

上海交通大学研究生课程开设申请表

New Graduate Course Application Form, SJTU

课程基本信息 Basic Information				
*课程名称 Course Name	(中文 Chinese) 材料信息学 - 材料中的大数据与机器学习			
	(英文 English) Materials Informatics - Big Data and Machine Learning in Materials			
*学分 Credits	3	*学时 Teaching Hours	48 (1 学分 ≥ 16 课时)	
*开课学期 Semester	秋季 Fall	*是否跨学期 Cross-semester?	否	跨 Spanning over 个 学期 Semesters。
*课程性质 Course Category	专业课 Major Course	*课程分类 Course Type	全日制 Full-time	
*授课语言 Instruction Language	中文 Chinese			
*成绩类型 Grade	等级制 Letter Grade			
*开课院系 School	(050) 材料科学与工程学院 School of Materials Science & Engineering			
所属学科 Subject	0805 材料科学与工程			
负责教师 Person in charge	姓名 Name	工号 ID	单位 School	联系方式 E-mail
	汪洪			hongwang2@sjtu.edu.cn
课程扩展信息 Extended Information				
*课程简介 (中文) Course Description	近年来, 大数据及人工智能作为新兴学科得到了快速发展和推广, 在材料科学中体现为材料信息学, 成为今后材料科学与工程学科研究模式发展的趋势, 有利于加快材料的研发速度, 降低成本。为适应这种模式转变, 对接国家科技创新战略、顺应材料学科发展潮流, 特为研究生专门开设本课程。主要授课内容涉及数据驱动的材料科学概述、数据库与数据标准、高通量计算、实验方法与案例, 并将较为系统地讲授机器学习算法及案例等。本课程旨在使学生了解数据驱动材料科学的内涵及趋势; 理解和掌握信息学的基本方法和代码; 具备应用信息学手段解决材料设计问题能力, 是材料专业研究生获得材料信息学基础技能、接轨国际研究热点的有效途径。			
*课程简介 (English) Course	In recent years, big data and artificial intelligence, as a new			

Description	<p>discipline, have been rapidly developed and popularized, which is embodied in Material Informatics in material science. It has become the trend of research mode development of material science and Engineering in the future, which is conducive to accelerating the research and development of materials and reducing costs. This course is offered to graduate students to prepare them for the paradigm shift. The main contents of the course include data-driven material science overview, database and data standards, high-throughput computing, high-throughput experimental methods and use cases. Machine learning algorithms and cases will be systematically taught. The purpose of this course is to enable students to understand the connotation and trend of data-driven material science, understand and master the basic methods and codes of Informatics, and have the ability to solve material design problems by means of informatics. It is an effective way for graduate students majoring in materials to acquire basic skills of material informatics and connect with international research hotspots.</p>																																																			
*教学大纲 (中文) Syllabus	<table border="1" data-bbox="424 943 1407 1968"> <thead> <tr> <th data-bbox="424 943 975 1025">教学内容</th> <th data-bbox="979 943 1121 1025">授课学时</th> <th data-bbox="1126 943 1268 1025">教学方式</th> <th data-bbox="1273 943 1407 1025">授课教师</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td data-bbox="424 1025 975 1108">数据驱动的材料科学概述</td> <td data-bbox="979 1025 1121 1108">4</td> <td data-bbox="1126 1025 1268 1108">授课</td> <td data-bbox="1273 1025 1407 1108">汪洪</td> </tr> <tr> <td data-bbox="424 1108 975 1191">数据库与数据标准</td> <td data-bbox="979 1108 1121 1191">2</td> <td data-bbox="1126 1108 1268 1191">授课</td> <td data-bbox="1273 1108 1407 1191">汪洪</td> </tr> <tr> <td data-bbox="424 1191 975 1296">高通量实验设计的思路、类型、相关技术、数据处理方法</td> <td data-bbox="979 1191 1121 1296">4</td> <td data-bbox="1126 1191 1268 1296">授课</td> <td data-bbox="1273 1191 1407 1296">张澜庭</td> </tr> <tr> <td data-bbox="424 1296 975 1379">高通量虚拟实验教学</td> <td data-bbox="979 1296 1121 1379">2</td> <td data-bbox="1126 1296 1268 1379">上机</td> <td data-bbox="1273 1296 1407 1379">张澜庭</td> </tr> <tr> <td data-bbox="424 1379 975 1462">材料跨尺度/多尺度计算概述</td> <td data-bbox="979 1379 1121 1462">6</td> <td data-bbox="1126 1379 1268 1462">授课</td> <td data-bbox="1273 1379 1407 1462">张澜庭</td> </tr> <tr> <td data-bbox="424 1462 975 1545">几类基础性能的算法、高通量计算实现方法</td> <td data-bbox="979 1462 1121 1545">2</td> <td data-bbox="1126 1462 1268 1545">授课</td> <td data-bbox="1273 1462 1407 1545">张澜庭</td> </tr> <tr> <td data-bbox="424 1545 975 1628">高通量计算案例及上机实验</td> <td data-bbox="979 1545 1121 1628">2</td> <td data-bbox="1126 1545 1268 1628">上机</td> <td data-bbox="1273 1545 1407 1628">张澜庭</td> </tr> <tr> <td data-bbox="424 1628 975 1711">期中考试</td> <td data-bbox="979 1628 1121 1711">2</td> <td data-bbox="1126 1628 1268 1711">考试</td> <td data-bbox="1273 1628 1407 1711">汪洪</td> </tr> <tr> <td data-bbox="424 1711 975 1794">机器学习概述、模型评估</td> <td data-bbox="979 1711 1121 1794">2</td> <td data-bbox="1126 1711 1268 1794">授课</td> <td data-bbox="1273 1711 1407 1794">鞠生宏</td> </tr> <tr> <td data-bbox="424 1794 975 1877">线性回归、支持向量机、聚类、降维理论学习</td> <td data-bbox="979 1794 1121 1877">4</td> <td data-bbox="1126 1794 1268 1877">授课</td> <td data-bbox="1273 1794 1407 1877">鞠生宏</td> </tr> <tr> <td data-bbox="424 1877 975 1968">线性回归、支持向量机、聚类、降维上机练习</td> <td data-bbox="979 1877 1121 1968">2</td> <td data-bbox="1126 1877 1268 1968">上机</td> <td data-bbox="1273 1877 1407 1968">鞠生宏</td> </tr> </tbody> </table>				教学内容	授课学时	教学方式	授课教师	数据驱动的材料科学概述	4	授课	汪洪	数据库与数据标准	2	授课	汪洪	高通量实验设计的思路、类型、相关技术、数据处理方法	4	授课	张澜庭	高通量虚拟实验教学	2	上机	张澜庭	材料跨尺度/多尺度计算概述	6	授课	张澜庭	几类基础性能的算法、高通量计算实现方法	2	授课	张澜庭	高通量计算案例及上机实验	2	上机	张澜庭	期中考试	2	考试	汪洪	机器学习概述、模型评估	2	授课	鞠生宏	线性回归、支持向量机、聚类、降维理论学习	4	授课	鞠生宏	线性回归、支持向量机、聚类、降维上机练习	2	上机	鞠生宏
教学内容	授课学时	教学方式	授课教师																																																	
数据驱动的材料科学概述	4	授课	汪洪																																																	
数据库与数据标准	2	授课	汪洪																																																	
高通量实验设计的思路、类型、相关技术、数据处理方法	4	授课	张澜庭																																																	
高通量虚拟实验教学	2	上机	张澜庭																																																	
材料跨尺度/多尺度计算概述	6	授课	张澜庭																																																	
几类基础性能的算法、高通量计算实现方法	2	授课	张澜庭																																																	
高通量计算案例及上机实验	2	上机	张澜庭																																																	
期中考试	2	考试	汪洪																																																	
机器学习概述、模型评估	2	授课	鞠生宏																																																	
线性回归、支持向量机、聚类、降维理论学习	4	授课	鞠生宏																																																	
线性回归、支持向量机、聚类、降维上机练习	2	上机	鞠生宏																																																	

	决策树、蒙特卡洛树理论学习	2	授课	鞠生宏
	决策树、蒙特卡洛树上机练习	2	上机	鞠生宏
	贝叶斯优化、神经网络理论学习	4	授课	鞠生宏
	贝叶斯优化、神经网络上机练习	2	上机	鞠生宏
	机器学习在材料设计中的应用	4	授课	鞠生宏
	期末考试	2	考试	鞠生宏

*教学大纲 (English) Syllabus	Content	Hours	Format	Instructor
	Overview of data-driven materials science	4	Lecture	Hong Wang
	Materials database and standards	2	Lecture	Hong Wang
	High-throughput experiments	4	Lecture	Lanting Zhang
	Vitural high-throughput experiments	2	Computer experiment	Lanting Zhang
	Overview of multi-scale computational materials science	6	Lecture	Lanting Zhang
	High-throughput algorithms	2	Lecture	Lanting Zhang
	High-throughput computational experiment	2	Computer experiment	Lanting Zhang
	Mid-term exam	2	Mid-term exam	Hong Wang
	Overview of machine learning and model evaluation	2	Lecture	Shenghong Ju
	Linear regression, support vector machine, clustering, dimensionality reduction	4	Lecture	Shenghong Ju
	Computer experiment for linear regression, support vector machine, clustering, dimensionality reduction	2	Computer experiment	Shenghong Ju

	Decision tree, Monte Carlo tree search	2	Lecture	Shenghong Ju
	Computer experiment for decision tree, Monte Carlo tree search	2	Computer experiment	Shenghong Ju
	Bayesian optimization, neural network	4	Lecture	Shenghong Ju
	Computer experiment for Bayesian optimization, neural network	2	Computer experiment	Shenghong Ju
	Applications of machine learning in materials design	4	Lecture	Shenghong Ju
	Final exam	2	Final exam	Shenghong Ju
*课程要求 (中文) Requirements	课程考核方式: 1). 平时作业, 上机实验, 占总分 30% 2). 期中考试, 覆盖大约 50%次课内容, 占总分 30% 3). 期末考试, 覆盖大约 50%次课内容, 占总分 40%			
*课程要求 (English) Requirements	1). Homework and computer experiment, 30% 2). Mid-term exam, 30% 3). Final exam, 40%			
课程资源 (中文) Resources				
课程资源 (English) Resources				
备注 Note				