

云计算平台融入化学专业特色课程的设计与探索

朱杰, 焦飞*, 孙雅静*

天津大学理学院, 天津 300072

摘要: 本研究整合Bohrium云计算平台和国产开源软件ABACUS, 构建了一种创新的混合式教学模式, 并将其应用于天津大学“新能源材料与化学”课程。课程设计结合理论与实践, 涵盖自洽计算、结构优化、电子态密度、能带结构和声子特征等内容。其中, 云计算平台的引入显著降低了操作难度, 提高了课堂互动性, 同时激发了学生的自主学习与创新思维。该教学方法有效提升了教学质量, 为培养具有国际视野和创新能力的化学专业人才提供了新的思路。

关键词: 云计算平台; 国产软件; 理论与计算化学; 专业特色课程

中图分类号: G64; O6

Design and Exploration of Integrating Cloud Computing Platforms into Specialty Chemistry Courses

Jie Zhu, Fei Jiao*, Yajing Sun*

School of Science, Tianjin University, Tianjin 300072, China.

Abstract: This study integrates the Bohrium cloud computing platform with the domestic open-source software ABACUS to develop an innovative hybrid teaching model, applied in the “New Energy Materials and Chemistry” course at Tianjin University. The course design effectively combines theory and practice, encompassing topics such as self-consistent calculations, structural optimization, electronic density of states, band structure, and phonon characteristics. The introduction of the cloud computing platform significantly reduces operational complexity, enhances classroom interactivity, and fosters students’ independent learning and innovative thinking. This teaching approach has demonstrably improved instructional quality and offers a novel pathway for cultivating chemistry professionals with a global perspective and innovative capabilities.

Key Words: Cloud computing platform; Domestic software; Theoretical and computational chemistry; Specialty feature course

1 引言

理论与计算化学是化学学科的重要分支, 融合了热力学、统计力学和量子力学等数学和物理方法, 为理解和预测化学现象提供了新的科学视角。通过数值计算和计算机模拟, 该领域深入探究物质的结构、性质及其转化过程, 从而揭示微观层面的化学规律^[1]。理论与计算化学将物理和化学的基本理论与高效计算算法结合, 使对化学体系的精确描述成为可能, 为解决复杂化学问题开辟了新途径^[2]。在材料科学中, 理论计算不仅在深入理解材料的结构与性能关系方面至关重要, 还为目标

收稿: 2024-10-21; 录用: 2024-12-25; 网络发表: 2025-03-19

*通讯作者, Emails: syj19@tju.edu.cn (孙雅静); feijiao@tju.edu.cn (焦飞)

基金资助: 教育部产学合作协同育人项目(230907576130857); 天津大学理学院课程思政项目

材料的合理设计提供了科学依据。因此，在课堂上引入理论计算的实践和探索项目尤为重要，这不仅能够让学生接触到前沿的计算方法，提升他们对材料结构和性质的理解，还能够有效培养学生的批判性思维和解决问题的能力，对学生的全面成长具有深远意义^[3]。

当前，尽管已有许多成熟的商业软件可用于理论计算，但在将这些计算原理应用于学生实际接触的复杂体系时，往往需要大量计算资源支持。理论计算研究常依赖高性能计算集群和专业软件，通过并行计算来处理庞大的数据量，这对学生的计算能力提出了较高要求。此外，大多数商业软件受限于版权问题，难以合法地应用于普及性课堂。因此，开展这类课程需要选择合适的计算平台，并设计合理的教学路径，以确保计算资源的可及性，同时实现预期的教学目标。

随着云计算平台的普及，专业软件运行环境可通过云服务器轻松搭建，避免了计算机基础薄弱的学生为配置Linux环境及解决程序、语言兼容性问题而花费大量时间。这极大降低了本科生在学习和应用中的技术门槛。此外，国产开源软件的快速发展也为教学提供了更多选择。许多国产开源软件不仅具有较高的计算精度，还具备良好的用户体验。因此，将云计算平台与优秀的国产软件引入本科生专业课程，不仅具备可行性，还为构建普及性、易操作的教学方案提供了广阔前景。本研究在天津大学本科课程“新能源材料与化学”中引入Bohrium云计算平台，为学生提供便捷的计算资源支持，帮助学生更轻松地地进行计算模拟操作，进一步理解理论与计算化学的核心内容。

2 云计算平台及其在教学中的应用

云计算平台的概念最早可追溯至20世纪90年代末。随着互联网技术的发展，人们开始探索通过互联网提供计算资源和服务。最初，这些服务主要用于数据存储和网页托管。进入21世纪后，云计算服务快速发展，标志性事件是亚马逊于2006年推出的Amazon Web Services (AWS)，随后微软的Azure、谷歌的Google Cloud Platform (GCP)、IBM Cloud以及阿里巴巴的阿里云等相继推出，推动云计算成为主流^[4]。在化学和材料科学领域，云计算平台的应用非常广泛。云计算平台不仅提供了强大的计算能力和存储资源，还通过高通量计算和分子模拟大大加速了科学研究的进程。例如，材料科学研究中，云计算平台支持分子动力学模拟，帮助预测材料的性能，加速新材料的设计与开发。高通量计算更是其重要应用之一，它可以使得研究人员在短时间内筛选大量的候选材料，提高研究效率。此外，云计算平台还可以用来构建和管理材料数据库，这些数据库可以整合机器学习模块，辅助预测和分析材料性能。在教育和研究领域，云计算平台可以提供灵活的高性能计算资源，让研究人员和学生无需本地部署昂贵硬件，即可进行复杂的科学计算和模拟。云计算平台还支持从第一性原理计算到分子动力学模拟等多尺度计算方法，满足不同研究需求。同时，云计算平台提供的数据后处理功能，可以自动化分析实验与计算数据、调整参数，极大提高科研效率^[5]。总而言之，云计算平台的应用大大推动了化学与材料科学的研究进展，不仅提升了研究的效率和质量，还显著降低了研究成本，使更多团队能够参与到复杂科学计算中。

Bohrium是深势科技推出的科研云计算平台，专为支持科研与教学而设计，致力于优化第一性原理计算、分子动力学等微尺度科学计算流程^[6]。Bohrium平台不仅提供了Notebook平台、课程平台、比赛平台等教学实训工具，还集成了基于大语言模型的AI科研助手、科研APP平台和开发者工具，全面提升创新效率，解放科研生产力。此外，针对传统教学中的算力资源不足和服务器配置困难的问题，Bohrium通过镜像技术提供了充足的高性能算力、搭建了便捷的计算模拟环境，特别适合于理论计算和材料科学的教学设计。教师可以根据教学需求自定义服务器环境配置并生成镜像，学生则可直接访问指定镜像，避免了繁琐的环境配置(图1)。平台内置了丰富的科学计算软件和工具集，包括LAMMPS、DMFF和ABACUS等，加上其配置的集成Notebook和课程平台，实现了可视化界面和一体化的教学实训，为教师和学生提供了一个便捷而高效的学习与研究环境。特别地，Bohrium的Notebook环境允许教师编写包含可执行代码、文本、图片及公式的文档，便于教学内容的展示和学生的互动学习。通过Notebook，教师和学生可以轻松共享和协作，实现资源的有效利用和知识的共

建。Notebook的内核基于Jupyter, 提供两种类型的单元格: 文本单元格用于添加教学说明或展示理论内容, 而代码单元格则支持编写和执行计算代码, 实时展示结果。学生可以在无专业软硬件设备, 仅具备基本的代码基础能力, 如Python基础的情况下, 即可单独运行每个计算任务模块。同时, 考虑到低年级本科生较少的代码实践经历, 在课程设置时, 平台也提供了在Notebook中详细解释代码含义的注释框, 同时平台上基于大语言模型的代码解释助手“Bohr LLM assist”也可以帮助学生快速理解、掌握并实践代码。这种设计使得学生无需深入学习Linux系统知识即可直接参与计算实践, 简化了学习过程。此外, 平台采用弹性调度和按需付费的模式, 优化资源分配, 提高了计算资源的使用效率, 使Bohrium平台能够成为微尺度科学计算和学习的理想工具, 并能极大提高教学和科研的融合效率。

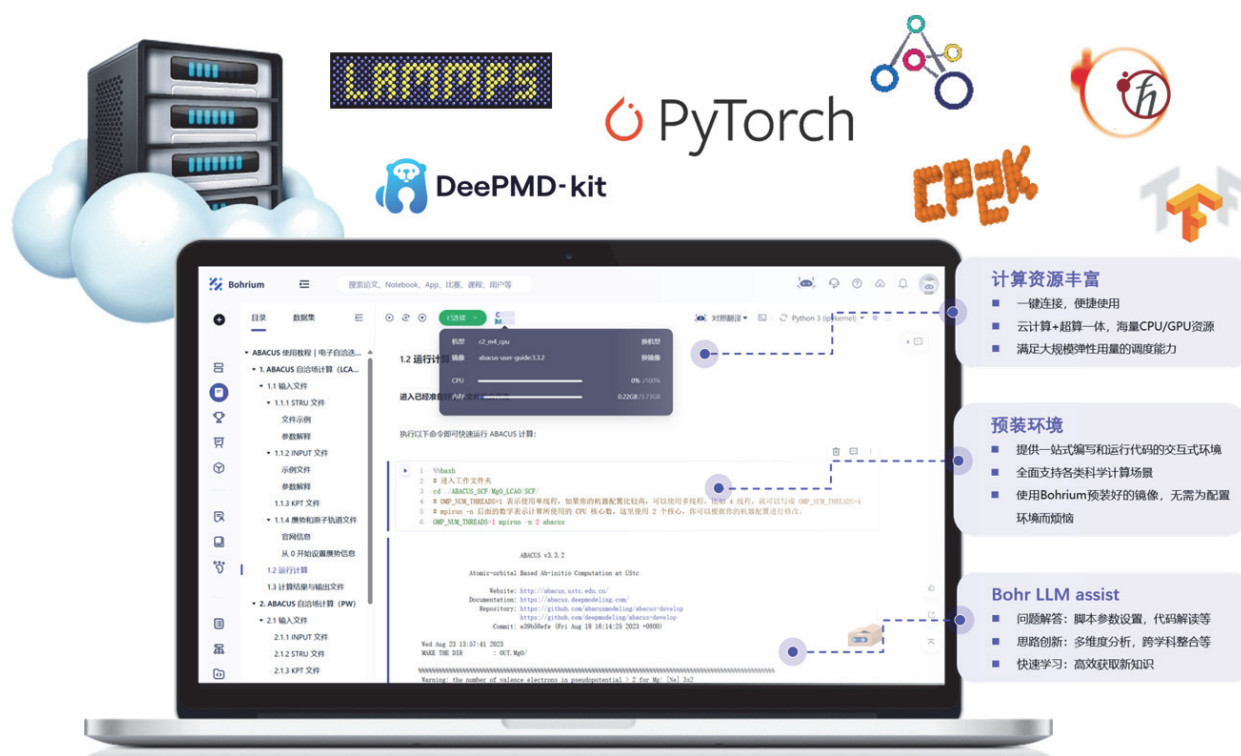


图1 Bohrium云计算平台示意图

3 课程设计与教学模块

本工作基于天津大学“新能源材料与化学”课程, 围绕课程中的材料性质基础计算内容, 设计了为期6课时的理论实践模块(图2), 旨在帮助学生快速掌握材料计算化学中的核心技术, 为学生日后的科研或工程实践打下坚实基础。根据本课程内容的要求, 该实践模块围绕计算材料学的基础计算步骤展开, 主要聚焦于热电、光伏等新能源材料的基本性质计算, 学习和实践包括自洽计算、结构优化、电子能带结构、能态密度、声子特性以及热力学性质等关键计算方法。通过系统的理论教学与实践操作, 学生将不仅学习到如何进行材料的结构优化和电子结构分析, 还将深入了解如何通过计算预测材料的热学与力学性能, 为材料的设计与应用提供科学依据。

为了确保学生能够在有限的时间内掌握计算化学的核心技能, 课程内容根据计算原理的递进顺序进行安排。具体来说, 课程可分为两个主要部分: 电子结构性质计算和晶格振动性质计算^[7]。第一部分主要集中于通过自洽计算获得电荷性质, 并进一步计算其电子能带结构和态密度, 以分析材料的电学特性。第二部分则侧重于声子特性和热力学性质的计算, 帮助学生理解材料的晶格振动行为

及其对热导率等物理性质的影响。这两部分内容通过交替安排，保证学生能够系统掌握从基础电子结构计算到材料动力学特性的全面分析方法。此外，课程的设计不仅关注计算方法的传授，更注重学生通过具体案例来巩固和应用所学知识。为了实现这一目标，课程特别选择了二维磷烯作为案例材料，帮助学生实现从结构优化到性能计算的完整计算过程。在学习过程中，学生将使用所学的理论与方法，通过计算模拟获得材料的电子和晶格振动性质，并分析这些性质与材料性能之间的关系。通过这样的案例教学，学生不仅能更好地理解计算化学的原理，还能够将计算工具与实际材料的研究和设计相结合，进一步加深对材料科学的理解。



图2 天津大学“新能源材料与化学”课程实践模块示意图

借助于Bohrium云计算平台提供的计算资源，课程设计避免了学生在计算机配置和系统兼容性方面遇到的技术障碍。ABACUS软件作为国产开源软件，具备高效且精准的计算能力，适合进行本课程中涉及的各类计算任务。为了确保学生能够顺利掌握计算过程中的每个步骤，所有的计算操作都在Bohrium平台的Notebook中提供了详细的注释与说明。如图3所示，我们在每一讲课程中均设计了



图3 课程Notebook示意图

“理论知识概述”和“操作案例”两部分学习内容，同时提供了完整的数据文件和代码解析。这不仅帮助学生逐步理解每一个计算步骤的实际意义，还使他们能够轻松跟随操作流程，逐步实现从理论学习到计算实践的无缝对接。考虑到Python已成为国内大多数高等院校本科计算机编程课程最常用的语言选择，我们采用Python作为本课程的编程语言对课程内容进行编纂。结合Python灵活性优势，学生可以在Notebook环境下快速实现各类计算任务，并通过实际编程加深对计算原理的理解。通过6课时的实践模块学习，学生不仅能够掌握材料的电子结构和晶格振动特性的计算方法，还能够通过计算分析材料的性能，进一步提升他们在材料设计和研究中的应用能力。课程的最终目标是让学生不仅能熟练操作计算工具，还能够理解计算背后的理论原理，并能运用这些知识解决实际科研问题。此外，课程通过案例分析和实践操作，培养了学生的批判性思维、创新思维以及解决实际问题的能力，帮助他们在未来的科研或工业工作中具备更强的独立思考与分析能力。

4 实践案例

本课程选取了二维磷烯作为教学案例。磷烯是一种具有独特物理和电子性质的材料，近年来在热电、光伏等新能源材料领域引起了广泛关注。通过这一案例，学生可以全面体验从结构优化到性能计算的全过程，并深入了解材料的电子结构和晶格振动的性质。

在Bohrium云计算平台上，依据本课程教学要求和主要内容编写有详细的Notebook，涵盖理论知识概述和实际操作步骤。为了方便学生操作，平台上还配置了相应的镜像环境，学生只需登录平台即可直接选择并运行相应的课程模块(登录平台→选择Notebook→开始连接→选择镜像)(见图3)。这种方式避免了因个人电脑环境配置问题而浪费时间。此外，所需的原始数据文件也可以直接调用，进一步节省了文件准备的时间。静态自洽计算是材料计算的基础步骤，许多材料性质的计算都以此为起点，课程的第1讲对这一内容进行了详细的介绍。在第1讲的案例中首先展示了所需的输入文件(如结构文件STRU、设置文件INPUT、k点文件KPT等)，并对文件内容进行了详细解释，帮助学生理解每项参数的具体意义。学生可以在Notebook中学习理论知识并进行操作实践，自洽迭代过程的每一步输出结果都清晰展示(见图4)，这极大地方便了学生的学习，也提升了教师的教学效率。在第1讲的最后，设置了一个拓展性作业，即电荷分布的可视化。学生可以在平台查看该作业的详细步骤，感兴趣的学生可使用免费软件(如VESTA)对计算出的电荷分布进行可视化^[8]，帮助学生更加直观地理解材料的电子结构分布。这个任务不仅锻炼了学生的动手能力，还增加了课程的趣味性，提高了学生的学习兴趣。

理解并掌握第1讲的基础内容后，学生将进入到下一个阶段：结构优化、电子能带结构和电子态密度的学习。这些内容安排在第2至第4讲，学生将在Bohrium云计算平台提供的案例中，逐步学习并掌握这些关键的计算方法。通过本阶段的学习，学生将能够设置合理的计算精度，获得材料的最优构型，并进一步计算其态密度和能带结构(见图5)。在这一过程中，输入文件的内容与第1讲有所不同，Notebook中对不同参数设置进行了详细说明。完成能带结构和态密度计算后，学生可以利用Notebook中内置的可视化工具，运行Python脚本直接生成态密度图和能带结构图。这种操作体验不仅方便了数据可视化，也为学生深入理解材料的电子性质奠定了坚实基础。在课程的第5和第6讲中，将重点探讨声子特性及其相关性质。在声子性质计算之前，通常需要进行高精度的结构优化，以确保能够准确描述声子特性。这一部分的计算不仅为后续的声子研究奠定基础，也让学生有机会复习并加深对第二讲结构优化知识的理解。获得优化结构后，学生即可进行声子性质计算。第5讲为学生准备了声子谱计算的内容，通常声子谱的计算有两种方法：密度泛函微扰法(DFPT)和有限位移法。鉴于资源限制，本课程采用有限位移法计算声子谱。学生将在Notebook中操作ABACUS和Phonopy软件，计算过程和操作步骤将在Notebook的单元格中详细呈现，学生可以轻松跟随并完成每一步操作。此外，学生还可以利用Notebook中的可视化工具生成并分析声子谱(见图6)，从而直观地观察声子模式与材料特性之间的关系。通过第5讲学习，学生不仅可以获得二维磷烯的声子谱，还能得到其力常

数的数据文件。随后，在第6讲的课程中进一步安排了基于材料力常数文件的热学性质的探讨，如热容(见图6)。在这一部分，学生将学习如何从声子特征中提取并分析材料的热性能。通过这些计算，学生不仅能掌握声子谱的获取方法，还能够深入理解声子特性对材料热学性质的影响。这将为学生在分析和设计具有特定热学性能的材料时，提供理论和实践上的双重支持。

(a) 由此可以获得 STRU 文件，查看文件内容

输入文件查看

```
[3] 1 cat STRU
```

```

ATOMIC_SPECIES
P 30.973761998 P_OBCV_PBE-1.0.upf

NUMERICAL_ORBITAL
P_gga_7au_100Ry_2s2p1d.orb

LATTICE_CONSTANT
1.8897261238369282

LATTICE_VECTORS
3.2955000000 0.0000000000 0.0000000000
0.0000000000 4.5436000000 0.0000000000
0.0000000000 0.0000000000 22.0994000000

ATOMIC_POSITIONS
Direct
P
0.0000000000
4
0.0435800000 0.8949400000 0.4525200000 1 1 1 mag 0.0
0.5435800000 0.5725700000 0.4525200000 1 1 1 mag 0.0
0.0435800000 0.0725700000 0.5473600000 1 1 1 mag 0.0
0.5435800000 0.3949400000 0.5473600000 1 1 1 mag 0.0
        
```

参数详细解释

参数解释

- ATOMIC_SPECIES

从左到右依次为原子种类、相对原子质量、赝势文件

- NUMERICAL_ORBITAL

原子轨道文件

- 赝势文件 `P_OBCV_PBE-1.0.upf` 可放在 `upf` 目录下，
- 轨道文件 `P_gga_7au_100Ry_2s2p1d.orb` 可放在 `orb` 目录下。

`upf` 和 `orb` 文件路径在 `INPUT` 文件中进行设置，赝势和轨道文件可以从 [ABACUS](#) 网站下载。

代码单元格

```
[16] 1 import numpy as np
2
3 # 读取 BANDS_1.dat 文件
4 bands_1_file_path = 'BANDS_1.dat'
5 with open(bands_1_file_path, 'r') as file:
6     bands_1_content = file.readlines()
7
8 # 解析 BANDS_1.dat 文件内容
9 bands_1_data = []
10 for line in bands_1_content:
11     parts = line.split()
12     k_path_value = float(parts[1])
13     energy_levels = [float(energy) for energy in parts[2:]]
14     bands_1_data.append((k_path_value, energy_levels))
15
16 # 提取 k-points 和能带数目
17 NPOINTS = len(bands_1_data)
18 NBANDS = len(bands_1_data[0][1])
19
20 # 创建字典以存储每个能带的数据
21 bands_dict = {}
22
23 # 填充字典
24 for k_path_value, energy_levels in bands_1_data:
25     for i in range(NBANDS):
26         bands_dict[(k_path_value, energy_levels[i])]
27
28 # 生成新的 BAND.dat 格式数据
29 new_band_data = []
30 new_band_data.append(f"%K-Path(1/A) Energy-Level(eV)\n")
31 new_band_data.append(f"% NPOINTS & NBANDS: (NPOINTS) (NBANDS)\n")
32
33 # 写入每个能带的信息
34 for band_index in range(NBANDS):
35     new_band_data.append(f"% Band-Index {band_index - 1}\n")
36     for k_path_value, energy_level in bands_dict[band_index]:
37         new_band_data.append(f"% {k_path_value:.5f} {energy_level:.6f}\n")
38
39 # 输出到 NEW_BAND.dat 文件
40 output_file_path = 'NEW_BAND.dat'
41 with open(output_file_path, 'w') as file:
42     file.writelines(new_band_data)
43
44 print(f"转换完成，文件已保存为 {output_file_path}")
45
        
```

(b)

ABACUS v3.3.2

Atomic-orbital Based Ab-initio Computation at UStc

Website: <http://abacus.ustc.edu.cn/>
 Documentation: <https://abacus.deepmodeling.com/>
 Repository: <https://github.com/abacusmodeling/abacus-develop>
<https://github.com/deepmodeling/abacus-develop>
 Commit: e39b50efe (Fri Aug 18 16:14:25 2023 +0800)

Tue Sep 3 16:07:16 2024
 MAKE THE DIR : OUT.P/
 UNIFORM GRID DIM : 40 * 60 * 270
 UNIFORM GRID DIM (BIG) : 8 * 12 * 90
 DONE(0.109899 SEC) : SETUP UNITCELL
 DONE(0.15994 SEC) : SYMMETRY
 DONE(0.286659 SEC) : INIT K-POINTS

计算的输出内容

Self-consistent calculations for electrons

| SPIN | KPOINTS | PROCESSORS | NBASE |
|------|---------|------------|-------|
| 1 | 27 | 2 | 52 |

Use Systematically Improvable Atomic bases

| ELEMENT | ORBITALS | NBASE | NATOM | XC |
|---------|------------|-------|-------|----|
| P | 2s2p1d-7au | 13 | 4 | |

Initial plane wave basis and FFT box

SELF-CONSISTENT :

START CHARGE : atomic

2.2 电荷分布可视化

计算结果之后输出电荷密度文件SPIN1_CHG.cube，保存在OUT.P/，可用VESTA进行可视化

拓展可视化作业



(c)

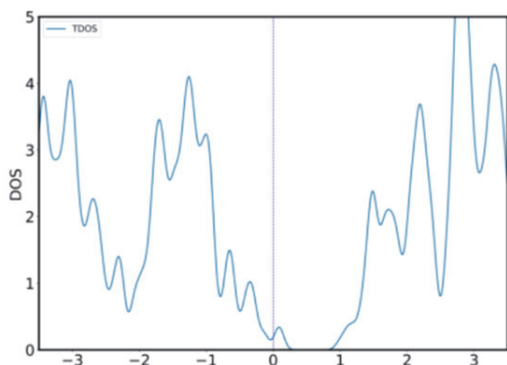
图4 Notebook操作

(a) 云计算平台操作示意；(b) 云计算平台计算结果输出展示；(c) 电荷分布可视化示意图

(a)

```

1 import matplotlib.pyplot as plt
2 from PIL import Image
3 plt.axis('off')
4 plt.imshow(Image.open('tdos.png'))
5 plt.show()
    
```



(b)

```

1 import matplotlib.pyplot as plt
2 from PIL import Image
3 plt.axis('off')
4 plt.imshow(Image.open('band.png'))
5 plt.show()
    
```

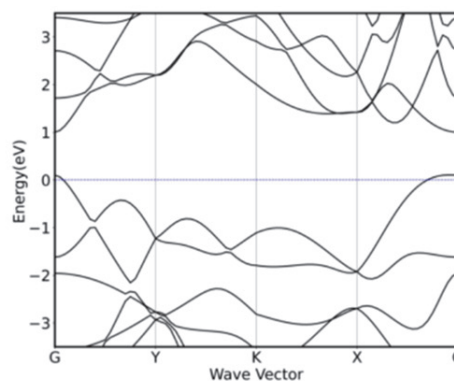
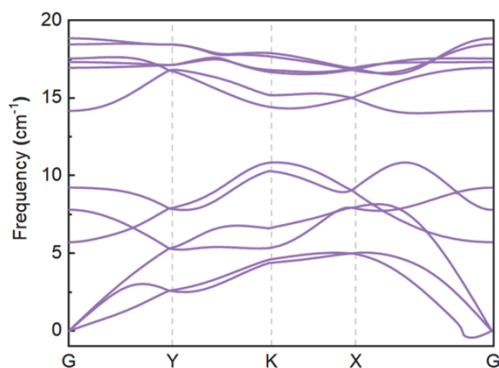


图5 课程计算结果示意图

(a) 态密度图; (b) 能带结构图

(a)



(b)

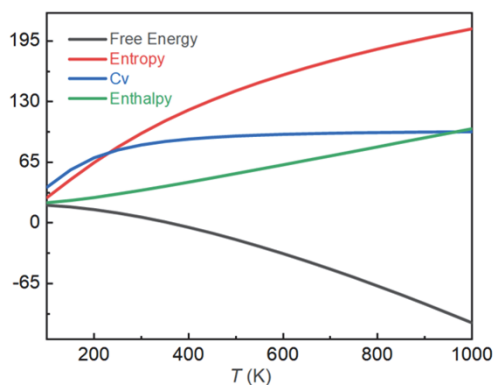


图6 二维磷烯声子谱(a)和热力学性质(亥姆霍兹自由能、熵、比热容和焓)示意图(b)

云计算平台的引入极大地简化了操作过程，同时提供了充足的计算资源，避免了硬件限制对学习进度的影响，使学生能够专注于科学问题的分析，而不被繁琐的计算步骤所干扰。课程内容配合 Notebook 中的详细注释，有效地将理论与实践相结合，增强了学习的连贯性。通过本次实践课程，学生在计算化学领域获得了全面的实践经验，掌握了使用计算工具进行材料性能预测与分析的能力，同时深入理解了材料多种物理性质之间的内在联系。课程中案例教学的应用，进一步强化了学生的批判性思维和创新能力，为他们未来在材料科学研究或技术开发方面打下了坚实的基础。此外，云平台的应用提高了课堂互动性，激发了学生在模拟实验中的积极性和主动性，有效提升了他们的理论理解和计算能力。课程结构紧凑且层次分明，通过案例教学和精心设计的操作步骤，学生能够在较短时间内掌握复杂的材料计算技术，并将其应用于实际材料的分析。这一教学模式显著提高了学生的学习兴趣，并激发了他们探索和解决问题的动力。

5 结语

本研究探索了将云计算平台与国产开源软件融入化学教育的新模式，展示了技术如何转变传统教学模式并丰富教学内容。通过将Bohrium云计算平台引入天津大学“新能源材料与化学”课程，本研究成功地将理论与计算化学的核心知识带入本科教学。云计算平台的应用不仅显著降低了学生在进行复杂计算时的技术门槛，还提供了丰富的计算资源支持，使学生能够更加专注于科学问题的探索。此外，国产开源软件ABACUS的引入，使学生能够在实践中体验到高效且精准的计算工具，深化了他们对科学概念的理解和应用。这种教学模式强调了实践和理论的结合，证明了教育技术在培养未来科学家中的重要应用。随着技术的不断进步和教育需求的不断变化，我们期待这一创新的教学方法能够在全球范围内得到更广泛的应用，为化学、材料科学及相关领域培养出更多具有国际竞争力和创新能力的专业人才。

参 考 文 献

- [1] Lu, Y. Y.; Deng, G.; Shuai, Z. G. *Pure Appl. Chem.* **2021**, *93* (12), 1423.
- [2] Merchant, A.; Batzner, S.; Schoenholz, S. S.; Aykol, M.; Cheon, G.; Cubuk, E. D. *Nature* **2023**, *624*, 80.
- [3] 帅志刚. 科学通报, **2018**, *63* (33), 3394.
- [4] 张鑫, 孙力, 田超, 王文保. 大学化学, **2017**, *32* (3), 70.
- [5] 任立峰. 集成电路应用, **2023**, *40* (9), 98.
- [6] 许真铭, 王一博, 刘振辉, 陈铎, 郑明波, 申来法. 大学化学, **2025**, *40* (3), 36
- [7] 陈敏伯. 计算化学——从理论化学到分子模拟. 北京: 科学出版社, 2018.
- [8] 钱银银, 许瑞. 大学化学, **2024**, *39* (3), 103.