

知识图谱为中心的“计算材料类”课程智能化建设改革探讨

张玉娟*, 相奕晨, 李万骏, 刘晓光, 陈颖芝
北京科技大学材料科学与工程学院, 北京 100083

DOI: 10.61369/VDE.2026080026

摘 要 : 在人工智能技术飞速发展与新工科建设纵深推进的双重背景下, 计算材料类课程作为培养跨学科复合型人才的核心载体, 面临理论抽象碎片化、实践环节薄弱、教学方法单一、评价体系滞后等突出问题。本文提出“知识图谱+AI技术+信息化平台”的智能化改革框架。通过构建“核心理念-软件技能-应用-交叉-职业素养”五层级知识图谱, 实现知识系统化、可视化呈现; 融合生成式AI等技术, 构建智能答疑、虚拟实验、智能评估三大支撑系统; 设计“三阶递进+双环反馈”实施路径, 结合“课前-课中-课后”全流程闭环与“学-论-展”模式, 形成全链条能力培养体系。

关 键 词 : 计算材料类课程; 知识图谱; AI技术; 智能化教学

Discussion on the Reform of Intelligent Construction of Computational Materials Courses Centered on Knowledge Graph

Zhang Yujuan*, Xiang Yichen, Li Wanjun, Liu Xiaoguang, Chen Yingzhi

School of Materials Science and Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083

Abstract : Against the dual backdrop of the rapid development of artificial intelligence technology and the in-depth advancement of emerging engineering education, computational materials courses—core carriers for cultivating interdisciplinary and compound talents—are confronted with prominent challenges, such as abstract and fragmented theoretical content, insufficient practical training, monotonous teaching methods, and outdated evaluation systems. Based on the teaching characteristics of such courses and industry demands, this paper proposes an intelligent reform framework of "Knowledge Graph+AI Technology+Informatization Platform". We construct a five-tier knowledge graph structured as "Core Concepts – Software Skills – Applications–Interdisciplinarity–Professional Literacy" to achieve systematic and visualized knowledge presentation. By integrating technologies like generative AI, we establish three supporting systems: intelligent Q&A, virtual experiments, and intelligent assessment. We also design an implementation path of "Three-Stage Progression + Dual-Loop Feedback", which, combined with the full-process closed loop of "Before Class–During Class–After Class" and the "Learning–Discussion–Presentation" model, forms a full-chain competency development system. Verified through teaching cases, this scheme effectively addresses key teaching pain points, drives the transformation of courses toward intelligence and personalization, and provides a replicable practical paradigm for the reform of similar courses under the background of emerging engineering education.

Keywords : computational materials courses; knowledge graph; AI technology; intelligent teaching

人工智能技术与知识图谱的协同发展, 不仅给计算材料类课程教学带来了挑战, 更提供了突破性的改革机遇。AI工具能够将抽象理论具象化、复杂操作流程化、个性化学习精准化, 知识图谱则可构建“核心理念-软件技能-应用实践-跨学科融合-职业素养”的系统化知识网络, 两者相辅相成, 既能帮助学生理清知识脉络, 又能通过AI工具的个性化赋能提升学习效率。国内已有学者开始探讨人工智能背景下, 材料类学科的人才培养、发展建设等课题^[1-2]。笔者在北京科技大学长期从事材料计算与模拟的科研工作, 先后开设“计

项目信息:

北京科技大学人工智能赋能研究生教育探索项目(2024JGAI06);

北京科技大学教育教学改革项目(2024JGC015, 2023JGC02);

北京科技大学“课程思政特色示范课程”课程建设项目(KC2024SZ03, 2025SZA008, KC2023TS03, 2025SZA009);

2025年度北京科技大学科技与文明中外人文交流项目(2025KFYB018)。

* 通讯作者: 张玉娟, Email: zhangyujuan@ustb.edu.cn。

算材料学基础”、“材料模拟与设计”等多门本科生、研究生课程。近两年来，笔者密切关注生成式人工智能与知识图谱的技术优势，尝试将两者深度融入课程教学，在梳理知识体系、优化实操训练、强化个性化指导等方面取得了良好效果。基于此，本文立足教学实践经验，深入探讨人工智能与知识图谱双轮驱动下“计算材料学基础”课程的教学改革路径，重点分析如何通过知识图谱构建系统知识框架、借助 AI 工具提升教学实效，引导学生正确运用智能技术提升学习效率与实践能力，构建适配智能时代需求的课程教学体系，为同类课程的改革提供可借鉴的实践参考。

一、计算材料类课程教学现状与痛点分析

计算材料类课程以多学科理论为基础，核心内容涵盖材料物性-微观结构映射规律、专业软件操作规范、跨学科融合应用等，具有极强的抽象性与逻辑性。同时，课程知识点的碎片化分布与跨学科关联性强，不仅涵盖材料科学本身的晶体结构、热力学性质等知识，还涉及计算机编程、大数据分析、机器学习等跨学科内容，传统教学模式下教师按章节顺序讲授，缺乏对知识体系的系统梳理与整合，导致学生难以建立“理论-软件-应用”的完整知识链条。具有计算材料学研究背景的师资力量相对欠缺，是制约课程教学质量的重要因素；当前计算材料类课程教学仍普遍采用传统讲授模式，缺乏互动性与创新性，实践教学资源不足，专业软件操作需要大量上机练习，但高校实验室设备数量有限，受课时、开放时间限制，学生课后自主实践机会少。计算材料类课程传统评价体系以“结果为导向”，过度依赖期末考试成绩，难以全面反映学习效果，对实践能力、创新思维、团队协作等软技能评估不足，也缺乏对科研伦理意识、学术规范认知等综合素质的有效评价与引导。

二、知识图谱为中心的計算材料类课程智能化建设框架设计

本改革研究以“知识图谱导航+AI 技术赋能+信息化平台支撑”为核心理念，构建计算材料类课程智能化建设框架，实现课程知识系统化呈现、教学过程个性化赋能、实践教学虚拟化开展与评价体系多元化实施。知识图谱、AI 技术与信息化平台三者关系关系如图 1 所示；知识图谱作为课程知识体系的“导航仪”，通过可视化方式呈现知识点逻辑关联，帮助学生建立系统知识框架，解决内容抽象复杂、碎片化问题；AI 技术作为教学效能的“放大器”，通过智能答疑、虚拟实验、智能评估等功能，解决教学模式单一、实践薄弱、评价滞后等问题；信息化平台作为教学实施的“载体”，构建“课前-课中-课后”全流程教学闭环，实现教学资源共享、师生互动与过程管理^[3,4]。

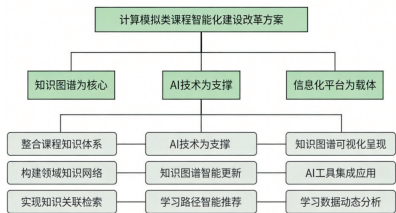


图 1 知识图谱、AI 技术与信息化平台关系

（一）知识图谱构建，五层级架构设计与动态优化

针对计算材料类课程内容抽象复杂、碎片化的问题，构建“核心理念层-软件技能层-应用层-交叉层-职业素养层”的五层级知识图谱架构，实现课程知识系统化、结构化、可视化呈现。每个层级包含若干核心知识点（节点），节点间通过逻辑关联形成网络，且每个节点关联对应的教学资源，形成“概念-理论-应用”的闭环链路，帮助学生建立完整知识体系。

核心理念层作为知识图谱基础，聚焦核心理论与基本规律，涵盖材料物性-微观结构映射规律、密度泛函理论、分子动力学基本原理、热力学与统计力学基础等知识点。例如“晶体缺陷对材料强度的影响”、“电子结构与材料导电性的关联”等节点，帮助学生建立核心认知框架。该层级关联理论讲解视频、公式推导课件、核心概念测验等资源，通过梳理知识点逻辑关系，帮助学生理解课程核心脉络。

软件技能层围绕常用专业软件，规范操作流程与技能要点，涵盖 Material Studio、VASP、Origin、GPAW 等主流工具操作规范。例如“密度泛函理论计算流程”、“晶体结构模型构建步骤”、“VASP 软件的 INCAR 文件参数设置”等节点，帮助学生掌握实践操作技能。该层级关联软件操作演示视频、实操练习题库、常见问题解答等资源，同时建立与核心理念层知识点的关联，帮助学生理解操作背后的理论依据，避免机械操作。

应用层整合材料设计、性能预测、工艺优化等全流程实战案例，实现理论与实践深度结合。例如，“通过高通量计算筛选锂离子电池正极材料”、“二维材料力学性能预测”“基于机器学习的材料性能预测模型构建”等节点，关联数据库实战案例、虚拟实验项目、课程设计任务、企业实际研发项目等资源。学生通过操作案例数据、完成模拟实验、参与项目设计，将理论知识与软件技能应用于实际问题解决，提升实践能力与工程素养。

交叉层衔接材料科学与人工智能、大数据、计算机编程等跨学科知识，体现课程交叉融合特性，适应跨学科人才培养需求。涵盖机器学习在材料性能预测中的应用、大数据分析在材料研发中的实践、Python 编程在材料模拟中的应用等知识点，关联跨学科案例视频、编程教程、学术前沿论文等资源，帮助学生拓宽视野，培养跨学科思维。

职业素养层以思政教育为核心引领，将科研伦理、团队协作、学术规范等软技能培养与家国情怀、科技报国、责任担当等思政元素深度融合，既契合新时代材料行业对复合型人才的综合素质要求，更响应习近平同志在全国高校思想政治工作会议上指出“要坚持把立德树人作为中心环节，把思想政治工作贯穿教育教学全过程，实现全程育人、全方位育人，努力开创我国高等教

育发展新局面”。

知识图谱构建采用“动态优化”机制：组建跨学科建设团队，基于课程教学大纲与行业需求梳理知识点，完成初步构建；在教学实践中收集学生学习行为数据与 AI 答疑记录；利用大数据分析识别知识薄弱点、逻辑关联不合理等问题，持续调整优化，确保知识图谱的科学性与时效性。

（二）AI 技术融合，三大智能化支撑系统开发

以知识图谱为基础，融合生成式 AI、虚拟仿真、大数据分析等先进技术，开发智能答疑、智能参数检测、智能评估三大支撑系统，构建智能化教学生态。智能答疑系统基于 ChatGPT 等生成式 AI 工具，构建“第二教师”平台，与知识图谱深度耦合，通过自然语言处理精准理解学生提问意图，提供实时、准确、个性化解答，支持多轮互动引导学生拆解复杂问题，同时收集高频问题与易错知识点，为教师优化教学提供数据支撑。AI 参数检测系统聚焦计算材料学模拟核心痛点，依托知识图谱中软件技能层与应用层知识点，构建“基础合规检测—综合优化推荐—创新方案评估”三级参数服务体系，快速排查截断能、K 点网格等核心参数错误，结合材料体系与计算目标智能推荐最优参数组合，并对自主设计方案提供差异化优化建议，有效解决参数设置盲目、计算失败率高等问题。智能评估体系基于大数据分析 with AI 算法，构建“知识—能力—素养”三维度评估框架，整合知识图谱、学习行为、虚拟实验操作、项目成果等多维数据，通过 AI 模型生成学生能力画像，采用过程性评价（占 60%）与终结性评价（占 40%）相结合的方式，以学情雷达图、能力发展曲线等可视化形式呈现结果，为教师提供个性化教学建议，帮助学生明确学习方向，实现全面、客观、精准的学习效果评估。

（三）信息化平台支撑：“课前—课中—课后”全流程教学闭环

以超星学习通等信息化平台为载体，构建“课前一课中一课中”全流程教学闭环，实现教学资源共享、师生互动与过程管理的智能化。课前阶段，教师依托平台发布知识图谱导航资源与预习任务，上传与知识图谱节点关联的教学资源，学生可根据知识图谱逻辑自主规划学习路径，AI 智能答疑系统实时解答预习疑问，教师通过平台收集预习数据，了解学情并调整教学内容与节奏。课中阶段，采用“学—论—展”进阶式教学模式，教师利用平台抢答、投票、随机选人等功能激发学生参与热情，结合 AI 虚拟实验平台开展翻转课堂讨论，学生展示预习成果与虚拟实验初步结果，教师引导学生围绕重难点深入探讨，并借助平台实时反馈功能掌握学生对知识点的理解情况，及时调整教学策略。课后阶段，教师在平台发布课后作业、拓展阅读及虚拟实验进阶任务，

AI 智能评估系统对作业与实验报告进行批改分析，提供即时反馈与改进建议，同时根据学生学习行为数据推荐个性化学习内容；学生通过讨论区与师生交流分享经验，教师则收集课后学习数据，评估教学效果，持续优化教学方案。

三、具体实施案例

结合人工智能中的数据挖掘技术，开展材料性能预测的小课题研究。在《材料模拟与设计基础》课程中，将学生分为若干小组，每组选取一个研究课题。学生利用 MATLAB、WEKA 等工具，对数据库中的相关数据进行收集、处理与分析，挖掘材料性能与成分、结构之间的关联规律。

在研究过程中，学生通过智能答疑系统解决数据处理、算法选择等方面的问题，利用知识图谱中的相关节点资源进行学习。各小组通过在线平台分享研究进展，开展线上讨论与交流。课题结束后，各小组进行成果展示与答辩，智能评估体系结合课题报告、答辩表现、团队协作情况等进行综合评分。通过小课题研究，学生不仅掌握了数据挖掘的基本方法，还学会了如何将理论知识应用于实际问题中，有效提高了创新思维 and 实践能力。

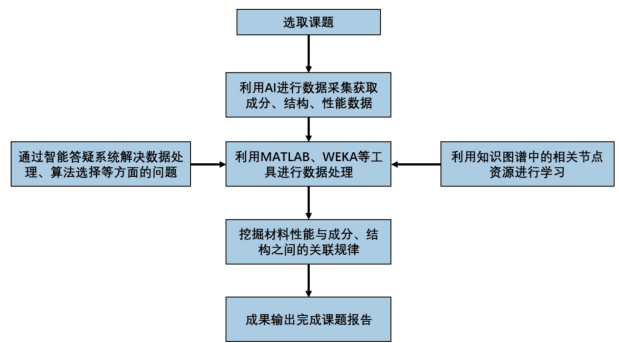


图2 结合人工智能数据挖掘技术，开展材料性能预测的小课题研究流程

四、结论与展望

该改革方案突破了传统教学模式的局限，实现了知识呈现的可视化、教学指导的个性化、实践教学的虚拟化、评价体系的多元化，能够有效破解计算材料类课程教学中的突出问题。通过知识图谱的可视化导航，帮助学生建立系统的知识框架；通过 AI 技术的个性化赋能，实现因材施教；通过虚拟实验平台的建设，丰富实践教学内容；通过智能评估体系的构建，实现对学生综合素质的全面评估；通过信息化平台的支撑，构建全流程教学闭环。

参考文献

- [1] 徐玲琳, 蒋正武, 杨晓杰, 等. 新时代基于人工智能赋能材料学院“本研贯通”人才培养体系建设. 教育学报, 2024, 2(3): 30–32.
- [2] 翟红林, 张晓晓, 曹晶晶. 人工智能新时代下教学改革的新思考. 大学化学, 2024, 39(01): 63–68.
- [3] 麻莹, 赵磊, 邢心茹, et al. “互联网+教育”背景下的融合式教学模式探索—以植物学课程为例. 中国现代教育装备, 2025, (19): 27–29.
- [4] 刘睿, 朱森强, 丁洁琼. 知识图谱在有机化学智慧课程中的应用. 化学教育, 2025, 46(22): 18–25.
- [5] 杨春鹏. 人工智能大语言模型在本科电化学课程论文评分中的可靠性评估[J]. 化学教育, 2025, 46(24): 115–120.