



Національна академія наук України
Інститут проблем матеріалознавства
ім. І.М. Францевича



Силабус (робоча програма) навчальної дисципліни

**МЕТОДИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ ТА МАШИННОГО НАВЧАННЯ В
КОМП'ЮТЕРНОМУ МОДЕЛЮВАННІ МАТЕРАЛІВ**

**METHODS OF QUANTUM MECHANICS AND MACHINE LEARNING IN
COMPUTER MATERIALS MODELING**

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>третій (освітньо-науковий)</i>
Галузь знань	13 - Механічна інженерія
Спеціальність	132 - Матеріалознавство
Освітня програма	Порошкова металургія та композиційні матеріали - Powder metallurgy and composite materials
Статус дисципліни	дисципліна вільного вибору
Форма навчання	денна (очна), он-лайн/офф-лайн
Рік підготовки, семестр	2 курс навчання, осінній семестр
Обсяг дисципліни	3 кредити ECTS, 90 годин
Семестровий контроль/ контрольні заходи	залік
Розклад занять	лекція – раз на тиждень (32 години); самостійна робота 58 год., у тому числі на виконання індивідуальних/домашніх завдань 28 год
Мова викладання	українська
Інформація про викладачів	канд. хім. наук, доц., зав. від. Васильєв Олександр Олексійович, o.vasiliev@ipms.kyiv.ua
Розміщення курсу	Google Workspace for Education; доступ за запрошенням викладача

Програма навчальної дисципліни

1. Опис освітньої компоненти, її мета, предмет вивчення та результати навчання

Застосування комп'ютерних алгоритмів для атомістичного моделювання набуває все більш широкого вжитку для пришвидшення 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.

Предмет освітньої компоненти - основні теоретичні засади та практичні реалізації найбільш поширених методів атомістичного моделювання матеріалів із застосуванням положень квантової-механіки та елементів машинного навчання.

Метою освітньої компоненти є формування у здобувачів вищої освіти (з.в.о.) рівня PhD базові знання та вміння необхідні для ефективного аналізу передової наукової літератури в галузі відкриття та атомістичної розробки матеріалів, прогнозування їх властивостей, застосування атомістичного моделювання та розрахунків для супроводу власних експериментальних робіт з розробки та впровадження нових матеріалів, ефективного використання у власних розробках розрахункових відомостей, накопичених світовою науковою спільнотою в галузі атомістичного моделювання матеріалів у відкритих базах даних, а також формування наступних компетентностей:

Інтегральна компетентність:

Здатність розв'язувати комплексні проблеми в галузі матеріалознавства, проводити дослідно-інноваційну діяльність, що передбачає глибоке переосмислення наявних та створення нових цілісних знань та/або професійної практики.

Загальні компетентності:

ЗК01. Здатність до освоєння і системного аналізу через наукове сприйняття і критичне осмислення нових знань.

ЗК02. Здатність до критичного аналізу і креативного синтезу нових ідей.

ЗК03. Здатність до розв'язування складних завдань, розуміння відповідальності за результат роботи з урахуванням вимог до академічної та професійної доброчесності.

ЗК06. Здатність оцінювати соціальну значимість результатів своєї діяльності, сприймати та використовувати в своїй роботі нові знання та технології, усвідомлювати принципи відкритої науки.

ЗК09. Здатність до самостійного освоєння нових технологій та методів дослідження.

Фахові компетентності:

ФК01. Здатність проводити інноваційну діяльність, що сприяє створенню нових знань у матеріалознавстві та суміжних міждисциплінарних галузях.

ФК03. Здатність розв'язувати комплексні проблеми в галузі матеріалознавства з урахуванням міжгалузевих зв'язків для забезпечення потреб у високоефективних матеріалах, енерго- та ресурсозберігаючих технологіях.

ФК06. Здатність до ініціювання інноваційних комплексних технічних проектів, лідерства та повної автономності під час їх реалізації.

ФК08. Здатність до постійного самовдосконалення у професійній сфері, відповідальність за навчання інших при проведенні науково-педагогічної діяльності та наукових досліджень в галузі матеріалознавства.

ФК09. Здатність до аналізу результатів сучасних досліджень в області матеріалознавства металевих, керамічних, композиційних та нано- матеріалів для вирішення наукових і практичних проблем і генерації нових знань.

Програмні результати навчання. Після засвоєння освітньої компоненти аспіранти мають продемонструвати такі результати навчання:

РН01. Проявляти наукові погляди та підходи при проведенні експертного аналізу наукових даних, оцінювати вплив технологічних факторів на властивості матеріалів.

РН02. Володіти концептуальними та методологічними знаннями в галузі матеріалознавства та бути здатним застосовувати їх до професійної діяльності на межі предметних галузей.

РН03. Інтегрувати існуючі методики та методи досліджень та адаптувати їх для розв'язання наукових завдань при проведенні дисертаційних досліджень.

РН04. Встановлювати закономірності управління складом, структурою та властивостями матеріалів різної природи та функціонального призначення на основі фізико-хімічних процесів у матеріалах, з метою створення матеріалів із заданими структурами та характеристиками.

РН8. Спланувати та реалізувати на практиці оригінальне самостійне наукове дослідження, яке має суттєву новизну, теоретичну і практичну цінність та сприяє розв'язанню соціальних, наукових та інших проблем.

РН09. Застосовувати у науковій та практичній діяльності провідні тенденції, ключові напрями та перспективи розробки нових матеріалів різної природи, основи сучасних технологій виготовлення конструкційних і функціональних матеріалів, «розумних» та біо-матеріалів, матеріалів спеціального (оборонного) призначення, з подовженим строком експлуатації та для відновлюваних джерел енергії.

РН11. Використовувати сучасні інформаційні джерела національного та міжнародного рівня для оцінки стану вивченості об'єкту досліджень і актуальності наукової проблеми.

РН13. Володіти комунікативними навичками на рівні вільного спілкування в іншомовному середовищі з фахівця-ми та нефахівцями щодо проблем в галузі матеріалознавства.

РН16. Описувати результати наукових досліджень у фахових публікаціях у вітчизняних та закордонних спеціалізованих виданнях, в тому числі, у внесених до наукометричних баз Scopus, Web of Science та аналогічних.

РН19. Знайти оригінальне рішення, направлене на розв'язання конкретної науково-технічної проблеми.

2. Місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою

Перелік освітніх компонент, знань та умінь, володіння якими необхідні аспіранту для успішного засвоєння освітньої компоненти:

Пререквізити:	
Основи матеріалознавства	Знання основ матеріалознавства як міждисциплінарної галузі науки, що вивчає залежність між складом, структурою та властивостями матеріалів у взаємозв'язку з технологією їх отримання, умовами експлуатації та вартістю та вміння аналізувати зазначені взаємозв'язки
Вища математика	Знання основ лінійної алгебри, математичного аналізу, математичної статистики та вміння аналізувати вирази та залежності, описані за методологією зазначених розділів
Основи фізики твердого тіла	Знання будови твердих тіл на атомному рівні, її впливу на вібраційні, електронні, механічні властивості
Фізична хімія	Знання квантово-механічних засад будови речовини, законів термодинаміки
Інформатика	Знання операційних систем на рівні впевненого користувача, базові вміння користування командним рядком, програмування на мовах високого рівня абстракції
Постреквізити:	
Наукова складова	Планування і виконання розрахункових досліджень з використанням сучасних методів та методик атомістичного моделювання матеріалів, критичний аналіз результатів теоретичних досліджень.

3. Зміст освітньої компоненти

Тема 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.

Тема 2. Базовий інструментарій атомістичної інформатики матеріалів

- Пакетний менеджер *conda*;
- Програмне середовище *Jupyter Notebook*;
- Базові поняття та основи роботи з мовою програмування *Python*.

Тема 3. Програмне середовище для атомістичного моделювання *Atomic Simulation Environment (ASE)*

- Основний функціонал та можливості ASE;
- Базові об'єкти атомістичних моделей ASE: *Atom* та *Atoms*;
- Створення атомістичних моделей в ASE, основні операції з ними (геометричні перетворення, хімічне конструювання, візуалізація).

Тема 4. 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.

Тема 5. Основи роботи з пакетом програм Quantum Espresso

- Загальні відомості про пакет програм Quantum Espresso;
- Інтеграція Quantum Espresso та ASE;
- Ключові параметри розрахунку та вибір їх оптимальних значень;
- Підготовка вхідних даних та здійснення розрахунку.

Тема 6. Рівноважна структура матеріалів з DFT: теоретичні основи

- Наближення «фіксованих ядер» Борна-Оппенгаймера;
- Сили, що діють на атоми;
- Мінімізація сил, що діють на атоми методом градієнтного спуску;
- Типи структурної мінімізації.

Тема 7. Оптимізація структури матеріалу у Quantum Espresso. Розрахункові спектри дифракції X-променів (рентгенівської дифракції)

- Підготовка вхідних даних для оптимізації структури з Quantum Espresso;
- Здійснення оптимізації та аналіз її результатів;
- Генерування теоретичних спектрів рентгенівської дифракції для оптимізованих структур (ASE).

Тема 8. Пружні властивості матеріалів: теоретичні основи

- Пружні деформації рівноважних структур;
- Визначення пружних сталих за енергією та напругою деформованих структур;
- Розрахунок пружних модулів для полікристалічних матеріалів (усереднення Войта, Реуса та Хілла);
- Оцінка твердості за Вікерс.

Тема 9. Розрахунок пружних властивостей матеріалів з пакетами програм Quantum Espresso та Elastic

- Підготовка вхідних даних та деформованих структурних конфігурацій;
- Структурна оптимізація деформованих конфігурацій;
- Підбір параметрів поліноміальної апроксимації енергій та напруги деформованих конфігурацій;
- Розрахунок пружних сталих та модулів та оцінка твердості.

Тема 10. Електронна зонна структура з DFT: теоретичні основи

- Енергії та хвильові функції Кона-Шема;
- Розрахунок електронної зонної структури за DFT.

Тема 11. Розрахунок електронної зонної структури з Quantum Espresso

- Підготовка вхідних даних;
- Самоузгоджений та несамозгоджений розрахунок;
- Обробка та візуалізація результатів розрахунку.

Тема 12. Поза основами: складні розрахунки з DFT

- Вібраційні властивості та спектри;
- Молекулярна динаміка;
- Електронний та фононний транспорт (електро- та теплопровідність);
- Діелектричні та магнітні властивості.

Тема 13. Методи машинного навчання в матеріалознавстві

- 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.

Тема 14. 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 з програмним модулем icet;
- Підготовка набору тренування-валідації з DFT;
- Тренування моделі та оцінка її ефективності;
- Застосування моделі (енергії змішування та упорядкування в твердих розчинах).

Тема 15. Міжатомні потенціали машинного навчання для атомістичного моделювання складних систем значного розміру

- Нейронні мережі як міжатомні потенціали;
- Продуктивні високоточні міжатомні потенціали машинного навчання з пакетом програм NequIP;
- Підготовка набору тренування-валідації з DFT;
- Тренування моделі та оцінка її ефективності;
- Застосування моделі (швидка оптимізація структури та молекулярна динаміка).

Тема 16. Відкриті масивні бази даних результатів атомістичного моделювання матеріалів

- Бази даних Materials Project, Aflow, NOMAD;
- Пошук та узагальнення інформації у базах даних (веб інтерфейс);
- Застосування вбудованих засобів машинного навчання
- Пакетне отримання даних з OPTIMADE API

4. Навчальні матеріали та ресурси

Навчальні матеріали, зазначені нижче, доступні у відкритому доступі у мережі інтернет, у бібліотеці інституту, а також можуть бути надані в електронному вигляді. Обов'язковою до вивчення є базова література, інші матеріали – факультативні.

Базова література:

1. Giustino F. Materials modelling using density functional theory: properties and predictions. 1st ed. Oxford: Oxford University Press; 2014.
2. Документація Jupyter Notebook: <https://jupyter-notebook.readthedocs.io/en/stable/>
3. Документація Atomic Simulation Environment: <https://wiki.fysik.dtu.dk/ase/>
4. Документація Quantum Espresso: https://www.quantum-espresso.org/Doc/user_guide/
5. Документація icet: <https://icet.materialsmodeling.org/>

6. Vasiliev OO. Thermodynamic Properties of Tungsten Disulfide from First Principles in Quasi-Harmonic Approximation. Powder Metall Met Ceram. 2021;59:576–84. <http://link.springer.com/10.1007/s11106-021-00185-6>

7. Vasiliev O, Muratov V, Mazur P, Bilyi V, Karpets M, Bekenev V, et al. Silicon in intericosahedra chains of boron carbide. Journal of the European Ceramic Society. 2022;42:5515–21. Available from:

<https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0955221922004095>

8. Документація NequIP: <https://nequip.readthedocs.io/en/latest/>

9. Документація OPTIMADE API: <https://www.optimade.org/documentation>

Додаткова література:

10. 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>

11. Документація conda: <https://docs.conda.io/en/latest/>

12. Основи мови програмування Python: <https://www.kaggle.com/learn/python>

13. Vasiliev O, Bilyi V. Specifics of Al substitution into boron carbide: A DFT study. Open Ceramics. 2024; 20:100695. Available from:

<https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S2666539524001597>

14. 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.

15. База даних Materials Project: <https://materialsproject.org/>

16. База даних Aflow: <https://www.aflowlib.org/>

17. База даних NOMAD: <https://nomad-lab.eu/nomad-lab/>

18. 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.

Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Передбачено комплексний підхід, що поєднує лекції та розширене опрацювання матеріалу через самостійну роботу. При читанні лекцій застосовується ілюстративний матеріал у вигляді презентацій, які розміщені в Google Workspace for Education. Після кожної лекції рекомендується ознайомитись з матеріалами, рекомендованими для самостійного вивчення, а перед наступною лекцією – повторити матеріал попередньої.

6. Самостійна робота

Самостійна робота включає повторення лекційного матеріалу та виконання інтерактивних тестових завдань, результативне вирішення яких вимагає роботи з рекомендованою літературою. Це дозволяє розширити та поглибити знання з дисципліни та забезпечити підготовку до заліку.

Політика та контроль

7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Відвідування занять, які можуть проводитись як он-лайн, так і офф-лайн, є обов'язковим. У випадку відсутності на занятті аспіранти зобов'язані повідомити

викладача заздалегідь і надати документальне підтвердження причини відсутності, якщо це можливо. Під час лекцій проводиться інтерактивне опитування за її матеріалами, яке відіграє роль стимулюючого чинника для дискусії, підвищення зацікавленості та контролю відвідування лекції. У час поміж лекціями проводиться інтерактивне тестування за матеріалами попередньої лекції з метою стимулювання та спрямування самостійної роботи та визначення рівня обізнаності здобувачів за даною темою.

Під час сигналу повітряної тривоги заняття негайно припиняється, а всі учасники навчального процесу повинні пройти в найближче укриття. За наявності технічної можливості, заняття продовжується у разі констатації настання безпечних умов для усіх учасників. В іншому випадку, для завершення заняття організується додатковий час.

Правила призначення заохочувальних та штрафних балів. Заохочувальні бали можуть нараховуватись викладачем за активну участь у заняттях, виконання творчих робіт з освітньої компоненти або додаткового проходження он-лайн профільних курсів з отриманням відповідного сертифікату, та нараховуються під час складання заліку. Сума заохочувальних балів не може перевищувати 10% від рейтингової шкали. Штрафні бали в рамках програми не передбачені.

Політика дедлайнів та перескладань. Дедлайни здачі завдань та контрольних робіт є обов'язковими. У разі поважних причин, аспіранти можуть звернутись до викладача для можливої зміни продовження термінів. Запити на продовження дедлайну повинні бути подані заздалегідь.

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

В рамках навчальної дисципліни передбачено кілька видів контролю та систему рейтингування результатів навчання, а саме:

Поточний контроль: інтерактивні опитування під час лекцій та інтерактивні тестові завдання для самостійного опрацювання.

Семестровий контроль: залік.

Рейтингова система оцінювання

Рейтинг слухача дисципліни розраховується на підставі результатів виконання ним наступних активностей:

- інтерактивні тестування під час лекцій (експрес-тестування);
- інтерактивні тестові завдання за матеріалами лекцій (тематичні тестування).

Максимальна оцінка за кожну активність становить 100 балів. Бали за активності нараховуються пропорційно до кількості правильних відповідей у тестуванні.

Внесок певного виду активностей у підсумкову оцінку враховується із застосуванням відповідних вагових коефіцієнтів:

- експрес-тестування: $w_f=0,2$;
- тематичні тестування: $w_t=0,8$.

Умовою допуску до заліку є виконання не менше 2/3 тематичних тестувань протягом семестру.

Підсумкова оцінка формується на підставі **семестрового рейтингу** слухача, який розраховується за формулою:

$$R_C = \frac{w_l}{N_l} \sum m_l + \frac{w_t}{N_t} \sum m_t + 0.1 \cdot m_+,$$

де w_l, w_t – вагові коефіцієнти для експрес-тестувань та тематичних тестувань, відповідно; N_l, N_t – кількість лекцій та тематичних тестів у семестрі, відповідно; m_l, m_t – кількість балів, отриманих слухачем за окрему активність для експрес-тестів та тематичних тестів, відповідно; m_+ -- заохочувальні бали, нараховані за 100-бальною шкалою.

У разі бажання слухача підвищити підсумкову оцінку, він може пройти усну співбесіду за лекційними матеріалами під час заліку. Результат співбесіди R_I оцінюється за 100-бальною шкалою, а підсумкова оцінка розраховується за формулою:

$$R = 0.6R_C + 0.4R_I.$$

Відповідність між кількістю балів, оцінкою за національною шкалою та шкалою ECTS наведена в таблиці:

<i>Кількість балів</i>	<i>Шкала ECTS</i>	<i>Оцінка за національною шкалою</i>
95-100	A	Відмінно
85-94	B	Добре
75-84	C	
65-74	D	Задовільно
60-64	E	
Менше 60	FX	Незадовільно
Не виконані умови допуску		Не допущено

9. Додаткова інформація з освітньої компоненти

Робочу програму освітньої компоненти (силабус):

Складено: завідувач відділу, кандидат хімічних наук, доцент О.О. Васільєв

Ухвалено Вченою радою Інституту проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича Національної академії наук України (протокол №10 від «06» серпня 2024 р.).