



## Атомістична інформатика матеріалів Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

### Реквізити навчальної дисципліни

<b>Рівень вищої освіти</b>	<b>другий (магістерський)</b>
<b>Галузь знань</b>	13 Механічна інженерія
<b>Спеціальність</b>	132 Матеріалознавство
<b>Освітня програма</b>	Освітньо-наукова програма Матеріалознавство
<b>Статус дисципліни</b>	Вибіркова
<b>Форма навчання</b>	очна(денна)/дистанційна
<b>Рік підготовки, семестр</b>	2 курс, 3 семестр (осінній)
<b>Обсяг дисципліни</b>	4 кредити/120 год: лекцій – 18 год; лабораторних занять -18 год; самостійна робота студента 84 год
<b>Семестровий контроль/ контрольні заходи</b>	залік / МКР
<b>Розклад занять</b>	<a href="http://rozklad.kpi.ua/Schedules/ViewSchedule.aspx?v=993b2bb7-baad-4c26-ae8c-c934615cdf85">http://rozklad.kpi.ua/Schedules/ViewSchedule.aspx?v=993b2bb7-baad-4c26-ae8c-c934615cdf85</a>
<b>Мова викладання</b>	Українська
<b>Інформація про керівника курсу / викладачів</b>	Лектор: канд. хім. наук, доцент Васильєв Олександр Олексійович, <a href="mailto:o.vasiliev@outlook.com">o.vasiliev@outlook.com</a> , +380673874349 Лабораторні: канд. хім. наук, доцент Васильєв Олександр Олексійович, <a href="mailto:o.vasiliev@outlook.com">o.vasiliev@outlook.com</a> , +380673874349
<b>Розміщення курсу</b>	Інтегроване середовище спільної роботи <a href="http://matsimlab.pp.ua">matsimlab.pp.ua</a> : <ul style="list-style-type: none"><li>- Сайт, календар, матеріали курсу;</li><li>- Груповий чат та засіб для відеоконференцій;</li><li>- Засоби опитувань та тестувань;</li><li>- Журнал успішності;</li><li>- Середовище для видачі та виконання практичних завдань.</li></ul>

### Програма навчальної дисципліни

#### 1. Опис навчальної дисципліни, її мета, предмет вивчення та результати навчання

Застосування комп'ютерних алгоритмів для атомістичного моделювання набуває все більш широкого вжитку для пришедження відкриття нових матеріалів, розвідки їх властивостей, прототипування умов отримання та напрямків застосування. З їх використанням шлях від ідеї до ринку може бути скорочено з десятиліть до років і навіть місяців. Активний розвиток атомістичних розрахунків за принципами квантової механіки за теорією функціоналу електронної густини зробив можливим таке використання комп'ютерних алгоритмів для прогнозування властивостей простих систем з точністю зіставною з експериментом. Революційний розвиток методів машинного навчання, в тому числі штучних нейронних мереж, та їх адаптація до проблем матеріалознавства робить подібні розрахунки доступними для систем недоступних раніше розмірів та рівня складності. Тому розрахункові зусилля займають все більш вагоме місце у сталій дослідницькій діяльності провідних матеріалознавчих лабораторій та підприємств світу. Разом з тим, "проривну" діяльність у галузі (стартапи) вже зараз не можливо уявити без застосування інформатики матеріалів.

В дисципліні буде зокрема розглянуто:

- Універсальне програмне середовище для атомістичної інформатики матеріалів (JupyterNotebooks, AtomicSimulationEnvironment).
- Основи розрахунків з перших принципів за теорією функціоналу електронної густини для індивідуальних твердих речовин з пакетом програм QuantumEspresso:
  - рівноважна структура матеріалів та передбачення їх спектрів рентгенівської дифракції
  - розрахунок електронних спектрів та оцінка ширини забороненої зони
  - розрахунок вібраційних властивостей (оцінка раманівських та ІЧ спектрів, вібраційна термодинаміка)
  - розрахунок граничних значень основних механічних характеристик матеріалу
  - оцінка граничних значень теплофізичних властивостей матеріалу
  - вивчення фізико-хімічних процесів та механізмів реакцій на твердих поверхнях
- Застосування методів машинного навчання для атомістичного моделювання та прогнозування властивостей складних систем (твердих розчинів) та систем великого розміру
  - Класичне машинне навчання: кластерний розклад з пакетом icet
  - Нейронні мережі: міжатомні потенціали з пакетом NequIP
- Використання масивних відкритих баз даних (BigData, MaterialsGenome) для пошуку, відкриття та розробки нових матеріалів, в тому числі із використанням машинного навчання, на прикладі репозитаріїв Materials Project та NOMAD
  - Використання веб-інтерфейсу
  - Програмний доступ з OPTIMADE API.

Метою навчальної дисципліни є формування у студентів здатності:

- Ефективно аналізувати передову наукову літературу в галузі відкриття та атомістичної розробки матеріалів, прогнозування їх властивостей
- Застосовувати атомістичне моделювання та розрахунки для супроводу власних експериментальних робіт з розробки та впровадження нових матеріалів
- Ефективно використовувати у власних розробках розрахункові відомості накопичені світовою науковою спільнотою в галузі атомістичного моделювання матеріалів у відкритих базах даних.

А також

- Розвивати фахові компетентності, які полягають у здатності:
  - Здатність виявляти та ставити проблеми в сфері матеріалознавства, приймати ефективні рішення для їх вирішення.
  - Здатність планувати та проводити дослідження в сфері матеріалознавства у лабораторних та виробничих умовах на відповідному рівні з використанням сучасних методів і методик експерименту.
  - Здатність до критичного аналізу та прогнозування характеристик нових та існуючих матеріалів, параметрів процесів їх отримання і обробки та використання у виробі (або у виробничих умовах).

Предметом навчальної дисципліни "Атомістична інформатика матеріалів" є теоретичні підходи до моделювання атомної структури матеріалів та розрахунку їх фізичних та фізико-хімічних властивостей у зв'язку з атомною структурою, програмне забезпечення з їх реалізацією та основні прийоми роботи з ним.

Після засвоєння навчальної дисципліни студент має набутися таких результатів навчання як: знання:

- основ теорії функціоналу електронної густини та атомістичного моделювання матеріалів з її використанням;
- методів машинного навчання для вирішення задач атомістичного моделювання матеріалів;
- принципів дослідження особливостей структури та отримання спектроскопічних даних про матеріали за атомістичними моделями;
- принципів розрахунку електронних, вібраційних та механічних властивостей матеріалів за атомістичними моделями;
- принципів наповнення та функціонування масивних баз даних результатів атомістичного моделювання

уміння:

- налаштовувати та використовувати програмне середовище для атомістичного моделювання та розрахунку властивостей матеріалів на основі публічного (безкоштовне з відкритим кодом) програмного забезпечення;
- готувати вхідні дані, налаштовувати параметри розрахунків з перших принципів за теорією функціоналу електронної густини, здійснювати розрахунки та аналізувати їх результати;
- готувати набори тренування-валідації для атомістичних моделей машинного навчання, тренувати ці моделі та аналізувати їх ефективність;
- розраховувати та аналізувати електронні, вібраційні та механічні властивості матеріалів з використанням атомістичних моделей.

## **2. Пререквізити та постреквізити дисципліни (місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою)**

*Дисципліна викладається в третьому семестрі підготовки за другим (магістерським) рівнем вищої освіти. Дисципліна базується на компетентностях бакалаврського рівня спеціальності Матеріалознавство.*

*Для вивчення навчальної дисципліни “Атомістична інформатика матеріалів” потрібні знання з дисциплін:*

- Інженерне матеріалознавство;
- Базові поняття вищої математики (лінійна алгебра, математичний аналіз, статистика);
- Основи фізики твердого тіла;
- Базові поняття хімії (термодинаміка);
- Основи інформатики (впевнене користування комп’ютером).

*Знання, які здобувач отримує під час вивчення дисципліни “Атомістична інформатика матеріалів”, є необхідними для виконання і захисту магістерської дисертаційної роботи.*

## **3. Зміст навчальної дисципліни**

### **Розділ 1. Основи атомістичної інформатики матеріалів.**

Тема 1.1. Основні поняття інформатики матеріалів.

Тема 1.2. Базовий програмний інструментарій інформатики матеріалів.

### **Розділ 2. Атомістичне моделювання матеріалів за принципами квантової механіки.**

Тема 2.1. Основні теоретичні положення теорії функціоналу електронної густини.

Тема 2.2. Квантово-механічне моделювання матеріалів та розрахунки їх властивостей з пакетом програм Quantum Espresso.

### **Розділ 3. Атомістична інформатика матеріалів на основі даних.**

Тема 3.1. Методи машинного навчання в атомістичній інформатиці матеріалів.

Тема 3.2. Відкриті матеріалознавчі бази даних.

#### **4. Навчальні матеріали та ресурси**

##### *Базова література:*

1. Крячко Є. С. Теорія функціонала густини в атомній фізиці [Електронний ресурс]/ Є. С. Крячко, Є. Ю. Ремета // Укр. фіз. журн. Огляди. 2014. Т. 9, №1. С. 38–140. – Режим доступу: <http://archive.ujp.bitp.kiev.ua/files/reviews/9/r090102pu.pdf>.
2. Ohno K, Esfarjani K, Kawazoe Y. Computational Materials Science. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg; 2018. Available from: <http://link.springer.com/10.1007/978-3-662-56542-1>.
2. Giustino F. Materials modelling using density functional theory: properties and predictions. 1st ed. Oxford: Oxford University Press; 2014.
3. Géron A. Hands-on machine learning with Scikit-Learn, Keras, and TensorFlow: concepts, tools, and techniques to build intelligent systems. Sebastopol, CA: O'Reilly Media, Inc; 2019.

##### *Додаткова література:*

4. Golesorkhtabar R, Pavone P, Spitaler J, Puschnig P, Draxl C. ElaStic: A tool for calculating second-order elastic constants from first principles. Computer Physics Communications. 2013;184:1861–73.
5. Andersen CW, Armiento R, Blokhin E, Conduit GJ, Dwaraknath S, Evans ML, et al. OPTIMADE, an API for exchanging materials data. Sci Data. 2021;8:217.

##### *Електронні ресурси:*

6. Документація conda: <https://docs.conda.io/en/latest/>
7. Документація Jupyter Notebook: <https://jupyter-notebook.readthedocs.io/en/stable/>
8. Основи мови програмування Python: <https://www.kaggle.com/learn/python>
9. Документація Atomic Simulation Environment: <https://wiki.fysik.dtu.dk/ase/>
10. Документація Quantum Espresso: [https://www.quantum-espresso.org/Doc/user\\_guide/](https://www.quantum-espresso.org/Doc/user_guide/)
11. Документація icet: <https://icet.materialsmodeling.org/>
12. Документація NequIP: <https://nequip.readthedocs.io/en/latest/>
13. База даних Materials Project: <https://materialsproject.org/>
14. База даних Aflow: <https://www.aflowlib.org/>
15. База даних NOMAD: <https://nomad-lab.eu/nomad-lab/>
16. Документація OPTIMADE API: <https://www.optimade.org/documentation>

Перелічені книги та статті покликані призначені для розширення обсягу матеріалу до вивчення поза лекційним. Повний обсяг відомостей, необхідних для успішного завершення курсу буде подано у лекційному матеріалі.

### **Навчальний контент**

#### **5. Методика опанування навчальної дисципліни**

Робота студентів над дисципліною передбачає прослуховування лекцій щодо основних теоретичних положень передбачених змістом дисципліни та освоєння необхідних для здійснення атомістичного моделювання та розрахунків практичних навичок під час лабораторних занять /комп'ютерного практикума. Для отримання поглиблених відомостей та практичних навичок студенти можуть використовувати рекомендовані навчальні матеріали та ресурси.

##### **5.1. Лекції**

*Зміст лекційних занять (18 годин – 9 лекцій, одна з яких - Модульна контрольна робота)*  
**Лекція 1. Основи атомістичної інформатики матеріалів.**

Основні поняття, мета та задачі атомістичної інформатики матеріалів, її міждисциплінарний характер, огляд основних опорних понять з дотичних дисциплін: фізичного матеріалознавства, фізики твердого тіла, хімії, математики, інформатики.

*Література:* [1], [2].

### **Лекція 2. Основні теоретичні положення теорії функціоналу електронної густини (DFT).**

Рівняння Шрьодінгера для багатьох тіл та основні методи його наближеного вирішення, теорія функціоналу електронної густини, розрахунок самоузгодженого поля, можливості та обмеження щодо застосування DFT.

*Література:* [2].

### **Лекція 3. Рівноважна структура матеріалів з DFT: теоретичні основи.**

Наближення «фіксованих ядер» Борна-Оппенгайма; сили, що діють на атоми; мінімізація сил, що діють на атоми методом градієнтного спуску; типи структурної мінімізації; симульований відпал.

*Література:* [1]– [3].

### **Лекція 4. Розрахунок фізичних властивостей матеріалів за теорією функціоналу електронної густини.**

Пружні сталі та пружні модулі, оцінка пружних модулів для полікристалічних матеріалів (усереднення Войта, Реуса та Хілла), оцінка твердості за Вікерс; електронна зонна структура.

*Література:* [1]–[3], [5].

### **Лекція 5. Атомістичне моделювання процесів в матеріалах за теорією функціоналу електронної густини.**

Енергетика дифузійних процесів за методом NEB; вібраційні властивості та спектри; молекулярна динаміка.

*Література:* [1]–[3].

### **Лекція 6. Методи машинного навчання в атомістичній інформатиці матеріалів.**

Базові принципи машинного навчання; загальний огляд та класифікація методів машинного навчання; застосування класичного машинного навчання в атомістичному моделюванні матеріалів; застосування нейронних мереж (глибокого машинного навчання) в атомістичному моделюванні матеріалів.

*Література:* [4], [12], [13].

### **Лекція 7. Атомістичне моделювання твердих розчинів з використанням класичного машинного навчання.**

Моделі кластерного розкладу; метод машинного навчання LASSO для лінійної регресії у моделях кластерного розкладу; застосування машинного навчання для побудови моделей кластерного розкладу; підготовка набору тренування-валідації з DFT; тренування моделі та оцінка її ефективності; застосування моделі (енергії змішування та упорядкування в твердих розчинах).

*Література:* [4], [12].

## **Лекція 8. Міжатомні потенціали машинного навчання для атомістичного моделювання складних систем значного розміру.**

Нейронні мережі як міжатомні потенціали; еквіваріантні нейронні мережі на графах як продуктивні високоточні міжатомні потенціали; підготовка набору тренування-валідації з DFT; тренування моделі та оцінка її ефективності; застосування моделі (швидка оптимізація структури та молекулярна динаміка).

*Література:* [4], [13].

## **Лекція 9. Модульна контрольна робота.**

### **5.2. Лабораторні роботи/комп'ютерний практикум**

Основним завданням циклу лабораторних занять/комп'ютерних практикумів є: *Доповнити лекційний матеріал практичною складовою з підготовки базових атомістичних моделей, виконання розрахунків та залучення сторонніх даних для побудови моделей машинного навчання*

#### *Зміст лабораторних занять*

- 1. Організація очного/дистанційного навчання, рейтингова система оціювання. Налаштування, прийоми роботи та побудова базових атомістичних моделей в середовищі Atomic Simulation Environment (4 годин).*
- 2. Структурна оптимізація та отримання теоретичних спектрів рентгенівської дифракції з пакетом Quantum Espresso (4 годин).*
- 3. Моделювання твердих розчинів (сплавів) за методами машинного навчання з пакетом icet (4 годин).*
- 4. Залучення та обробка матеріалознавчих атомістичних даних з програмним інтерфейсом OPTIMADE API (4 годин).*
- 5. Залік (2 години).*

### **6. Самостійна робота аспіранта**

*Самостійна робота здобувачів (загальна тривалість 84 години) з дисципліни полягає в:*

- самостійному опрацюванні літературних джерел для розширення розуміння лекційних тем – в розрахунку 1,5 години на 1 годину лекційного заняття = 24 години;*
- підготовці до виконання лабораторних занять/комп'ютерного практикума – в розрахунку 3 години на 1 годину виконання практичного заняття = 48 годин;*
- підговці до МКР – 6 годин;*
- підготовці до підсумкової атестації – заліку (6 годин).*

## **Політика та контроль**

### **7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)**

*Система вимог, які ставляться перед здобувачем:*

- Відвідування усіх видів занять є бажаним.*
- Завдання пропущеного лабораторного заняття здобувач повинен виконати в час, узгоджений з викладачем.*
- Під час усіх видів аудиторних занять забороняється використання мобільних телефонів у звуковому режимі, дозволяється обмежене використання месенджерів у беззвучному режимі. Під час лабораторних занять дозволяється застосування персональних комп'ютерів для пошуку інформації, використання власних хмарних ресурсів, тощо.*

- Заохочувальні бали можуть бути призначені за особливі успіхи у навчанні – переважно використання опрацьованих методів дослідження для розв’язання реальних задач за тематикою власних наукових досліджень. Сумарна кількість заохочувальних балів може складати від 1 до 10 балів.
- Політикою дедлайнів передбачається необхідність своєчасного виконання завдань. Усі письмові документи мають бути захищені до закінчення теоретичного навчання в семестрі.
- Усі учасники освітнього процесу: викладачі і здобувачі в процесі вивчення дисципліни мають керуватись принципами академічної доброчесності, передбаченими «Кодексом честі Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут»» <https://kpi.ua/code>.

## 8. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (PCO)

Рейтинг студента розраховується за 100 бальною шкалою.

### 1. Рейтинг студента з кредитного модуля складається з балів, що він отримує за:

- виконання індивідуальних завдань лабораторного (комп’ютерного) практикуму;
- модульну контрольну роботу (тестування).

Максимальна оцінка за кожну активність становить 100 балів. Внесок певного виду активностей у підсумкову оцінку враховується із застосуванням відповідних вагових коефіцієнтів:

- для індивідуальних завдань:  $w_i=0,6$ ;
- для модульного контролю:  $w_m=0,4$ .

### 2. Критерії нарахування балів:

#### 2.1. Виконання індивідуальних завдань оцінюється за такими критеріями:

- бездоганно виконана із застосуванням творчого підходу та самостійно здобутих знань та вчасно здана робота – 95-100 балів;
- повністю виконана та вчасно здана робота – 90-94 бали;
- є незначні недоліки у виконанні – 85-89 балів;
- суттєві недоліки у виконанні, порушення графіку здачі до 2 тижнів – 75-84 бали;
- є принципові недоліки у виконанні, графік здачі порушено на понад 2 тижні – 65-74 бали;
- виконано окремі елементи роботи, але роботу не завершено – 60-64 бали

2.2. Кількість балів за модульний контроль нараховується пропорційно до кількості правильних відповідей у тестуванні.

**3. Залік.** Семестровий рейтинг формується на підставі поточного контролю і підсумкова оцінка виставляється у залікову відомість у разі отримання студентом 60-100 балів. У разі підсумкової оцінки, що склала 30-59, або бажання студента підвищити залікову оцінку, студент може скласти залік. Залік проходить в усній формі (за матеріалами лекцій та лабораторних занять/комп’ютерних практикумів). До залікової відомості виставляється більша з оцінок (семестрова чи залікова).

**4. Календарний контроль:** проводиться двічі на семестр (за двома модулями) як моніторинг поточного стану виконання індивідуальних завдань та модульного тестування. Поточний рейтинг на час календарного контролю розраховується за формулою для підсумкової оцінки (див. нижче) з врахуванням лише завдань, що мали бути виконані на час календарного контролю. Умовою успішного закриття модулю є отримання не менше 50 балів. Умовою допуску до заліку є отримання не менше 60 балів за кожен модуль.

### 5. Підсумкова оцінка (семестровий рейтинг):

$$R_c = w_i \frac{1}{N_i} \sum m_i + w_m \sum m_m$$

де  $N_i$  – кількість індивідуальних завдань у семестрі,  $t_i$  та  $t_m$  – оцінки за індивідуальні завдання та модульний контроль відповідно.

**Таблиця відповідності рейтингових балів  $R_c$  оцінкам за університетською шкалою:**

Кількість балів	Шкала ЄКТС	Оцінка
95-100	A	Відмінно
85-94	B	Добре
75-84	C	
65-74	D	
60-64	E	Задовільно
Менше 60	FX	Незадовільно
Не виконані умови допуску		Не допущено

**Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):**

**Складено:** кандидат хімічних наук, доцент О. О. Васільєв.

**Ухвалено** кафедрою ВТМ та ПМ (протокол № 16 від 21 червня 2023 р.).

**Погоджено** Методичною комісією НН ІМЗ ім. Є. О. Патона (протокол № 12/23 від 28 червня 2023 р.).