# 《材料模拟》教学大纲

# 英文名:Materials Simulation

## 一、课程说明

课程编号：060532Z10

总学时数：32.0 （其中讲课学时：32学时）

学分：2.0 （先修课程:）

本大纲适用专业（已默认取出培养方案中开设的专业） 材料国际

教材：

| 教材名称 | ISBN 编号 |
| --- | --- |
| 金属塑性变形多尺度模拟 | 9787030711205 |

教辅（如有）： 无

课程负责人： 郭晓斌

## 二、课程简介

本课程主要教授材料模拟的基本方法，包括第一性原理计算、分子动力学、蒙特卡洛以及晶体塑性有限元等常见的材料模拟方法。使学生提升从事材料科学研究的基本能力和综合素质，提升自主学习和终身学习的意识，形成不断学习和适应发展素质。

## 三、课程目标

| 序号 | 课程目标 | 毕业要求指标点 |
| --- | --- | --- |
| 1 | 课程目标 1，通过本课程的学习，使学生了解材料模拟的基本方法，包括第一性原理计算、分子动力学、蒙特卡洛以及晶体塑性有限元等常见的材料模拟方法。 | 毕业要求 1.2，毕业要求 2.2 |
| 2 | 课程目标 2，能够比较熟练的使 | 毕业要求 3.2、毕业要求 5.2 |

| | | |
|---|---|---|
| | 用材料模拟常用软件，对材料的力学性能进行预测，并能够根据实际需要设计具有特定性能的新材料。 | |
| 3 | 课程目标 3，提升从事材料科学研究的基本能力和综合素质，提升自主学习和终身学习的意识，形成不断学习和适应发展素质。 | 毕业要求 6.2，毕业要求 7.2，毕业要求 12.2 |
| …… | …… | …… |

**注：课程目标要求明确认知层次，体现进阶、强化高阶，体现分类目标，如知识、能力、素养，目标需要可测量。**

## 四、教学内容与安排

| 序号 | 教学内容 | 总学时 | 讲课(含研讨) | 实践 | 教学重点 | 教学难点 | 教学方案设计(含教学方法、教学手段、思政元素等) | 支撑的课程目标 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 材料模拟简介 | 2 | 2 | 0 | 材料模拟方法的分类 | 材料不同层次使用不同的模拟方法 | 课堂教学，PPT 电子课件 | 1 |
| 2 | 材料热力学模拟与相图计算 | 4 | 4 | 0 | 热力学模拟的理论基础和计算机实现方法 | 热力学模拟的准确度受限于理论原理的发展 | 课堂教学，PPT 电子课件 | 2 |
| 3 | 第一性原理模拟方法（一） | 4 | 4 | 0 | 第一性原理计算的模型建立、势函数选取、计算数据后处理 | 模型建立的技巧和方法以及对计算效率的影响 | 课堂教学，PPT 电子课件 | 2 |
| 4 | 第一性原理模拟方法（二） | 4 | 4 | 0 | 第一性原理计算数据分析材料物理、力学、化学等性质的应用 | 如何根据所需要模拟的材料性质来 | 课堂教学，PPT 电子课件 | 2 |

| | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | | | 设置模拟的输入条件 | | |
| 5 | 分子动力学模拟方法（一） | 4 | 4 | 0 | 分子动力学模拟的模型建立方法、势函数选取、计算文件的后处理 | 分子动力学计算的计算体量和效率受限于多种因素 | 课堂教学，PPT 电子课件 | 2 |
| 6 | 分子动力学模拟方法（二） | 4 | 4 | 0 | 分子动力学模拟软件 Lammps 的使用方法和技巧 | 分子动力学模拟建立模型与计算结果的准确性 | 课堂教学，PPT 电子课件 | 2 |
| 7 | 晶体塑性有限元模拟方法（一） | 4 | 4 | 0 | 晶体塑性有限元模拟方法的建模、加载条件、计算数据后处理 | 如何准确设计与实际材料组织相近的晶体塑性模型 | 课堂教学，PPT 电子课件 | 2 |
| 8 | 晶体塑性有限元模拟方法（二） | 4 | 4 | 0 | 晶体塑性有限元模拟的本构建立和软件使用 | 晶体塑性有限元模拟的本构建立依靠实验数据 | 课堂教学，PPT 电子课件 | 2 |
| 9 | 材料模拟方法应用举例 | 2 | 2 | 0 | 研究和工程实践中常用到的第一性原理、分子动力学、晶体塑性有限元模拟的案例 | 如何针对具体的实际问题选用合适的模拟方法 | 课堂教学，PPT 电子课件 | 3 |

## 五、实践教学内容和基本要求

无

## 六、考核方式及成绩评定

| 考核方式 | 成绩比例（%） | 考核/评价细则 |
|---|---|---|
| 考核方式 1 | 20 | 课堂考勤 |
| 考核方式 2 | 20 | 平时作业和文献翻译 |
| 考核方式 3 | 60 | 期末考试 |
| …… | | |

**课程目标与课程考核环节关系：**

| 序号 | 课程目标 | 考核方式 | | | | 权重系数 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | | 考核方式1 | 考核方式2 | 考核方式3 | …… | |
| 1 | 课程目标 1 | 20% | 20% | 20% | | 20 |
| 2 | 课程目标 2 | 60% | 60% | 60% | | 60 |
| 3 | 课程目标 3 | 20% | 20% | 20% | | 20 |
| …… | …… | | | | | |
| 总计 | | 100% | 100% | 100% | | 100 |

**考核评价标准：**

| 课程目标 | 考核评价标准 | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| | 0≤X＜60 | 60≤X＜70 | 70≤X＜80 | 80≤X＜90 | 90≤X≤100 |
| 课程目标1 | 未能运用所学基本理论用于材料模拟方法的选择。 | 基本能运用所学基本理论用于材料模拟方法的选择。 | 能运用所学基本理论用于材料模拟方法的选择。 | 能较好运用所学基本理论用于材料模拟方法的选择。 | 能熟练运用所学基本理论用于材料模拟方法的选择。 |
| 课程目标2 | 未能运用基本理论，从材料特性触发，识别和判断有关材料模拟过程的关键环节。 | 基本能运用基本理论，从材料特性触发，识别和判断有关材料模拟过程的关键环节。 | 能运用基本理论，从材料特性触发，识别和判断有关材料模拟过程的关键环节。 | 能较好运用基本理论，从材料特性触发，识别和判断有关材料模拟过程的关键环节。 | 能熟练运用基本理论，从材料特性触发，识别和判断有关材料模拟过程的关键环节。 |
| 课程目标3 | 不能树立科技报国的理想、科学精神与工程意识，未形成不断学习和适应发展的素质。 | 基本能树立科技报国的理想、科学精神与工程意识，初步形成不断学习和适应发展的素质。 | 树立科技报国的理想、科学精神与工程意识，形成不断学习和适应发展的素质。 | 能较好地树立科技报国的理想、科学精神与工程意识，能较好地形成不断学习和适应发展的素质。 | 能很好地树立科技报国的理想、科学精神、自学意识与工程意识，能很好地形成不断学习和适应发展的素质。 |
| …… | …… | | | | | |

**大纲主撰人：　　郭晓斌　　大纲审核人：　　吴壮志**