

ШТУЧНИЙ ІНТЕЛЕКТ В ОСВІТНЬОМУ ПРОЦЕСІ СТУДЕНТІВ СПЕЦІАЛЬНОСТІ 132 МАТЕРІАЛОЗНАВСТВО

Сазанішвілі З. В., Мацюк І. М., Вернер І. В.

Національний технічний університет «Дніпровська політехніка»

Анотація. У роботі продемонстровано використання штучного інтелекту в освітньому процесі для здобувачів вищої освіти спеціальності 132 «Матеріалознавство» у викладанні дисципліни вибіркового блоку «Штучний інтелект в освітніх технологіях». Описані завдання з практичної підготовки, що допомагають набутти навичок фахівців-матеріалознавців, у майбутньому можна застосовувати в галузі матеріалознавства та суміжних дисциплінах. Продемонстровано впровадження програмних продуктів, зокрема бази даних *Materials Project* для аналізу фізико-хімічних і механічних властивостей матеріалів.

Ключові слова: штучний інтелект, освітній процес, матеріалознавство, база даних *Materials Project*, прогнозування властивостей матеріалів, структури матеріалів.

Вступ

В останні роки спостерігається збільшення інтересу до штучного інтелекту, що зумовлено значним зростанням потужності обчислювальної техніки, а також доступністю до інформації завдяки світовій мережі Інтернет. Використання штучного інтелекту спостерігається в багатьох галузях, серед яких роботехніка, авіаційна техніка, медицина, маркетинг тощо. Нині питання створення нових матеріалів, прогнозування властивостей, додаткової генерації конструктивних особливостей виробів також намагаються розв'язувати за допомогою штучного інтелекту.

Аналіз публікацій

Станом на липень 2003 р. База даних неорганічних кристалічних структур (*The Inorganic Crystal Structure Database, ICSD*) містила 70102 записи. Зазначена база потребує експертного оцінювання та виправлення даних, долучення відсутніх структур [1].

У листопаді 2023 р. був презентований продукт *Graph Networks for Materials Exploration (GNoME)*, що оснований на глибокому навчанні та дає змогу прогнозувати структури нових матеріалів. Системою спрогнозовано 2,2 мільйона структур, 380 тис. з яких є найбільш стабільними. Серед цих кандидатів є матеріали, що мають потенціал для розроблення майбутніх трансформаційних технологій, починаючи від надпровідників, живлення суперкомп'ютерів і акумуляторів нового покоління для підвищення ефективності електромобілів [2]. Також проводяться світові розроблення віртуальних лабораторій синтезу нових сполук і матеріалів, основані на техніці активного навчання бас-

сівської оптимізації, яка прагне зібрати якомога більше інформації та збалансувати дослідження, що дасть змогу створювати дизайн експерименту та зменшити кількість проведення експериментів для виявлення нових перспективних матеріалів [3–5].

Отже, знання основ штучного інтелекту та вміння користуватися вже напрацьованими продуктами, що застосовують машинне навчання, майбутніми фахівцями з матеріалознавства є актуальним завданням.

Мета й постановка завдання

Метою є розроблення освітнього складника, під час якого студенти набудуть необхідних знань у галузі генеративного штучного інтелекту, навичок його практичного застосування для дослідження та розв'язання складних завдань в освітньому процесі.

Для досягнення поставленої мети необхідно розкрити ключові концепції, філософські та етичні аспекти штучного інтелекту, викликані широким спектром його застосування в сучасному суспільстві, ознайомитися з базовими технологіями.

Виклад основного матеріалу (штучний інтелект в освітньому процесі для здобувачів вищої освіти)

Для студентів, що навчаються на кафедрі конструювання, технічної естетики і дизайну НТУ «Дніпровська політехніка» за спеціальністю 132 «Матеріалознавство», викладається дисципліна вибіркового блоку «Штучний інтелект в освітніх технологіях».

Метою зазначеної дисципліни є вивчення основних концепцій штучного інтелекту (ШІ), його філософських і етичних аспектів, а також

аналіз актуальних викликів, що виникають у зв'язку з упровадженням ШІ в сучасне суспільство. Навчальна дисципліна охоплює як теоретичні, так і практичні аспекти, зокрема лабораторні роботи та розроблення проєктів, що дадуть змогу студентам застосовувати знання для виконання прикладних завдань.

Теоретичні аспекти курсу «Штучний інтелект в освітніх технологіях» охоплюють широкий спектр тем, що сприяють глибшому розумінню студентами принципів функціонування штучного інтелекту, його розвитку та ролі в сучасному суспільстві. Основоположним є вивчення поняття інтелекту та когнітивних функцій, що формує фундамент для подальшого розгляду штучного інтелекту як інструменту, що імітує людське мислення. Розвиток ШІ розглядається крізь призму його історичного становлення та ключових етапів, що привели до сучасного рівня технологій.

Однією з важливих тем є філософський аспект штучного інтелекту, що досліджує питання свідомості, мислення та здатності машин до творчих можливостей. Це передбачає дискусію про те, чи можна вважати ШІ інтелектуальною сутністю та як визначаються межі між людським і штучним інтелектом. Крім того, аналізуються моделі подання знань, які є основою для будь-якої системи ШІ, а також вимоги до цих моделей у контексті забезпечення коректності та ефективності.

Окрім того, розглядаються ключові задачі, які розв'язує штучний інтелект, зокрема в галузі автоматизації процесів, аналізу інформації та прогнозування. Генеративний ШІ є ще однією важливою темою, що дає змогу студентам зрозуміти, як штучний інтелект здатний створювати нові тексти, зображення та інші форми інформації.

Крім технологічних аспектів, дисципліна «Штучний інтелект в освітніх технологіях» охоплює етичні питання, пов'язані із застосуванням ШІ. Вивчаються моральні дилеми, що виникають у зв'язку з використанням штучного інтелекту, а також роль академічної доброчесності в умовах його стрімкого розвитку.

Навчальна дисципліна передбачає низку лабораторних робіт і проєктів, завдяки чому студенти можуть закріпити матеріал і набути практичних навичок застосування штучного інтелекту в реальних умовах.

Однією з основних частин практичного навчання є робота з генеративними моделями штучного інтелекту. Здобувачі можуть самостійно створювати тексти за допомогою ШІ, що сприяє розумінню механізмів функціонування мовних моделей і особливостей їх ви-

користання в різних завданнях. Аналогічно практикується генерація зображень і аудіо за допомогою відповідних алгоритмів ШІ, що дає змогу студентам зануритися у світ творчих можливостей штучного інтелекту.

Завдання передбачає глибоке дослідження та аналіз упровадження штучного інтелекту в певній галузі, зокрема в дизайні, інженерії або освіті. Здобувачі мають не тільки розкрити тему з погляду сучасного розвитку технологій, а й продемонструвати приклади реального застосування ШІ в обраній сфері. Щоб досягти якісного результату, студентам необхідно розробити промти так, щоб спрямувати штучний інтелект на створення контенту, що відповідає вимогам наукової доповіді, уникати надмірного використання маркованих переліків, а також зважати на академічні стандарти оформлення. Наприклад, одним із практичних завдань студентів є генерація тексту за допомогою *ChatGPT*. Обсяг кожної роботи має бути не меншим ніж чотири сторінки формату А4 за умови використання шрифту 14 тегу. Необхідно, щоб робота містила три ключові частини. У першій частині (вступ) необхідно подати стислий огляд теми та визначити актуальність використання ШІ в обраній галузі. Друга частина (основна) має містити приклади практичного застосування ШІ, пояснення того, як саме він допомагає вирішувати конкретні завдання, а також інформацію щодо використовуваних інструментів або алгоритмів. У третій частині роботи (висновки) необхідно підсумувати досліджене, оцінити ефективність ШІ в обраній сфері та надати рекомендації щодо подальшого вдосконалення його впровадження. Отже, описане завдання не тільки навчає студентів користуватися ШІ для створення текстів, а й формує навички критичного мислення та аналізу сучасних технологічних трендів.

Окрім місця в практичній підготовці студентів спеціальності 132 «Матеріалознавство» посідає створення наукового проєкту з використанням бази даних *Materials Project* [6]. Застосовуючи потужність суперкомп'ютерів і найсучасніших методів, *Materials Project* надає відкритий вебдоступ до обчисленої інформації про відомі та прогнозовані матеріали. За допомогою цього ресурсу можна виконати низку важливих завдань у галузі матеріалознавства та суміжних дисциплін.

Мета студентського дослідження полягає у вивченні можливостей бази даних *Materials Project* для аналізу фізико-хімічних і механічних властивостей матеріалів. Проєкт спрямо-

ваний на аналіз трьох матеріалів із різними кристалічними структурами, їх властивостей і можливого застосування в промисловості.

Наведемо приклад використання зазначеної бази даних. На основній сторінці платформи розміщене поле для пошуку, що дає змогу шукати матеріали за їх хімічними формулами (наприклад, "SiO₂", "FeO₃") або окремими елементами (рис. 1).



Рис. 1. Пошуковий інтерфейс платформи *Materials Project*

Платформа допомагає застосувати фільтри для більш точного пошуку, серед яких є такі критерії: композиція – хімічна система, елементи, що необхідно обов'язково додати або вилучити, та їх загальна кількість; термодинаміка сполуки, зокрема чи є вона стабільною; кристалічна структура та її властивості; магнітні властивості; електронні властивості тощо.

За запитом формується перелік можливих сполук. Наприклад, для системи Al-Sc існує варіація з дев'яти композицій, серед яких синтезовані раніше з'єднання мають спеціальну мітку (рис. 2).

9 materials match your search
Showing 1-15

Chemical System: Al-Sc

Material ID	Formula	Crystal System
★ mp-331	ScAl	Cubic
mp-978498	Sc ₃ Al	Cubic
★ mp-999206	ScAl	Orthorhombic
★ mp-2121	ScAl ₃	Cubic
mp-999204	ScAl ₃	Tetragonal
★ mp-11220	Sc ₂ Al	Hexagonal
★ mp-813	ScAl ₂	Cubic
mp-862259	Sc ₃ Al	Hexagonal
mp-1209129	Sc ₄ Al	Cubic

Рис. 2. Перелік можливих сполук, що відповідають пошуковому запиту

Платформа пропонує можливість візуалізувати атомні структури матеріалів у тривимірному форматі. Це допомагає студентам аналізувати геометрію матеріалу, симетрію та просторове розташування атомів. Наприклад, для заліза показано 10 варіацій композиції, серед яких 2 кубічні фізично наявні з *ID mp-13* і *mp-150* (рис. 3).

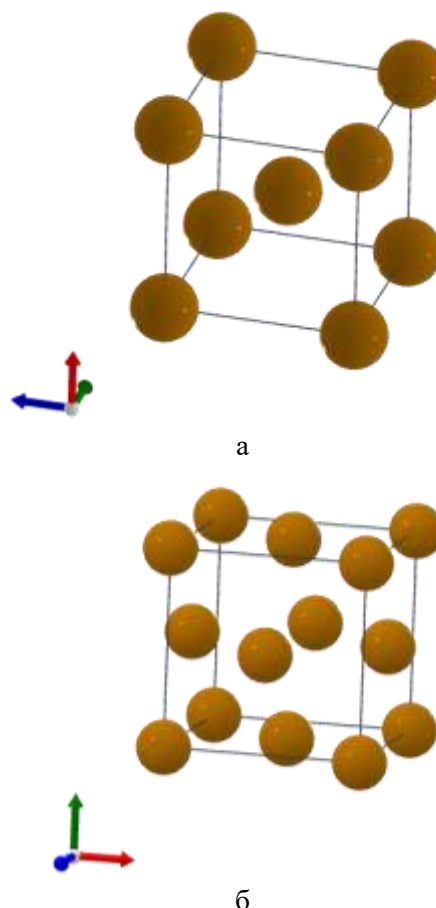


Рис. 3. Візуалізація елементарної комірки для заліза: а – *ID mp-13* з ОЦК-ґраткою (α -Fe); б – *ID mp-150* з ГЦК-ґраткою (γ -Fe)

На платформі *Materials Project* наведено параметри примітивної комірки. Так, для α -Fe $a = b = c = 2,86 \text{ \AA}$, а для γ -Fe – $3,66 \text{ \AA}$. Також можна згенерувати графік рентгеновської дифракції, вивчити базові механічні властивості, отримати результати кристалографічних досліджень тощо.

Платформа *Materials Project* є потужним інструментом для аналізу й прогнозування властивостей матеріалів. Через те, що вона оснований на машинному навчанні та надає відкритий доступ онлайн до бази матеріалів, ця платформа є перспективною для впровадження в практичну діяльність студентів у межах дисципліни «Штучний інтелект в освітніх технологіях».

Висновки

Запропоновано розроблення програми навчальної дисципліни вибіркового блоку «Штучний інтелект в освітніх технологіях».

Запровадження зазначеної навчальної дисципліни є важливим кроком у підготовці студентів до сучасних викликів. Вона покликана допомогти здобувачам не лише зрозуміти основні аспекти штучного інтелекту, але й застосовувати його для розв'язання прикладних завдань у своїй професійній діяльності.

З огляду на широке впровадження ШІ в різні галузі науки й техніки, матеріалознавство також перебуває під впливом цих технологій. Зокрема застосування генеративних моделей для прогнозування властивостей матеріалів, оптимізації процесів і розроблення нових матеріалів відкриває нові горизонти для досліджень. Завдяки вивченню ШІ майбутні фахівці в галузі матеріалознавства зможуть використовувати сучасні технології для досліджень, що сприятиме підвищенню якості освітнього процесу та наукових розробок.

Література

- Hellenbrandt, M. (2004). The inorganic crystal structure database (ICSD) – present and future. *Crystallography Reviews*, 10(1), 17–22.
- Millions of new materials discovered with deep learning. (2023, 29 листопада). Google DeepMind. <https://deepmind.google/discover/blog/millions-of-new-materials-discovered-with-deep-learning/>
- Szymanski, N. J., Rendy, B., Fei, Y. та ін. Автономна лабораторія для прискореного синтезу нових матеріалів. *Nature* 624, 86–91 (2023). <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06734-w>
- Manzano, J. S., Hou, W., Zaleskiy, S. S., Frei, P., Wang, H., Kitson, P. J., Cronin, L. (2022). An autonomous portable platform for universal chemical synthesis. *Nature Chemistry*, 14(11), 1311–1318.
- Kusne, A. G., Yu, H., Wu, C. *et al.* On-the-fly closed-loop materials discovery via Bayesian active learning. *Nat Commun* 11, 5966 (2020). <https://doi.org/10.1038/s41467-020-19597-w>
- Materials Project. (б. д.). Materials Project. <https://next-gen.materialsproject.org/>

References

- Hellenbrandt, M. (2004). The inorganic crystal structure database (ICSD) – present and future. *Crystallography Reviews*, 10(1), 17–22.
- Millions of new materials discovered with deep learning. (2023, 29 листопада). Google DeepMind. [https://deepmind.google/discover/blog/millions-of-new-materials-discovered-with-](https://deepmind.google/discover/blog/millions-of-new-materials-discovered-with-deep-learning/)

deep-learning/

- Szymanski, N. J., Rendy, B., Fei, Y. та ін. Автономна лабораторія для прискореного синтезу нових матеріалів. *Nature* 624, 86–91 (2023). <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06734-w>
- Manzano, J. S., Hou, W., Zaleskiy, S. S., Frei, P., Wang, H., Kitson, P. J., Cronin, L. (2022). An autonomous portable platform for universal chemical synthesis. *Nature Chemistry*, 14(11), 1311–1318.
- Kusne, A. G., Yu, H., Wu, C. *et al.* On-the-fly closed-loop materials discovery via Bayesian active learning. *Nat Commun* 11, 5966 (2020). <https://doi.org/10.1038/s41467-020-19597-w>
- Materials Project. (б. д.). Materials Project. <https://next-gen.materialsproject.org/>

Сазанішвілі Зоя Віталіївна¹, к. т. н., доцент кафедри конструювання, технічної естетики і дизайну, sazanishvili.z.v@nmu.one, тел. +38 093-403-79-92,

Мацюк Ірина Миколаївна¹, к. т. н., доцент кафедри конструювання, технічної естетики і дизайну, matsiuk.i.m@nmu.one, тел. +38 050-453-99-92,

Вернер Ілля Володимирович, ст. викл. кафедри конструювання, технічної естетики і дизайну, verner.i.v@nmu.one, тел. +38 097-509-66-29.

¹Національний технічний університет «Дніпровська політехніка», 49005, Україна, м. Дніпро, пр. Дмитра Яворницького, 19.

Artificial Intelligence in the Educational Process of Students of Specialty 132 Material Science

Abstract. Problem. A current problem in recent years is an increase in interest in artificial intelligence, which is due to a significant increase in the power of computing equipment, as well as the availability of data through the global Internet network. The use of artificial intelligence is observed in many fields, in particular in materials science. Today, in the educational process, the issues of creating new materials, predicting properties, additional generation of design features of products are also being solved with the help of artificial intelligence. **Goal.** The goal of the research in the paper is to demonstrate the use of artificial intelligence in the educational process for students of higher education in the specialty 132 Materials science on the example of teaching the discipline of the selective block "Artificial intelligence in educational technologies". **Methodology.** Research methods for the application of the platform offer the opportunity to visualize the atomic structures of materials in a three-dimensional format. It helps students analyze material geometry, symmetry, and the spatial arrangement of atoms. **Originality.** The Materials Project platform is a powerful tool for analyzing and predicting material properties. Due to the fact that it is based on machine learning and provides open online access to the material base, this platform is promising for implementation in the practical activities of students

within the discipline "Artificial Intelligence in Educational Technologies". **Practical value.** The practical training tasks described, which help to acquire the skills of materials scientists, may be used in the field of materials science and related disciplines in the future. The use of software products, in particular the Materials Project database, for the analysis of physico-chemical and mechanical properties of materials is demonstrated.

Keywords: artificial intelligence, educational process, materials science, Materials Project database, prediction of material properties, material structure.

Sazanishvili Zoia¹, PhD, Assoc. Prof. Engineering and Generative Design Department, ORCID: 0000-0003-4138-9238, sazanishvili.z.v@nmu.one,

Iryna Matsiuk¹, PhD, Assoc. Prof., Engineering and Generative Design, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-0861-0933>, matsiuk.i.m@nmu.one,

Illia Verner¹, Senior Lecturer, Engineering and Generative Design ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-2427-3284>, verner.i.v@nmu.one.

¹Dnipro University of Technology, av. D. Yavornytskyi 19, Dnipro, 49005, Ukraine.
