



# Основи комп'ютерного дизайну матеріалів

## Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

### Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>Перший (бакалаврський)</i>
Галузь знань	<i>13Механічна інженерія</i>
Спеціальність	<i>132Матеріалознавство</i>
Освітня програма	<i>Нанотехнології та комп'ютерний дизайн матеріалів</i>
Статус дисципліни	<i>Нормативна</i>
Форма навчання	<i>очна(денна)/змішана</i>
Рік підготовки, семестр	<i>IV курс, весняний семестр</i>
Обсяг дисципліни	<i>5 кредитів ECTS</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>Екзамен / МКР</i>
Розклад занять	<i><a href="http://rozklad.kpi.ua/Schedules/ViewSchedule.aspx">http://rozklad.kpi.ua/Schedules/ViewSchedule.aspx</a></i>
Мова викладання	<i>Українська</i>
Інформація про керівника курсу / викладачів	<i>Лектор: к.т.н., доц. Степанов Олег Васильович, <a href="mailto:ostepanoff@iff.kpi.ua">ostepanoff@iff.kpi.ua</a>; +380 50 330 68 15; Практичні (комп'ютерний практикум):к.т.н., доц. Степанов Олег Васильович, <a href="mailto:ostepanoff@iff.kpi.ua">ostepanoff@iff.kpi.ua</a>; +380 50 330 68 15;</i>
Розміщення курсу	<i>GoogleClassroom : <a href="https://classroom.google.com/c/MjQ3OTQ5NTc0MjAw">https://classroom.google.com/c/MjQ3OTQ5NTc0MjAw</a>; електронний кампус: <a href="https://ecampus.kpi.ua/">https://ecampus.kpi.ua/</a></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 їх одержання, що базуються на двонаправленому застосуванні триланкової моделі Ольсона..

Метою дисципліни є розвиток у студентів загальних компетентностей:

- здатності до абстрактного мислення, аналізу та синтезу;
- здатності застосування знань у практичних ситуаціях
- здатності вчитися та оволодівати сучасними знаннями
- здатності виявляти, ставити та вирішувати проблеми

- здатності приймати обґрунтовані рішення
- здатності до адаптації та дії в новій ситуації
- здатності використання інформаційних і комунікаційних технологій
- здатності спілкуватися державною мовою як усно, так і письмово
- здатність зберігати та примножувати моральні, культурні, наукові цінності і досягнення суспільства на основі розуміння історії та закономірностей розвитку предметної області, її місця у загальній системі знань про природу і суспільство та у розвитку суспільства, техніки і технологій, використовувати різні види та форми рухової активності для активного відпочинку та ведення здорового способу життя

та формування фахових компетентностей:

- здатності застосовувати відповідні кількісні математичні, фізичні і технічні методи і комп'ютерне програмне забезпечення для вирішення інженерних матеріалознавчих завдань
- здатності ефективно використовувати технічну літературу та інші джерела інформації і галузі матеріалознавства
- 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 знання і розуміння наукових фактів, концепцій, теорій, принципів і методів, необхідних для підтримки діяльності в сфері матеріалознавства
- здатності застосовувати сучасні методи математичного та фізичного моделювання, дослідження структури, фізичних, механічних, функціональних та технологічних властивостей матеріалів для вирішення матеріалознавчих проблем
- здатність визначати доцільність використання покриттів і виробів із композитів із вихідних порошків різного ступеня дисперсності

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

- Знання логіки та методології наукового пізнання
- Знання сучасних інформаційних та комунікаційних технологій
- Знання алгоритму дії в стандартних професійних ситуаціях
- Знання екологічно небезпечних та шкідливих факторів професійної діяльності і методів їх визначення
- Уміння застосовувати логіку та методологію наукового пізнання
- Уміння використовувати знання фундаментальних наук на рівні, необхідному для досягнення інших результатів освітньої програми
- Уміння володіти засобами сучасних інформаційних та комунікаційних технологій
- Уміння застосовувати свої знання для вирішення проблем в новому або незнайомому середовищі
- Уміння вільно спілкуватися державною та іноземною мовами з професійних питань як усно, так і письмово
- Уміння застосовувати у професійній діяльності принципи проектування нових матеріалів
- Уміння знаходити потрібну інформацію у літературі, консультуватися і використовувати наукові бази даних та інші відповідні джерела інформації з метою детального вивчення і дослідження інженерних питань

## **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;
- Металознавство;
- 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. Suria R. Kalidindi. *Hierarchical Materials Informatics*.Elsevier Inc. 2016. 320p.
2. *Integrated Design of Multiscale, Multifunctional Materials and Products*, David L.McDowell and other.Elsevier, 2010. 392 p.
3. *Materials Design Inspired by Nature. Function Through Inner Architecture*. Ed. Peter Fratzl, John W.C. Dunlop and Richard Weinkamer. Cambridge: The Royal Society of Chemistry 2013.- 402 p.

Базова література [1,2] доступна з мережі КПІ ім. Ігоря Сікорського на сайті Elsevier, [3] доступна в електронному репозиторії кафедри у вигляді електронної копії у форматі pdf .

Додаткова література

1. *Principles of Inorganic Materials Design*. John N. Lalena, David A. Cleary, Olivier B.M. Hardouin Duparc John Wiley & Sons Inc. 2020. – 712 p.
2. Olson G.B. *Computational Design of Hierarchically Structured Materials*. // *Science, New Series*, Vol 277, No5330 (Aug. 29, 1997) - pp.1237-1242
3. Ellis Brett D., McDowell David L. *Application-Specific Computational Materials Design via Multiscale Modeling and the Inductive Design Exploration Method (IDEM)*. // *Integr Mater Manuf Innov* (2017) 6:9-35. DOI 10.1007/s40192-017-0086-3
4. *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) 14:265-263, DOI 10.1007/s10820-007-9062-0.
5. Niezgodna S.R., Fullwood D.T., Kalidindi S.R. *Delineation of the space of 2-point correlations in a composite material system*. // *Acta Materialia* 56 (2008) 5285-5292.

## Навчальний контент

### 5. Методика опанування навчальної дисципліни(освітнього компонента)

#### 5.1 Лекції (36 годин)

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

Сучасний стан, проблема, підходи та завдання комп'ютерного дизайну матеріалів. [2, 1]

**Заняття 2.** Час та проблеми розробки і впровадження матеріалів. Долина смерті матеріалів[1, 2].

**Заняття 3.** Підходи розробки та проектування матеріалів знизу-вгору та згори-вниз. Інтегроване проектування виробів та матеріалів.[1, 2].

**Заняття 4.** Контексти системного дизайну матеріалів. Багаторівневий (multilevel) та багатомасштабний (multiscale) дизайн матеріалів. Реалізація зв'язків триланкової моделі: Процеси (+склад) – Структура – Властивості (матеріалів) – Характеристики виробів [1, 2].

**Заняття 5.** Критичний шлях проектування матеріалів. Моделі матеріалів та бази даних. Оцінка та управління невизначенністю при дизайні матеріалів [1, 2].

**Заняття 6.** Міжмасштабний зв'язок моделей матеріалів та проектування матеріалів [1].

**Заняття 7.** Системний дизайн матеріалів як процес. Робустний багатоцільовий дизайн матеріалів[1].

**Заняття 8.** Рівні робустного дизайну матеріалів [1].

**Заняття 9.** Управління складністю в багаторівневому проектуванні виробів та матеріалів [1].

**Заняття 10.** Приклади дизайну матеріалів. Case Study [1].

**Заняття 11.** Модульна контрольна робота. (2 години).

**Заняття 12.** Продовження Case Study[1]. Прийняття рішень в процесі дизайну матеріалів. Цільовий дизайн та дизайн на основі прийняття рішень.[1, 2]

**Заняття 13.** Математичний апарат забезпечення рішень при проектуванні матеріалів. Дизайн матеріалів як задача багатокритеріальної оптимізації [1]

**Заняття 14.** Робустний дизайн матеріалів в умовах невизначенності. Приклади [1]

**Заняття 15.** Чисельний опис мікроструктури, поняття локальних станів. Розподіл розмірів зерен, розподіл напрямків орієнтування зерен. Визначення функцій мікроструктури [2]

**Заняття 16.** Спектральне представлення мікроструктури. [2]

**Заняття 17.** Встановлення зв'язків структура – властивості. Механіка континууму [2]

## **5.2 Комп'ютерний практикум (27 годин)**

### **Мета комп'ютерного практикуму:**

- практично оволодіти принципами проведення гомогенізаційних розрахунків 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. (8 години)
2. Гомогенізація модуля пружності пористого матеріалу методом скінчених елементів на прикладі 3-вимірної (псевдо 2-вимірної) структури з стохастичною пористістю. (8 годин)
3. Гомогенізаційне прогнозування межі плинності пористого матеріалу методом скінчених елементів (8 години)
4. Обговорення результатів, підсумкове заняття (4 години)

### **6. Самостійна робота студента**

Самостійна робота студентів (загальна тривалість 87 годин) полягає у:

Самостійному опрацюванні теоретичного матеріалу з розрахунку 1 година СРС на 1 годину лекцій – всього 36 годин

Підготовці та аналізі результатів комп'ютерних практикумів (14 годин)

Підготовці до МКР всього 7 годин

Підготовці до семестрової атестації – екзамену – 30 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 10 балів (3 практикуми = 30 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 20 балів. Неповне виконання завдання, помилки у використанні алгоритмів, некоректна зупинка алгоритму призводить до зниження оцінки на 1-9 балів.

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 10 балів за виконання практикуму 1 та 20 балів за МКР.

Семестровий контроль – Екзамен. Згідно схеми PCO-2 «Положення про систему оцінювання результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського»:

Рейтингова оцінка складається з двох складових: стартової, призначеної для оцінювання заходів поточного контролю впродовж семестру та екзаменаційної, призначена для оцінювання окремих запитань (завдань) на екзамені.

Максимальне значення стартової частини складає 50 балів, екзаменаційної 50 балів. Екзамен проводиться у вигляді комп'ютерного тесту, що включає 25 запитань, правильна відповідь на кожне оцінюється в 2 бали.

Умови допуску до екзамену: виконання та захист звітів з усіх практикумів, сума балів стартової складової не нижче 30 балів, що складає 60% максимуму.

Стартова складова рейтингової оцінки доводиться до здобувачів на останньому занятті дисципліни в семестрі, але після захисту усіх звітів з комп'ютерних практикумів.

**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

## 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. Темі лекційних занять, демонстраційний матеріал у вигляді презентацій з текстовими коментарями, контрольні запитання надаються студентам заздалегідь. Лекційний час використовується у співвідношенні 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 увімкнені, 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 комплексу *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 середньорейтингу 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 № \_\_\_ від \_\_\_\_\_)

Погоджено Методичною комісією

Інституту матеріалознавства та зварювання ім. Є.О Патона (протокол № \_\_ від \_\_\_\_\_)

**Екзаменаційні питання**

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
19. Яка мета робустного дизайну II ?
20. Яка мета робустного дизайну III ?
21. Поняття локальних станів та функція мікроструктури
22. Чому дорівнює сума функцій мікроструктури усіх локальних станів ?
23. Що таке одноточкова статистика мікроструктури?
24. Що таке двоточкова статистика мікроструктури?
25. Що є причиною надлишковості інформації в матриці двоточкових статистик?