低。

实践课的实施过程可以用图2的流程图来表示，主要分为实践课内容设计、智算平台适配和测试、上课和反馈、迭代和改进四个部分。

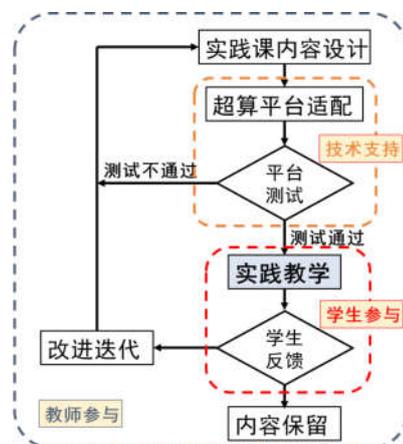


图2 《计算材料学》实践项目实施过程

整个实施过程中教师、技术支持团队和学生协同配合，课程组教师团队全程参与实践课的内容设计、平台移植适配、课堂教学和课后反馈迭代环节，智算平台的技术支持团队在实践项目移植适配以及软件安装调试方面提供技术支持和指导，学生参与到实践项目的课堂学习和课后练习环节，在实践中学习的同时也为整个实践教学提出改进建议，课程组教师则根据学生反馈及时对教学内容、手段方式方法进行调整。

5 对比与评价

课程组教师选取了论文中已报道的《计算材料学》课程相关内容进行横向比较。郭丹等人介绍了计算材料学课程的实验教学改革内容，其材料数据实践环节主要是基于教学版材料数据库，在材料性能模拟方面主要是围绕有限元力学性能计算展开^[1]，同时在课程上机实验中还设计了matlab软件编程进行晶体建模可视化的实践环节^[2]。张亚超等人将Python脚本语言应用在了计算材料学的实验教学方案中，将密度泛函理论计算与Python编程结合起来，取得了较好的效果^[3]。汤富领等在计算材料学课程中同样也是采用项目式教学开展其实践课程，而且好处显而易见，由于直接选择了在研的科研项目作为课程项目，激发了学生的学习热情，既提高了教师的教学成就感也提高了学生的学习获得感^[4]。李邵仁等既探索了将染料敏化太阳能电池科研热点转化为计算材料学课程实验的设计思路^[5]，同时也讨论了计算材料学实验室平台搭建思路和计算材料学实验课程体系的建立^[6]。

总结上述案例可知，材料类本科专业开设的计算材料学的实验实践课大部分都是依托校内自建的实验室平台，计算材料学实践基本都是项目式教学的模式。对于

编程和软件操作水平的要求差异性比较大,但基本上都会重视在高性能计算环境下、Linux系统的基本操作教学和练习。直接将科研项目转化为计算材料学实践项目是值得借鉴的宝贵经验,有助于激发学生的学习兴趣,这一点在今后的实践课内容设计中将会着重加强。

6 结语

总结本课程的实践教学经验,可以得出下述结论:

6.1 智算平台可以作为《计算材料学》实践课的一种上课方式的选择,但是需要考虑其可持续性;

6.2 校内教学实验室具有其独有的优势,可以作为教学的依托平台,受网络连接和外部环境的影响较小,而且可以为学生开放实验、创新项目以及教师的科研提供支撑;

对于课程以及教学实验室未来的发展与规划方面,未来的探索方向可以包括本地和云端混合环境、上机环境容器化、增添AI+教学项目、以及软件硬件国产自主化等。

参考文献

[1]郭丹,金剑锋,王明涛等.新工科背景下计算材料学实

验教学改革与实践[J].实验室研究与探索,2022,41(03):181-186.

[2]郭丹,金剑锋,王明涛等.晶体材料原子尺度计算模拟实验教学设计[J].实验技术与管理,2022,39(01):142-146+161.

[3]张亚超,郑珊.Python在“计算材料学”教学中的应用探索[J].教育教学论坛,2021,No.536(37):137-140.

[4]汤富领,李俊琛,卢学峰等.面向工程问题采用项目式教学提升课程获得感——以“计算材料学”和“材料计算与设计”授课为例[J].教育教学论坛,2020, No.490(44):291-292.

[5]李邵仁,鲁效庆.计算材料学分子设计性实验探究[J].实验室研究与探索,2019,38(12):196-199.

[6]李邵仁,鲁效庆,郭文跃等.以创新能力培养为核心的计算材料学实验室探索与建设[J].实验技术与管理,2020, 37(07):243-245+249.