

材料建模与计算课程教学大纲					
课程基本信息 (Course Information)					
课程代码 (Course Code)	MSE4704	学时 (Credit Hours)	48	学分 (Credits)	3.0
课程名称 (Course Name)	(中文)材料建模与计算				
	(英文)Computational Materials Science				
课程性质 (Course Type)					
授课对象 (Target Audience)	Seniors of SMSE@SJTU				
授课语言 (Language of Instruction)	全英文				
开课院系 (School)	材料科学与工程学院				
先修课程 (Prerequisite)		后续课程 (post)			
课程负责人 (Instructor)	彭雄奇	课程网址 (Course Webpage)	https://oc.sjtu.edu.cn/courses/40717		
课程简介 (中文) (Description)	材料建模与计算是材料科学和计算机科学的结合，它基于一定的物理模型利用高性能科学计算解决材料科学与工程上的实际问题。本课程将重点介绍分子动力学(MD)、相场方法(PFM)和有限元(FEM)三种模拟方法的基本原理；在掌握基本原理的基础上，将重点介绍如何利用 LAMMPS 和 ABAQUS 模拟软件解决材料科学与工程上的实际问题。				
课程简介 (英文) (Description)	Materials Modeling and Computation aims to solve the problems in materials science and engineering by means of scientific computations based on physical models. This course covers three parts, namely, Molecular Dynamics (MD), Phase Field Method (PFM) and Finite Element Method (FEM). Based on the understanding of the principles and techniques of these three methods, popular software packages such as LAMMPS and ABAQUS will be introduced and applied to solve issues in materials science and engineering.				
课程目标与内容 (Course objectives and contents)					
课程目标 (Course Object)	1. 掌握计算材料学的基本知识及其在材料开发和性能预测方面的应用。（支持毕业要求1.1） 2. 从微观、介观再到宏观尺度，重点掌握微观尺度MD模拟方法及物理量计算依据，介观尺度掌握PFM基本原理，宏观尺度掌握FEM的计算方法及能够解决的工程实践问题。（支持毕业要求 3.1） 3. 运用常用的仪器、制图、模拟软件等工具解决复杂材料工程问题，评价模拟结果的正确性并指出其局限性。（支持毕业要求5.3） 4. 掌握环境与生产中的材料行为多尺度计算机应用（支持毕业要求7.1）				

教学内容进度安排 及对应课程目标 (Class Schedule & Requirements & Course Objectives)	章节	教学内容 (要点)	学时	教学形式	作业及考核要求	课程思政融入点	对应课程目标
	Chapter 1	Introduction to the course and FEM	2	Lectures	无	培养学生对专业的认识, 增强学生的专业信心, 让学生能够自主地投入到课程的学习当中, 从而早日实现科技报国的大志。	课程目标4
	Chapter 2	FEM for Truss Element	4	Lectures + Tutorial	Show the FE method for truss problem; Write a formal report, submit with ABAQUS CAE file	通过编程实践和软件操作, 培养学生一丝不苟、认真严谨的工作作风	课程目标1和3
	Chapter 3	General FE Formulations for Solids	4	Lectures	无	培养学生的职业操守, 坚持工匠精神。	课程目标1和2
	Chapter 4	FE for 2D Planar Element	6	Lectures + Tutorials	Show the basic equations and submit a formal report along with code. Write a formal report, submit with ABAQUS CAE file	培养学生知晓从事本专业所应遵循的价值观念、伦理原则和行为规范, 对专业活动做到心有敬畏、行有所止, 成为德才兼备的优秀人才。	课程目标1和3
	Chapter 5	Solve 3D solid Problem with ABAQUS	4	Lectures + Tutorials	Write a formal report, submit with ABAQUS CAE file	滋养学生创新精神、夯实创新底蕴、塑造创新品格	课程目标1和3
	Chapter 6	AI-aided FEM	4	Lectures + Tutorials	Write a formal report, submit with ABAQUS CAE file	加深学生对科技进步的理解, 激发学生的创新热情, 坚定学生的中国梦自信。	课程目标1和3
	Chapter 7	Introduction to molecular dynamic simulation	2	Lectures	Name application examples of	激发学生对专业基础研究的	课程目标4

教学内容进度安排 及对应课程目标 (Class Schedule & Requirements & Course Objectives)	章节	教学内容 (要点)	学时	教学形式	作业及考核要求	课程思政融入点	对应课程目标
					using MD in materials science and engineering	兴趣, 增强学生的专业信心	
	Chapter 8	Initial Condition、Boundary Conditions& Equation of Motion	6	Lectures + Tutorials	Write formal report, submit the first MD program code	夯实学生理论基础; 通过编程实践灵活运用所学理论知识增强学生的专业自信。	课程目标1和3
	Chapter 9	Interatomic Potentials	2	Lectures	Submit answers to assigned homework	加深学生对专业知识的深入了解, 夯实学生理论基础和实践方法。	课程目标1
	Chapter 10	Minimization & Introduction to Linux	2	Lectures + exercises	Submit answers to assigned homework	加深学生对专业知识的深入了解, 夯实学生理论基础和实践方法。	课程目标1
	Chapter 11	Temperature control and its applications	4	Lectures + tutorials	Submit a formal report melting simulation using LAMMPS	加深学生对专业知识的深入了解, 夯实学生理论基础和实践方法。	课程目标1和2
	Chapter 12	Pressure control	2	Lectures	Question answer and principle understanding	加深学生对专业知识的深入了解, 夯实学生理论基础和实践方法。	课程目标1
	Chapter 13	Comprehensive applications of MD simulation: dislocation motion	2	Lectures + Tutorials	Write a formal report, submit with LAMMPS and OVITO file	加深学生对综合应用所学知识, 融会贯通, 解决实际问题的能力, 养成实践出真知的科研习惯。	课程目标2和3
	Chapter 14	Introduction to mesoscale methods	4	Lectures + Tutorials	Question answer and principle understanding	培养学生解决实际问题的能力, 让学生明白多	课程目标4和3

教学内容进度安排 及对应课程目标 (Class Schedule & Requirements & Course Objectives)	章节	教学内容 (要点)		学时	教学形式	作业及考核要求	课程思政融入点	对应课程目标
							开展原始创新的重大时代意义	
考核方式 (Grading)	(1) 课堂表现 10分 (2) 平时作业 20分 (3) 课程项目70分							
教材或参考资料 (Textbooks & Other Materials)	教材名称	作者	出版社		出版日期	版次	书号	
其它(More)								
备注(Notes)								