



АТОМІСТИЧНА ІНФОРМАТИКА

МАТЕРІАЛІВ: ВІД ПЕРШИХ ПРИНЦИПІВ ДО

МЕТОДІВ МАШИННОГО НАВЧАННЯ

Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>Третій (освітньо-науковий)</i>
Галузь знань	<i>10 Природничі науки</i>
Спеціальність	<i>104 Фізика та астрономія</i>
Освітня програма	<i>Фізика</i>
Статус дисципліни	<i>Вибіркова</i>
Форма навчання	<i>очна(денна)</i>
Рік підготовки, семестр	<i>2 курс, осінній семестр</i>
Обсяг дисципліни	<i>4 (120), 14 лекцій, 14 практ., 92 - срс</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>Залік, модульна контрольна робота</i>
Розклад занять	<i>http://rozklad.kpi.ua/</i>
Мова викладання	<i>Українська</i>
Інформація про керівника курсу / викладачів	<i>Лектор : к.х.н., доц. Васильєв Олександр Олексійович, o.vasiliev@outlook.com Практичні: к.х.н., доц. Васильєв Олександр Олексійович, o.vasiliev@outlook.com</i>
Розміщення курсу	<i>https://classroom.google.com/c/NzEzNDM5NzE0MTkw</i>

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 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.

Мета навчальної дисципліни: сформувати у здобувачів 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.

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

Навчальна дисципліна формує у здобувачів наступні *загальні та фахові компетентності*:

Загальні компетентності:

ЗК01. Здатність генерувати нові ідеї (креативність)

ЗК03. Здатність розв'язувати комплексні наукові проблеми на основі системного наукового світогляду та загального культурного кругозору із дотриманням професійної етики та академічної доброчесності.

Фахові компетентності:

ФК01. Здатність виявляти, ставити та вирішувати проблеми дослідницького характеру в сфері фізики та/або астрономії, інтегрувати знання з різних галузей, оцінювати та забезпечувати якість виконуваних досліджень.

ФК02. Здатність відстежувати тенденції розвитку фізики та/або астрономії, їх прикладних застосувань, критично переосмислювати наявні знання та методи фундаментальних та прикладних наукових досліджень.

ФК06. Здатність застосовувати сучасні методи, методики, технології, інструменти та обладнання для проведення прикладних та фундаментальних наукових досліджень у галузі фізики та/або астрономії.

Після засвоєння навчальної дисципліни здобувачі мають продемонструвати такі **програмні результати навчання**:

ПРН01. Мати сучасні концептуальні та методологічні знання з фізики та/або астрономії та дотичних до них міждисциплінарних напрямів, а також необхідні навички, достатні для проведення фундаментальних і прикладних наукових досліджень з метою отримання нових знань та/або здійснення розробок та інновацій.

ПРН05. Мати сучасні концептуальні та методологічні знання з фізики та/або астрономії та дотичних до них міждисциплінарних напрямів, а також необхідні навички, достатні для проведення фундаментальних і прикладних наукових досліджень з метою отримання нових знань та/або здійснення розробок та інновацій.

ПРН07. Застосовувати сучасні інструменти і технології пошуку, оброблення та аналізу інформації, зокрема, статистичні методи аналізу даних великого обсягу та/або складної структури, спеціалізовані бази даних та інформаційні системи.

ПРН12. Оцінювати ефективність чисельних методів та розробляти оптимальні алгоритми при комп'ютерному моделюванні фізичних процесів.

Вивчення дисципліни дозволить оволодіти основами найбільш вживаних теоретичних підходів до моделювання атомної структури матеріалів та розрахунку їх фізичних та фізико-хімічних властивостей у зв'язку з атомною структурою, ознайомитись з програмним забезпеченням з їх реалізацією та засвоїти основні прийоми роботи з ним.

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

Атомістична інформатика матеріалів являє собою міждисциплінарний інженерно-дослідницький напрямок, що тісно інтегрує такі дисципліни як квантова механіка, фізика твердого стану, фізична хімія, матеріалознавство, машинне навчання, інформаційні та комп'ютерні технології.

З огляду на міждисциплінарний характер навчальної дисципліни «Атомістична інформатика матеріалів: від базових принципів до методів машинного навчання» її успішне засвоєння передбачає наявність наступних знань та навичок :

- Основи фізичного матеріалознавства
- Базові поняття вищої математики (лінійна алгебра, математичний аналіз, статистика)
- Основи фізики твердого тіла

- Базові поняття хімії (термодинаміка)
- Основи інформатики (впевнене користування комп'ютером).

3. Зміст навчальної дисципліни

Тема 1. Основи атомістичної інформатики матеріалів. Базовий інструментарій атомістичної інформатики матеріалів.

Тема 2. Програмне середовище для атомістичного моделювання Atomic Simulation Environment (ASE).

Тема 3. Основні теоретичні положення теорії функціоналу електронної густини (DFT).

Тема 4. Основи роботи з пакетом програм Quantum Espresso.

Тема 5. Методи машинного навчання в матеріалознавстві.

Тема 6. Атомістичне моделювання твердих розчинів з використанням класичного машинного навчання

Тема 7. Відкриті масивні бази даних результатів атомістичного моделювання матеріалів

4. Навчальні матеріали та ресурси

Базова література:

1. Giustino F. Materials modelling using density functional theory: properties and predictions. 1st ed. Oxford: Oxford University Press; 2014.
2. P. Giannozzi et al. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO, J. Phys.: Condens. Matter. 2017; 29: 465901. <https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa8f79>.
3. Hjorth Larsen et al. The atomic simulation environment—a Python library for working with atoms, J. Phys.: Condens. Matter 29 (2017) 273002. <https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa680e>.
4. B.E. Granger, F. Pérez, Jupyter: Thinking and Storytelling With Code and Data, Computing in Science & Engineering 23 (2021) 7–14. <https://doi.org/10.1109/MCSE.2021.3059263>.
5. User's Guide for QUANTUM ESPRESSO (v.7.3.1). URL: https://www.quantum-espresso.org/Doc/user_guide/ (date of access: 21.05.2025).
6. M. Angqvist, W.A. Muñoz, J.M. Rahm, E. Fransson, C. Durniak, P. Rozyczko, T.H. Rod, P. Erhart. ICET – A Python Library for Constructing and Sampling Alloy Cluster Expansions. Adv. Theory Simul. 2019; 2: 1900015. <https://doi.org/10.1002/adts.201900015>.
7. G. Wang, C. Wang, X. Zhang, Z. Li, J. Zhou, and Z. Sun. Machine learning interatomic potential: Bridge the gap between small-scale models and realistic device-scale simulations. iScience. 2024; 27, 5. doi: 10.1016/j.isci.2024.109673.
8. OPTIMADE, an API for exchanging materials data / C. W. Andersen et al. Scientific Data. 2021. Vol. 8, no. 1. URL: <https://doi.org/10.1038/s41597-021-00974-z> (date of access: 21.05.2025).
9. Scheidgen M. et al. NOMAD: A distributed web-based platform for managing materials science research data. JOSS. 2023; 8: 5388. <https://doi.org/10.21105/joss.05388>.
10. Langer M.F., Goeßmann A., Rupp M., Representations of molecules and materials for interpolation of quantum-mechanical simulations via machine learning, Npj Comput Mater. 2022;8: 1–14. <https://doi.org/10.1038/s41524-022-00721-x>.
11. Musil F et al. Physics-Inspired Structural Representations for Molecules and Materials. Chem. Rev. 2021; 121 (2021) 9759–9815. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.1c00021>.
12. Batzner S. et al. E(3)-equivariant graph neural networks for data-efficient and accurate interatomic potentials. Nat Commun. 2022; 13: 2453. <https://doi.org/10.1038/s41467-022-29939-5>.
13. Schütt K. et al. SchNet – A deep learning architecture for molecules and materials. The Journal of Chemical Physics. 2018; 148: 241722. <https://doi.org/10.1063/1.5019779>.

Додаткова література:

14. Ohno K, Esfarjani K, Kawazoe Y. Computational Materials Science. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg; 2018. <http://link.springer.com/10.1007/978-3-662-56542-1>
15. Conda Documentation – conda-docs documentation. URL: <https://docs.conda.io/en/latest/> (date of access: 21.05.2025).

16. Jupyter Notebook Documentation – Jupyter Notebook 7.4.2 documentation. URL: <https://jupyter-notebook.readthedocs.io/en/stable/> (date of access: 21.05.2025).
17. Python Learn the most important language for data science. URL: <https://www.kaggle.com/learn/python> (date of access: 21.05.2025).
18. Atomic Simulation Environment. URL: <https://wiki.fysik.dtu.dk/ase/> (date of access: 21.05.2025).
19. 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. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0955221922004095>.
20. Vasiliev O, Bilyi V. Specifics of Al substitution into boron carbide: A DFT study. Open Ceramics. 2024; 20:100695. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S2666539524001597>
21. 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>.
22. C. Li, K. Zheng, Methods, progresses, and opportunities of materials informatics, InfoMat. 2023; 5: e12425. <https://doi.org/10.1002/inf2.12425>.
23. Materials Project. URL: <https://next-gen.materialsproject.org/> (date of access: 21.05.2025).
24. Aflow - Automatic FLOW for Materials Discovery. URL: <https://www.aflowlib.org/> (date of access: 21.05.2025).
25. NOMAD Materials science data managed and shared. URL: <https://nomad-lab.eu/nomad-lab/> (date of access: 21.05.2025).
26. icet – A Pythonic approach to cluster expansions – icet documentation. URL: <https://icet.materialsmodeling.org/> (date of access: 21.05.2025).
27. O. Vasiliev et al. Synthesis of equimolar solid solution of zirconium and hafnium diborides by vacuum-thermal routes. Open Ceramics. 2023;16: 100464.
28. NequIP. URL: <https://nequip.readthedocs.io/en/latest/> (date of access: 21.05.2025).

Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Програмою навчальної дисципліни передбачено проведення лекцій та семінарських/практичних занять. Методичною підтримкою вивчення курсу є використання Інтегроване середовище спільної роботи Google Workspace for Education, яке включає:

- Сайт, календар, матеріали курсу;
- Груповий чат та засіб для відеоконференцій;
- Засоби опитувань та тестувань;
- Журнал успішності;
- Середовище для видачі та виконання практичних завдань.

Всі матеріали у вільному доступі і адаптовані для використання для організації навчання у дистанційному режимі.

Основною закріплення знань, отриманих студентами при вивченні даного курсу, є самостійні індивідуальні роботи.

Лекційні заняття

№ з/п	Назва теми та перелік основних питань (перелік дидактичних засобів з посиланням на літературу)
1	Вступне заняття. Основи атомістичної інформатики матеріалів. Базовий інструментарій атомістичної інформатики матеріалів. <i>Ознайомлення з PCO. Основні поняття, мета та задачі атомістичної інформатики матеріалів, її міждисциплінарний характер. Можливості розрахунку фізичних та хімічних властивостей та моделювання поведінки твердих речовин за теорією функціоналу електронної густини. Розширення можливостей теорії функціоналу електронної густини методами машинного навчання</i> Основна література: [1, 3, 4]. Додаткова література: [14-18]
2	Основні теоретичні положення теорії функціоналу електронної густини (DFT) <i>Рівняння Шрьодінгера для багатьох тіл та основні методи його наближеного вирішення. Потенціали Хартрі, обміну, кореляції. Рівняння Кона-Шема. Теорія функціоналу електронної густини. Теореми Хоенберга-Кона. Енергія системи як функціонал електронної густини. Обмінно-кореляційний функціонал, поширені наближення для його опису. Самоузгоджений розрахунок поля. Плоскі хвилі для опису хвильових функцій у твердих речовинах. Псевдопотенціали як засіб підвищення продуктивності розрахунку.</i> Основна література: [1, 2, 5]. Додаткова література: [18-20]
3	Рівноважна структура матеріалів з DFT: теоретичні основи <i>Поняття рівноважної атомної структури. Наближення «фіксованих ядер» Борна-Оппенгаймера. Сили, що діють на атоми. Рівняння руху Гамільтона. Мінімізація сил, що діють на атоми. поверхня потенціальної енергії, алгоритми структурної мінімізації. Молекулярна динаміка.</i> Основна література: [1, 2, 5]. Додаткова література: [18-20]
4	Складні розрахунки з DFT <i>Пружні сталі та модулі. Розрахунок напружень за заданими деформаціями. Способи розрахунку пружних сталей за напруженням та за енергією. Розрахунок модулів пружності за Войтом, Реусом та Хіллом. Фононні дисперсії. Розрахунок фононних дисперсій за теорією збурення електронної густини та за методом скінченних зміщень. Візуалізація та аналіз фононних дисперсій. Динамічна стабільність кристалів. Густина фононних станів та вібраційні термодинамічні властивості. Електронна зонна будова. Густина електронних станів.</i> Основна література: [1, 2, 5]. Додаткова література: [18, 21]
5	Машинне навчання в атомістичному моделюванні матеріалів: основні поняття <i>Машинне навчання в життєвому циклі 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. Основні джерела даних для машинного навчання в атомістичній інформатиці матеріалів.</i> Основна література: [6, 7]. Додаткова література: [22]
6	Дані та структурні дескриптори в атомістичній інформатиці матеріалів <i>Структура та подання атомістичних даних. Джерела атомістичних даних. Публічні бази даних та способи доступу до них. Програмний доступ через OPTIMADE API. Специфічні API для доступу до баз даних на прикладі NOMAD API. Отримання даних для атомістичних моделей з власних DFT розрахунків. Підготовка набору тренування-валідації. Проблема структурного подання в атомістичних моделях машинного навчання. Структурні дескриптори. Ін- та еквіваріантні дескриптори. Поширені атомні дескриптори.</i> Основна література: [8-11]. Додаткова література: [23-25]

7	Моделі класичного та глибокого машинного навчання в атомістичному моделюванні матеріалів <i>Атомістичні моделі на лінійній регресії. Регуляризація лінійних моделей методами Ridge, LASSO, Elastic Net. Крос-валідація. Моделі кластерного розкладу сплавів (KPC). Реалізація KPC у програмному модулі icet. Нейронні мережі в атомістичному моделюванні. Міжатомні потенціали машинного навчання. Подання атомної будови графами. Поширені архітектури нейронних мереж для міжатомних потенціалів машинного навчання (NequIP, SchNet).</i> Основна література: [6, 12, 13]. Додаткова література: [26-28]
---	--

Практичні заняття

№ з/п	Назва теми (перелік завдань, які виконуються під керівництвом викладача)
1	Програмне середовище для атомістичного моделювання Atomic Simulation Environment (ASE). <i>Пакетні менеджери conda та pip. Інтерактивне програмування та розрахунки з Jupyter Notebook. 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).</i>
2	Основи роботи з пакетом програм Quantum Espresso <i>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.</i>
3	Оптимізація структури матеріалу у Quantum Espresso. Розрахункові спектри дифракції X-променів (рентгенівської дифракції) <i>Підготовка вхідних даних для оптимізації структури з Quantum Espresso. Здійснення оптимізації та аналіз її результатів. Генерування теоретичних спектрів рентгенівської дифракції для оптимізованих структур (ASE).</i>
4	Електронна зонна структура та фононні дисперсії з DFT <i>Підготовка вхідних даних для розрахунку електронної зонної структури з Quantum Espresso. Розрахунок, візуалізація та аналіз електронної зонної структури. Підготовка вхідних даних для розрахунку дисперсії фононів та вібраційних термодинамічних властивостей з Quantum Espresso та Phonopy. Розрахунок, візуалізація фононних дисперсій та аналіз результатів.</i>
5	Підготовка даних для тренування атомістичних моделей машинного навчання <i>Генерація структурних конфігурацій твердих розчинів (сплавів) перебором з пакетом icet. Генерація нерівноважних структурних конфігурацій збором кроків структурної оптимізації та шляхом молекулярної динаміки. Формування наборів тренування-валідації зі згенерованих даних.</i>
6	Побудова моделей кластерного розкладу з пакетом icet <i>Тренування моделі кластерного розкладу сплавів та оцінка її ефективності. Застосування моделі для оцінки енергії змішування, пошуку основних станів та вивчення упорядкування в твердих розчинах).</i>
7	Міжатомні потенціали машинного навчання з пакетом NequIP <i>Тренування моделі міжатомних потенціалів машинного навчання та оцінка її ефективності. Застосування моделі для молекулярної динаміки з ASE.</i>

6. Самостійна робота здобувача

№ з/п	Назва теми , що виноситься на самостійне опрацювання (завдання на CPC)	Кількість годин CPC
1	Основи атомістичної інформатики матеріалів Опрацювати лекційний матеріал за темою 1 та пройти відповідне тестування. Підготувати огляд сучасних застосувань DFT у матеріалознавстві (2-3 сторінки). Порівняти можливості різних програмних пакетів для DFT розрахунків (VASP, Quantum Espresso, SIESTA, ABINIT). Встановити та налаштувати програмне середовище (Python, ASE, Jupyter). Виконати базові операції з атомістичними структурами в ASE. Створити візуалізацію кристалічної структури обраного матеріалу. Підготувати письмовий звіт у форматі PDF з необхідними текстовими матеріалами та знімками екрану (за необхідності).	10
2	Основні теоретичні положення теорії функціоналу електронної густини (DFT) Опрацювати лекційний матеріал за темою 2 та пройти відповідне тестування. Детально вивчити рівняння Кона-Шема та їх фізичний зміст. Порівняти різні обмінно-кореляційні функціонали (LDA, GGA, інші). Проаналізувати переваги та недоліки наближення псевдопотенціалів. Виконати тестові розрахунки для простої системи (за індивідуальним завданням). Дослідити збіжність енергії від параметрів розрахунку (kinetic energy cutoff, k-points). Побудувати графіки залежності енергії від параметрів та визначити оптимальні для розрахунку параметри. Підготувати письмовий звіт у форматі PDF з необхідними текстовими матеріалами та знімками екрану (за необхідності).	12
3	Рівноважна структура матеріалів з DFT Опрацювати лекційний матеріал за темою 3 та пройти відповідне тестування. Виконати структурну оптимізацію для простої системи (за індивідуальним завданням) з двох початкових нерівноважних станів згенерованих ASE Atoms.rattle(). Дослідити вплив початкової конфігурації на результат оптимізації. Порівняти різні алгоритми оптимізації (BFGS, CG). Виконати короткий розрахунок молекулярної динаміки (10-20 кроків). Проаналізувати траєкторію руху атомів. Підготувати письмовий звіт у форматі PDF з необхідними текстовими матеріалами та знімками екрану (за необхідності).	12
4	Електронна зонна структура та дисперсія фононів Опрацювати лекційний матеріал за темою 4 та пройти відповідне тестування. Для простої системи за індивідуальним завданням: розрахувати зонну структуру та густину електронних станів, визначити тип провідності матеріалу, оцінити ширину забороненої зони. Для простої системи за індивідуальним завданням: розрахувати дисперсію фононів, густину фононних станів, температурні залежності теплоємності, вібраційної ентропії та вібраційної вільної енергії та візуалізувати їх. Підготувати письмовий звіт у форматі PDF з необхідними текстовими матеріалами та знімками екрану (за необхідності).	12
5	Підготовка атомістичних даних для моделей машинного навчання Опрацювати лекційний матеріал за темами 5 та 6 та пройти відповідне тестування. Згенерувати структурні конфігурації зі змінною концентрацією компонентів для простого бінарного сплаву (за індивідуальним завданням) перебором, здійснити їх структурну оптимізацію та записати результати до бази даних ASE.db. Залучити з	12

	бази даних NOMAD дані DFT розрахунків які містять структурну інформацію, енергію, сили та тензор напружень для простої системи (за індивідуальним завданням), розділити їх методом <code>scikit-learn train_test_split</code> на набори тренування та перевірки, які записати у текстові файли у форматі <code>.xyz(extended)</code> . Підготувати письмовий звіт у форматі PDF з необхідними текстовими матеріалами та знімками екрану з кодом та виводом у <i>Jupyter Notebook</i> .	
6	Тренування, валідація та застосування моделі кластерного розкладу Опрацювати лекційний матеріал за темою 7 та пройти відповідне тестування. За отриманим у завданні 5 до самостійної роботи тренувальним набором для простого бінарного сплаву (за індивідуальним завданням) та з використанням програмного модуля <code>icet</code> натренувати модель кластерного розкладу включно з перевіркою продуктивності усіх доступних моделей лінійної регресії та підбором відстаней обрізки для пар, триплетів та квадруплетів та із застосуванням процедури крос-валідації. Проаналізувати продуктивність отриманої моделі та коефіцієнти ефективних кластерних взаємодій. Генерувати методом перебору структурні конфігурації розміром до 8 елементарних комірок (із записом в базу даних), передбачити їх енергії змішування за моделлю кластерного розкладу та побудувати лінію основних станів. Створити відповідні графічні візуалізації. Визначити основний стан у системі та візуалізувати його структуру. Підготувати письмовий звіт у форматі PDF з необхідними текстовими матеріалами та знімками екрану з кодом та виводом у <i>Jupyter Notebook</i> .	12
7	Тренування, валідація та застосування міжатомного потенціалу машинного навчання За залученням із бази даних NOMAD у завданні 5 на самостійну роботу набором даних та з використанням програмного модуля <code>NequIP</code> , для простої системи здійснити підбір гіперпараметрів та тренування моделі міжатомних потенціалів машинного навчання. Застосувати натреновану модель до набору перевірки, візуалізувати та проаналізувати результати. Створити суперкомірку структури розміром близько 1000 атомів (залежно від системи в індивідуальному завданні) та використати натренований міжатомний потенціал машинного навчання для молекулярної динаміки з програмним модулем ASE для кількості кроків аналогічної до завдання 3 на самостійну роботу. Порівняти продуктивність DFT та міжатомних потенціалів машинного навчання за часом розрахунку. Підготувати письмовий звіт у форматі PDF з необхідними текстовими матеріалами та знімками екрану з кодом та виводом у <i>Jupyter Notebook</i> .	12
8	Модульна контрольна робота	10

7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Правила відвідування занять

Здобувачам рекомендується відвідувати заняття.

Правила поведінки на заняттях

Під час занять здобувачі можуть використовувати засоби зв'язку для пошуку інформації по темі заняття в мережі Інтернет.

Правила захисту самостійних та модульних контрольних робіт студентів

Виконані самостійні та домашні контрольні роботи аспірантів завантажуються у відповідні розділи дистанційного курсу.

Правила призначення заохочувальних та штрафних балів

За відвідування лекцій та участь у активності “клікер” та за творче вирішення завдань на самостійну роботу можуть призначатись заохочувальні бали. Для кожного випадку призначення балів їх нарахування здійснюється за 100 бальною шкалою, однак загальна сума заохочувальних балів не може перевищувати 10% рейтингової шкали (див. РСО). Штрафні бали програмою не передбачено.

Політика дедлайнів та перескладань

Дедлайн захисту СРС — 2 тижні після видачі завдання.

Дедлайн захисту модульної контрольної роботи — останнє за розкладом заняття.

Політика щодо академічної доброчесності

Політика та принципи академічної доброчесності визначені у розділі 3 Кодексу честі Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського». Детальніше: <https://kpi.ua/code>.

Відповідно до Політики використання штучного інтелекту для академічної діяльності в КПІ ім. Ігоря Сікорського <https://osvita.kpi.ua/node/1225> в Університеті визнається академічно нечесним такі способи використання моделей ШІ, які порушують принципи доброчесності та етики досліджень:

- Видання тексту, згенерованого ШІ або перефразованого ШІ вмісту інших джерел, за власну роботу. Використання ШІ для автоматичної генерації текстів або перефразування наявного контенту без належного вказання джерел порушує принципи авторства та вважається плагіатом.
- Створення неправдивих даних і представлення їх як підтвердження власних досліджень (фабрикація даних). Генерація ШІ неправдивих даних та їх використання як підстави для наукових висновків є серйозним порушенням академічної доброчесності та може викликати негативні наслідки для якості досліджень та репутації дослідника.

Норми етичної поведінки

Норми етичної поведінки здобувачів і працівників визначені у розділі 2 Кодексу честі Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського». Детальніше: <https://kpi.ua/code>.

Процедура оскарження результатів контрольних заходів

Здобувачі мають можливість підняти будь-яке питання, яке стосується процедури контрольних заходів та очікувати, що воно буде розглянуто згідно із наперед визначеними процедурами. Здобувачі мають право оскаржити результати контрольних заходів, але обов'язково аргументовано, пояснивши з яким критерієм не погоджуються відповідно до оціночного листа та/або зауважень.

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

Поточний контроль: інтерактивні тематичні тестування за лекційним матеріалом, самостійна робота здобувача, модульна контрольна робота.

Інтерактивні тематичні тестування за матеріалами лекцій призначені для виконання здобувачами під час самостійного опрацювання матеріалів лекцій і покликані зосередити увагу на ключових та проблемних аспектах відповідного матеріалу, сфокусувати опрацювання відповідних розділів дисципліни, сприяти визначенню аспектів матеріалу, які є складними для здобувача індивідуально та стимулювати пошук способів усунення цих ускладнень.

Завдання на самостійну роботу здобувача розроблено таким чином, щоб забезпечити закріплення знань та вмінь, отриманих на лекційних та практичних заняттях на нових системах та стимулювати опрацювання основної та додаткової літератури.

Метою модульної контрольної роботи, яка здійснюється в режимі інтерактивного тестування в строго обмежених часових рамках (1 академічна година) і являє собою вибірку запитань з тематичних тестувань, є контроль засвоєння матеріалу дисципліни в цілому.

Семестровий контроль: залік

Умови допуску до семестрового контролю.

Обов'язкові:

Виконано не менше, ніж $\frac{2}{3}$ інтерактивних тематичних тестувань.

Виконано усі завдання на самостійну роботу

Виконано модульну контрольну роботу

Система рейтингових балів

Рейтинг слухача дисципліни розраховується на підставі результатів виконання ним активностей поточного контролю. Максимальна оцінка за кожну активність становить 100 балів. Для інтерактивних тестувань, бали за активності нараховуються пропорційно до кількості правильних відповідей у тестуванні. Для завдань на самостійну роботу застосовуються наступні критерії:

- завдання виконано повністю відповідно до пояснень та рекомендацій, отриманих під час практичних занять, хід виконання роботи, результати та їх аналіз присутні у звіті - 100 балів;
- завдання виконано повністю, але звіт неповний – 90 балів;
- завдання виконано повністю, але звіт відсутній – 70 балів;
- завдання виконано з помилками або частково, звіт неповний або відсутній – 60 балів;
- завдання не виконано, звіт відсутній – 0 балів.

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

- тематичні тестування: $w_l=0,2$;
- завдання на самостійну роботу: $w_s=0,5$;
- модульна контрольна робота: $w_m=0,3$.

Умовою допуску до заліку є виконання не менше $\frac{2}{3}$ тематичних тестувань протягом семестру.

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

$$R_C = \frac{w_l}{N_l} \sum m_l + \frac{w_s}{N_s} \sum m_s + w_* m_* + \frac{w_+}{N_+} \sum m_+$$

де w_l, w_s, w_*, w_+ – вагові коефіцієнти для тематичних тестувань, завдань на самостійну роботу, модульної контрольної роботи та заохочувальних балів, відповідно; N_l, N_s – кількість лекцій та

завдань на самостійну роботу, відповідно; N_+ – кількість активностей, за які студентом отримано заохочувальні бали; m_l , m_s , m_* , m_+ – кількість балів, отриманих слухачем за окрему активність для тематичних тестів, завдань на самостійну роботу, модульну контрольну роботу та заохочувальних балів, відповідно.

У разі бажання слухача підвищити підсумкову оцінку, він може пройти усну співбесіду за матеріалами курсу 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 виконано умови допуску		Не допущено

9. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

Можливість зарахування сертифікатів проходження дистанційних чи онлайн курсів за відповідною тематикою

Відповідно до Положення про визнання в КПІ ім. Ігоря Сікорського результатів навчання, набутих у неформальній / інформальній освіті (https://document.kpi.ua/files/2020_7-177.pdf) з даної дисципліни є можливість зарахування сертифікатів як результат семестрового контролю одного з наступних онлайн курсів:

1. «Quantum Espresso Software Training» (<https://www.udemy.com/share/104Mzg/>). Мова: англійська, 21 лекція (03:34 год.).
2. «Introduction to Quantum Chemistry Simulation» (<https://www.udemy.com/share/10d9M9/>). Мова: англійська, 56 лекцій (08:37 год.).
3. «From first principles to machine learning methods in materials informatics» (<https://eduportal.kau.org.ua/enrol/index.php?id=419>), 3 лекції (6 год.).

Визнання результатів навчання проводиться до початку семестру. Здобувач звертається з заявою на ім'я декана фізико-математичного факультету з проханням про визнання результатів навчання, набутих у неформальній освіті. До заяви додається відповідний сертифікат, який визначають тематику, обсяги та перелік результатів навчання, набутих під час неформального навчання, а також результати контролю.

Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):

Складено доцентом, к.т.н. **Васильєвим Олександром Олексійовичем**

Ухвалено кафедрою загальної фізики та моделювання фізичних процесів (протокол № 1/06-25 від 25.06.2025)

Погоджено Методичною комісією фізико-математичного факультету (протокол № 10 від 27.06.2025)