



Основи комп'ютерного дизайну матеріалів

Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>Перший (бакалаврський)</i>
Галузь знань	<i>13 Механічна інженерія</i>
Спеціальність	<i>132 Матеріалознавство</i>
Освітня програма	<i>Нанотехнології та комп'ютерний дизайн матеріалів</i>
Статус дисципліни	<i>Нормативна</i>
Форма навчання	<i>очна(денна)/ змішана / дистанційна</i>
Рік підготовки, семестр	<i>IV курс, весняний семестр</i>
Обсяг дисципліни	<i>2 кредити ECTS , 18 годин лекцій, 18 годин комп'ютерний практикум, 24 години СРС</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>Залік / МКР</i>
Розклад занять	<i>https://schedule.kpi.ua/</i>
Мова викладання	<i>Українська</i>
Інформація про керівника курсу / викладачів	<i>Лектор: к.т.н., доц. Степанов Олег Васильович, ostepanoff@iff.kpi.ua; +380 50 330 68 15; Практичні (комп'ютерний практикум): к.т.н., доц. Степанов Олег Васильович, ostepanoff@iff.kpi.ua; +380 50 330 68 15;</i>
Розміщення курсу	<i>GoogleClassroom : https://classroom.google.com/c/MjQ3OTQ5NTc0MjAw; електронний кампус: https://ecampus.kpi.ua/</i>

Програма навчальної дисципліни

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

Однією з основних тенденцій сучасного розвитку матеріалознавства є розширення застосування засобів комп'ютерної техніки та інформаційних технологій для вивчення кореляцій в матеріалознавчих системах, їх систематизації з метою пришвидшеної розробки та впровадження нових матеріалів з оптимізованими властивостями. Поняття «комп'ютерний дизайн матеріалів» включає застосування усіх доступних засобів для досягнення такої мети і передбачає використання математичних та імітаційних моделей матеріалів та процесів, узагальнення результатів натурних та комп'ютерних експериментів, пошук зв'язків між параметрами з застосуванням принципів Big Data тощо. Навчальну дисципліну розроблено, головним чином, з використанням результатів вчених університету Georgia Tech Dr.Surya Kalidindi, McDowell D.L., Olson G.B. та ін.

Предметом вивчення дисципліни є принципи комп'ютерного дизайну матеріалів, методи математичного та комп'ютерного моделювання матеріалів, їх властивостей та технологічних процесів одержання, що базуються на двонаправленому застосуванні триланкової моделі Ольсона..

Метою дисципліни є формування загальних та фахових компетентностей:

- здатності виявляти, ставити та вирішувати проблеми;
- здатності використання інформаційних і комунікаційних технологій;

- здатності застосовувати системний підхід до вирішення інженерних матеріалознавчих проблем;
- здатності застосовувати знання і розуміння міждисциплінарного інженерного контексту і його основних принципів у професійній діяльності;
- здатності застосовувати сучасні методи математичного та фізичного моделювання, дослідження структури, фізичних, механічних, функціональних та технологічних властивостей матеріалів для вирішення матеріалознавчих проблем;
- здатності застосовувати сучасні підходи оптимізації та дизайну матеріалів для удосконалення їх властивостей залежно від умов експлуатації.

Згідно з вимогами освітньо-професійної програми після засвоєння навчальної дисципліни студенти мають продемонструвати такі **результати навчання**:

- Розуміти будову металевих, неметалевих, композиційних та функціональних матеріалів та обирати оптимальні методи модифікації їх властивостей. Кваліфіковано вибирати матеріали для виробів різного призначення;
- Знати та застосовувати у професійній діяльності принципи проектування нових матеріалів;
- Знати і використовувати методи фізичного і математичного моделювання при створенні нових та удосконаленні існуючих матеріалів, технологій їх виготовлення;
- Обирати і застосовувати придатні типові методи досліджень (аналітичні, розрахункові, моделювання, експериментальні); правильно інтерпретувати результати таких досліджень та робити висновки;
- Знаходити потрібну інформацію у літературі, консультуватися і використовувати наукові бази даних та інші відповідні джерела інформації з метою детального вивчення і дослідження інженерних питань відповідно до спеціалізації;
- Знання основних груп матеріалів та здатність обґрунтовано здійснювати їх вибір для конкретного використання;
- Знання сучасних методик вдосконалення властивостей матеріалів залежно від умов їх експлуатації

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

Дисципліна викладається у восьмому семестрі підготовки за освітньо-професійною програмою бакалаврів, має систематизуючий характер. Для успішного засвоєння дисципліни студент повинен оволодіти набором компетентностей та програмних результатів навчання дисциплін:

- Вища математика;
- Фізика;
- Інформатика, обчислювальна техніка, програмування та числові методи;
- Теоретична та прикладна механіка;
- Математичне і комп'ютерне моделювання 1 – Методи математичного моделювання та оптимізації;
- Основи металознавства;
- Механічні властивості та конструкційна міцність матеріалів;
- Теорія тепло- та масопереносу в матеріалах .

Результати вивчення дисципліни є складовою інтегральної компетентності підготовки за освітньо-професійною програмою.

3. Зміст навчальної дисципліни

Розділ 1. Сучасні проблеми розробки та впровадження матеріалів.

Тема 1. Сучасний стан, проблеми, підходи та завдання комп'ютерного дизайну матеріалів. Підходи розробки та проектування матеріалів знизу-вгору та згори-вниз. Інтегроване проектування матеріалів та виробів

Розділ 2. Системний дизайн матеріалів.

Тема 2. Контексти системного дизайну матеріалів.

Тема 3. Критичний шлях проектування матеріалів. Оцінку та управління невизначенністю при дизайні матеріалів.

Тема 4. Системний дизайн матеріалів як процес.

Тема 5. Обчислювальний фреймворк розподіленого інтегрованого дизайну матеріалів.

Тема 6. Інженерний дизайн матеріалів

Тема 7. Багаторівневий дизайн матеріалів

Розділ 3. Чисельний аналіз простору локальних станів

Тема 8. Локальні стани та функції локального стану.

Тема 9. Статистичний аналіз мікроструктур

4. Навчальні матеріали та ресурси

4.1 Базова література

1. Степанов О.В. Вибір і комп'ютерний дизайн матеріалів. Комп'ютерний практикум [Електронний ресурс] : навчальний посібник для студентів спеціальності 132 «Матеріалознавство» / КПІ ім. Ігоря Сікорського ; уклад.: О. В. Степанов, Ю. І. Богомол, І. М. Гурія. – Електронні текстові дані (1 файл: 2,6 Мбайт). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2021. – 107 с. – Режим доступу : <https://ela.kpi.ua/handle/123456789/41249>.
2. Дубовий О. М. Інженерне матеріалознавство : підручник / О. М. Дубовий, Ю. А. Казимиренко, Н. Ю. Лебедєва, С. М. Самохін. – Миколаїв : НУК, 2009. – 444 с.
3. David L. McDowell. *Integrated Design of Multiscale, Multifunctional Materials and Products* / David L. McDowell [and other]. – Elsevier, 2010. – 392 p

Базова література [1] доступна з мережі КПІ ім. Ігоря Сікорського, [3] доступна на сайті Elsevier: <https://www.sciencedirect.com/book/9781856176620/integrated-design-of-multiscale-multifunctional-materials-and-products>. Для студентів пропонуються окремі розділи в технічному перекладі українською.

Додаткова література

1. Suria R. Kalidindi. *Hierarchical Materials Informatics* / Suria R. Kalidindi. – Elsevier Inc., 2016. – 320p. – [DOI: <https://doi.org/10.1016/C2012-0-07337-1>].
2. John N. Lalena. *Principles of Inorganic Materials Design*. /John N. Lalena, David A. Cleary, Olivier B.M. Hardouin. – Duparc : John Wiley & Sons Inc., 2020. – 712 p.
3. Olson G. B. *Computational Design of Hierarchically Structured Materials* / Olson G. B. // *Science, New Series*. – Vol 277, No 5330 (Aug. 29, 1997). – P.1237-1242.
4. Ellis Brett D. *Application-Specific Computational Materials Design via Multiscale Modeling and the Inductive Design Exploration Method (IDEM)* / Ellis Brett D., McDowell David L. // *Integr Mater Manuf Innov*. – 2017. – V.6. – P. 9-35. – DOI 10.1007/s40192-017-0086-3.
5. *A system-based approach for integrated design of materials, products and design process chains* / Jitesh H. Panchal, Hae-Jin Choi [and other] // *J. Computer-Aided Mater Des*. – 2007. – V.14. – P. 265-293. – DOI 10.1007/s10820-007-9062-0.

6. Niezgodna S.R. Delineation of the space of 2-point correlations in a composite material system /Niezgodna S.R., Fullwood D.T., Kalidindi S.R. //Acta Materialia. – 2008. – V.56. – P. 5285-5292.

Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни(освітнього компонента)

5.1 Лекції (18 годин)

Заняття 1. Вступ. Мета та програмні цілі дисципліни, рейтингова система оцінювання

Сучасний стан, проблема, підходи та завдання комп'ютерного дизайну матеріалів. [1], [3]

Заняття 2. Час та проблеми розробки і впровадження матеріалів. Долина смерті матеріалів. Підходи розробки та проектування матеріалів знизу-вгору та згори-вниз. Інтегроване проектування виробів та матеріалів [2], [3].

Заняття 3. Контексти системного дизайну матеріалів. Багаторівневий (multilevel) та багатомасштабний (multiscale) дизайн матеріалів. Реалізація зв'язків триланкової моделі: Процеси (+склад) – Структура – Властивості (матеріалів) – Характеристики виробів [3].

Заняття 4. Критичний шлях проектування матеріалів. Моделі матеріалів та бази даних. Оцінка та управління невизначенністю при дизайні матеріалів [3].

Заняття 5. Міжмасштабний зв'язок моделей матеріалів та проектування матеріалів. Системний дизайн матеріалів як процес. Робустний багатоцільовий дизайн матеріалів. Рівні робустного дизайну матеріалів [3].

Заняття 6. Модульна контрольна робота

Заняття 7. Управління складністю в багаторівневому проектуванні виробів та матеріалів. Приклади дизайну матеріалів

Математичний апарат забезпечення рішень при проектуванні матеріалів. Дизайн матеріалів як задача багатокритеріальної оптимізації [3].

Заняття 8. Чисельний опис мікроструктури, поняття локальних станів. Розподіл розмірів зерен, розподіл напрямків орієнтування зерен. Визначення функцій мікроструктури. Спектральне представлення мікроструктури. Встановлення зв'язків структура – властивості. Механіка континууму. Принципи проведення розрахунків гомогенізованих властивостей матеріалів [3].

Заняття 9. Залік.

5.2 Комп'ютерний практикум (18 годин)

Мета комп'ютерного практикуму:

- практично оволодіти принципами проведення розрахунків гомогенізованих властивостей при дизайні матеріалів та розробці технологічних процесів.

Зміст комп'ютерних практикумів

1. Гомогенізація теплопровідності пористого матеріалу методом скінчених елементів на прикладі 2-вимірних структур з регулярною та стохастичною пористістю. (6 години)
2. Гомогенізація модуля пружності пористого матеріалу методом скінчених елементів на прикладі 3-вимірної (псевдо 2-вимірної) структури з стохастичною пористістю. (4 годин)
3. Гомогенізаційне прогнозування межі плинності пористого матеріалу методом скінчених елементів (4 години)

4. Обговорення результатів, підсумкове заняття (4 години)

6. Самостійна робота студента

Самостійна робота студентів (загальна тривалість 24 години) полягає у:

Самостійному опрацюванні теоретичного матеріалу з розрахунку 1 години СРС на 2 години лекцій – всього 8 годин.

Підготовці та аналізі результатів комп'ютерних практикумів всього – 6 годин.

Підготовці до МКР – всього 4 години.

Підготовці до семестрової атестації – 6 годин.

Політика та контроль

7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Система вимог, які ставляться перед студентом:

- Тему пропущеного лекційного заняття студент повинен опрацювати самостійно шляхом написання конспекту;
- Завдання пропущеного комп'ютерного практикуму студент має виконати в час, узгоджений з викладачем.
- У випадку пропуску заняття, коли виконується МКР, студент одержує для самостійного виконання завдання, рівноцінне пропущеному.
- Під час усіх видів аудиторних занять забороняється використання мобільних телефонів у звуковому режимі, дозволяється обмежене використання месенджерів у беззвучному режимі. Під час комп'ютерних практикумів дозволяється застосування персональних комп'ютерів для пошуку інформації, використання власних ресурсів, тощо.
- Результати виконаних комп'ютерних практикумів оформлюються у вигляді звітів з застосуванням текстового редактора. Звіт включає текстовий та ілюстраційний матеріал, що підтверджує виконання завдання, може включати посилання на електронну таблицю, у якій виконано розрахунки, завершується висновком.
- Заохочувальні бали можуть бути призначені за особливі досягнення – зокрема проведення розрахунків, орієнтованих на власну наукову роботу студента або на виконання курсового проекту.
- Політикою дедлайнів передбачається необхідність своєчасного виконання завдань. Конспект пропущеної лекції має бути виконаний і поданий на перевірку не пізніше 2-х тижнів з часу пропущеної лекції. У випадку пропуску лекції через тривалу хворобу – не більше 2-х тижнів після одужання. Звіти з практичних занять виконуються і подаються на перевірку не пізніше 2-х тижнів з моменту завершення. Усі письмові документи мають бути захищені до закінчення теоретичного навчання в семестрі.
- Усі учасники освітнього процесу: викладачі і студенти в процесі роботи 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)

Оцінювання результатів навчання проводиться за рейтинговою системою, складеною відповідно до вимог «Положення про систему оцінювання результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського»

Поточне оцінювання включає оцінку:

- підготовки, виконання, оформлення звітів комп'ютерних практикумів;
- виконання модульної контрольної роботи

Повне виконання та захист результатів комп'ютерного практикуму оцінюється в 20 балів (3 практикуми = 60 балів). Неповне виконання завдання, помилки в алгоритмах розрахунку, кінцевих результатах призводить до зниження оцінки від 1 до 5 балів.

Максимальна оцінка за модульну контрольну роботу складає 40 балів. Перелік запитань модульної контрольної роботи наведено в додатку А. МКР проводиться у вигляді тесту.

Календарний контроль проводиться один раз, враховуючи тривалість семестру, як моніторинг поточного стану виконання вимог силабусу. Студенти, які на момент календарного контролю мають суму результатів поточного контролю, яка не менше 50% максимально можливої одержують позитивну оцінку, у іншому випадку – негативну. Максимальна оцінка на момент календарного контролю включає 20 балів за виконання практикуму 1 та 40 балів за МКР.

Семестровий контроль – залік. Згідно схеми РСО-1 «Положення про систему оцінювання результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського»:

Рейтингова оцінка складається з балів, отриманих студентом за результатами поточного контролю

Рейтингова оцінка доводиться до здобувачів на передостанньому занятті з дисципліни в семестрі, але після захисту усіх звітів з комп'ютерних практикумів та розрахункової роботи. Здобувачі, які виконали умови допуску до заліку (не менше 35 балів за комп'ютерні практикуми та не менше 25 балів за модульну контрольну роботу) та мають рейтингову оцінку 60 і більше балів, отримують відповідну до набраного рейтингу оцінку без додаткових випробувань.

Зі здобувачами, які виконали умови допуску до заліку, але мають рейтингову оцінку менше 60 балів, а також з тими здобувачами, хто бажає підвищити свою рейтингову оцінку, на останньому за розкладом занятті з дисципліни в семестрі проводиться семестровий контроль у вигляді залікової контрольної роботи. Тести, що виносяться на залікову контрольну роботу є розвитком завдань модульної контрольної роботи. Залікова контрольна робота оцінюється максимальною оцінкою 70 балів. Семестровий рейтинг обчислюється як сума оцінки за залікову контрольну роботу та сумарної оцінки за комп'ютерні практикуми з коефіцієнтом 0,5.

Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою:

Кількість балів	Оцінка
100-95	Відмінно
94-85	Дуже добре
84-75	Добре
74-65	Задовільно
64-60	Достатньо
Менше 60	Незадовільно
Не виконані умови допуску	Не допущено

9. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

9.1. Особливості навчання за змішаною або дистанційною формою, пов'язані з дотриманням протиепідемічних заходів введених державними або місцевими органами влади та/або адміністрацією університету.

Викладання дисципліни за змішаною або дистанційною формою навчання здійснюється з застосуванням платформи *google.classroom* та середовища *google.meet*.

Лекційні заняття проводяться в *on-line* режимі. Теми лекційних занять, демонстраційний матеріал у вигляді презентацій з текстовими коментарями, контрольні запитання надаються студентам заздалегідь. Лекційний час використовується у співвідношення 1:1 відносно аудиторної форми. Студентам рекомендується для участі у заняттях в

середовищі google.meet використовувати персональний комп'ютер чи планшет, з розміром екрану не менше 10". Відеокамери комп'ютерів мають бути ввімкнені, мікрофони вимкнено. Студент застосовує мікрофон для відповіді на запитання викладача та для того, щоб задати запитання.

Комп'ютерні практикуми виконуються із застосуванням власних засобів комп'ютерної техніки студентів з встановленою системою ANSYS Academic Edition. Рекомендоване середовище виконання розрахунків – on-line електронні таблиці комплекту google.docs. On-line підключення необхідне на початку заняття для одержання допуску до виконання комп'ютерного практикуму та одержання завдання. Викладач відповідає на запитання студентів одержані як із сеансу google.meet (голосом або через чат) так і через інші засоби електронного зв'язку.

Контрольні заходи проводяться у on-line режимі.

9.2. Зарахування результатів проходження дистанційних курсів

Враховуючи сучасний розвиток систем дистанційної освіти і різноманітність курсів, що пропонуються провідними університетами світу, студенти можуть оволодівати знаннями з окремих розділів навчальної дисципліни з використанням сервісів edx.org, coursera.org або prometeus.org.ua. Умови зарахування результатів проходження дистанційного навчання визначаються в індивідуальному порядку. Студент, що бажає зарахувати результати дистанційного навчання, має звернутись до викладача з інформацією про дистанційний курс та власні побажання щодо його перезарахування. Рішення про перезарахування може бути прийнято в будь-який час, до проведення підрахунку середнього рейтингу і не може бути відмінене. Рекомендований дистанційний курс: **Materials Data Sciences and Informatics – Georgia Tech.** адреса: <https://www.coursera.org/learn/material-informatics>

Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):

Складено доцент каф. ВТМ та ПМ, к.т.н., доцент Степанов Олег Васильович

Ухвалено кафедрою ВТМ та ПМ (*протокол № 21 від 8 липня 2022 р.*)

Погоджено Методичною комісією

НН ІМЗ ім. Є.О Патона (протокол № 10/22 від 10 липня 2022 р.)

Додаток А
Запитання до модульної контрольної роботи

1. У чому полягають недоліки сучасних підходів розробки та впровадження матеріалів ?
2. Що таке «долина смерті» матеріалів?
3. Яке твердження є вірним стосовно сучасного стану розробки та впровадження матеріалів?
4. Який час, в середньому, проходить від відкриття до впровадження матеріалів?
5. Як виглядає традиційна послідовність дій щодо вибору матеріалів ?
6. Які факторні простори існують і як вони пов'язані при традиційній розробці матеріалів?
7. Характеристика моделі Ольсона.
8. В чому полягає проектування знизу – вгору?
9. Яке співвідношення між просторами Структури та Властивостей?
10. У чому полягає мета дизайну?
11. Які фактори поєднує зв'язок SP триланкової моделі?
12. Яка мета багатомасштабного моделювання?
13. Що таке гомогенізація з точки зору дизайну матеріалів?
14. Які функції виконує конкурентне багатомасштабне моделювання?
15. Що є джерелом стохастичної невизначеності при дизайні матеріалів?
16. Що є джерелом епістемічної невизначеності при дизайні матеріалів?
17. Яка мета робустного дизайну I?
18. Використання дизайну як багатокритеріальної оптимізації.