

**Дигитална лаборатория по Материалознание:  
създаване на симулатори  
с помощта на голям езиков модел и Natural Language Programming  
Мариана Илиева**

**Digital Materials Science Laboratory:  
Designing Simulation Models  
via Natural Language Programming and Large Language Models  
Mariana Ilieva**

**Abstract:**

The paper focuses on the development of interactive educational simulators for Materials Science teaching using Large Language Models. The possibility of the use of the Natural Language Programming method that enables a subject matter expert with no prior coding skills to create software simulations of complex physicochemical phenomena through iterative dialogue, was experimentally investigated. The results demonstrated that through expert control and the minimization of grammatical entropy, the Gemini language model can be effectively used to develop simulators that adhere to the fundamental laws of physical chemistry of the phenomena they describe.

**Keywords:** materials science, large language models, simulation models, natural language programming, human-in-the-loop.

**For contacts:** Mariana Ilieva, University of Ruse, mdilieva@uni-ruse.bg

**ВЪВЕДЕНИЕ**

Обучението по Материалознание на студенти от инженерни специалности изисква предаване на абстрактни идеи и понятия, което понякога е трудно. В същото време, студентите са привързани към преносимите си устройства, и разчитат на големите езикови модели (LLMs) за обяснения на абстрактни понятия. LLMs са известни с невинаги точната си, но професионално оформена информация [1-3]. Положителна страна на езиковите модели обаче е възможността те да бъдат използвани за създаване на интерактивни инструменти за обучение [4, 5]. Това трябва да става под контрола и след валидиране от експерт в съответната област, защото моделите показват математическа логика, като статистически предвиждат следващата дума, без да “разбират” същността на физико-химичните явления [6-9]. Валидирането може да се осъществи по метода “човек в цикъла” (human in the loop). За да се гарантира отстраняване на халюцинациите на LLMs и фактологична точност на разработените дидактични материали, е нужно този човек, освен да бъде експерт, и да подава към модела прецизно формулирани промптове, тъй като между качеството на изхода на езиковия модел и точността на промпта съществува пряка зависимост [1, 5, 8, 10-14]. Целта на настоящата работа е да изследва как потребител–експерт без умения в програмирането може да взаимодейства с модел като Gemini, за да създаде физически верни симулации за обучение на студенти от инженерните специалности по дисциплините „Материалознание“ и „Строителни материали“ чрез метода „човек в цикъла“.

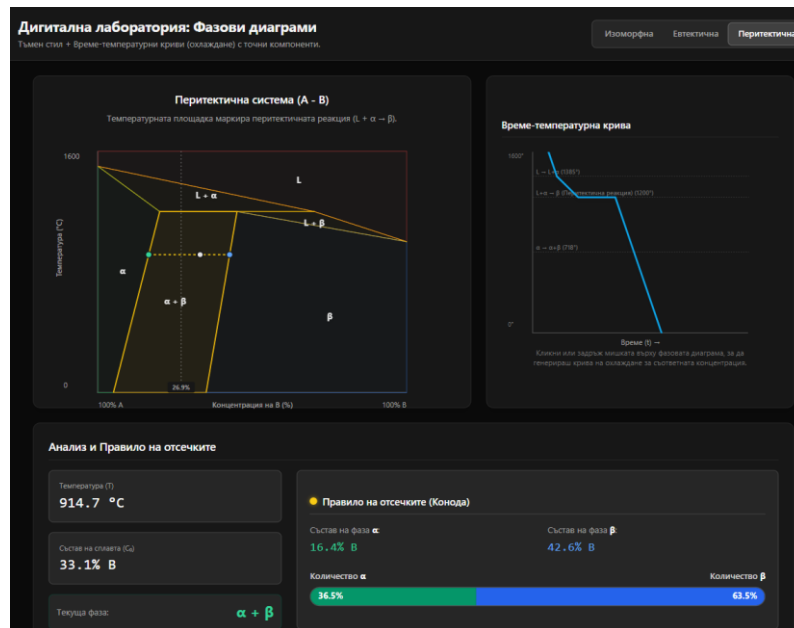
## ИЗЛОЖЕНИЕ

**Методика на експеримента** Представеният тук експеримент цели разработване на достъпни интерактивни симулатори на физико-химични и механични процеси, преподавани по дисциплините Материалознание и Строителни материали, като заместител на скъп специализиран софтуер. Симулаторите бяха разработени с помощта на големия мултимодален езиков модел Gemini (Thinking) на Google, базиран на архитектурата Transformer [15, 16]. Моделът Gemini е бил предварително обучен от Google върху големи масиви от данни [17], работата му се основава на вероятностно прогнозиране на токени. Потребителят-експерт е преподавател по материалознание с базова компютърна грамотност (администриране на Windows и Linux операционни системи) и опит със специализиран софтуер, но без умения в програмирането. Взаимодействието с Gemini се извършваше през браузър в Windows и през браузър и приложение в Android. За разработване на симулаторите потребителят използва естествен език и метода на итеративното промптиране.

**Създаване на симулациите** Беше разработена дигитална лаборатория със симулации на 22 процеса, разпределени в 7 симулатора. Всеки симулатор представлява отделен html файл - таблица 1. Процесът по създаване на дигиталната лаборатория премина през пет етапа: 1) първоначално инструктиране на модела за критично мислене и избягване на потвърждаващото пристрастие; 2) смислово дефиниране на коректни научни термини, например за “фаза” и “перитектична реакция”; 3) итеративна корекция на генерираните “халюцинации” чрез постоянна обратна връзка; 4) верификация на логиката на всеки симулатор спрямо фундаменталните физико-химични закони; 5) минимални корекции в кода на симулаторите, които Gemini не направи. Фигура 1 показва малка част от така разработената лаборатория.

Таблица 1. Функционален обхват на разработената дигитална лаборатория

Симулатор	Съдържание и обхват	Ключова логика и симулации
<b>1. Дефекти в кристалния строеж</b>	6 вида дефекти.	Точкови и линейни дефекти.
<b>2. Диаграми на състояния</b>	Системи Cu-Ni, Pb-Sn, перитектична реакция.	Правило на фазите, правило на отсечките.
<b>3. Диаграма Fe-Fe<sub>3</sub>C</b>	Фазов състав и структура	Разграничаване на „фаза“ от „структура“.
<b>4. Динамика на дефектите</b>	4 модела на движение и образуване на дефекти.	Размножаване чрез източници на Франк-Рийд; блокиране чрез облаци на Котрел.
<b>5. Изпитвания и микроскопия</b>	Твърдост (HB, HRC, HV), опън, Виртуален микроскоп.	Математическо моделиране на натоварването; морфология на ферит, перлит и ледебурит.
<b>6. Термодинамика</b>	4 фундаментални модела на фазови превръщания.	Изотермична кристализация на чисти метали; желязо при високо налягане (>13 GPa).
<b>7. Структурен модел на Бейн</b>	Симулатор на мартензитно превръщане.	Механизъм на пренареждане на решетката при закаляване.



Фигура 1. Част от дигиталната лаборатория на тема диаграми на състояния

**Анализ на взаимодействието с Gemini** Работата по време на експеримента показва, че езиковият модел Gemini допуска грешки, характерни и за студентите. Тези грешки бяха отстранени чрез обратна връзка и допълнително in-situ дефиниране на научни термини. Един от най-ярките примери за грешка на Gemini беше смесването на понятията „фаза“ и „микроструктура“ при симулирането на диаграмата Fe-Fe<sub>3</sub>C, както и грешно изчертаване на време-температурни криви на бавно охлаждане на чисти метали и сплави. Друга грешка беше използването на думата „перитектика“. При симулирането на полиморфизма на Fe се наложи Gemini да бъде инструктиран за анализ на данни за поведението на Fe при екстремни условия, когато е нужно да се определят граници не само на температурата, но и на налягането ( $\epsilon$ -Fe). За целта трябваше статистическата логика на Gemini да бъде допълнително надградена с данни от физиката на твърдото тяло. Посочените подробности показват, че LLMs имат възможностите да работят с висока точност на пресъздаване на физико-химичните явления, но трябва да бъдат контролирани от експерт. В противен случай се представят неадекватно. Част от промптовете не бяха изпълнени от Gemini, такива като изискването за конкретно форматиране на текст. Това наложи потребителят да се запознае със структурата на симулаторите и с основите на програмирането им, за да нанесе ръчно корекции чрез Visual Studio Code. Тази съществена подробност показва ограничение във възможността за придаване на желан от потребител без умения в програмирането естетичен вид на симулаторите.

**Лингвистично-структурна оптимизация (EmotionPrompt)** LLMs позволяват разнообразие на взаимодействието с тях по голям брой теми. В същото време, помощните ресурси за работа с модела Gemini представляват голяма база данни. Това затруднява прилагането на тактиката „отваряш help-а и четеш“, така че по време на експеримента се наложи потребителят да задава въпроси на модела за собствените му възможности. В „дискусията“ за разработване на симулаторите се установи, че граматически и пунктуационно коректните промптове (намалена

ентропия на входа), съчетани с учтив, но разговорен тон от страна на потребителя, увеличават точността на изхода на модела – т.е. моделът „оценява“ учтивото отношение към него. Така, с цел управление на изхода, потребителят наложи „партньорски“ тон на взаимодействието, като този тон не е израз на антропоморфизъм, а целенасочен подход за увеличаване на точността на модела. В специализираната литература е докладван подобен ефект при взаимодействие с LLMs. Авторите на [18] въвеждат термина EmotionPrompt - добавяне на емоционално интелигентни фрази към техническите инструкции, в резултат на което точността на изхода се увеличава с до 11%. В настоящия експеримент този ефект също беше наблюдаван. Авторите на [19] разглеждат учтивостта като начин за насочване на модела към специфични обучаващи масиви, и анализът им потвърждава, че езиковите модели свързват учтивия език с академична литература. В представения тук експеримент, лингвистичното настройване на потребителя беше критично за коректната симулация на поведението на Fe в зависимост от температурата и налягането. Кратките, небрежни промптове връщаха общодостъпни и непълни данни за полиморфизма на Fe, докато „учтивото и партньорско“ отношение към модела го принуди да търси данни в тясно специализирана литература по физико-химия, така че крайната симулация да отразява действителността по максимално възможния начин.

Трябва да се спомене и дисциплиниращият ефект на „учтивия“ подход върху потребителя. При работа с LLMs, този подход служи като регулатор на изследователя – за дефиниране на „чист“ вход и подаване на учтива и пълна заявка, потребителят първо трябва да подреди логическите параметри в собствения си ум. Така шумът на входа е сведен до минимум, и халюцинациите, предизвикани от неясно формулирани условия, намаляват.

## **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Проведеният експеримент показва, че с помощта на Gemini (Thinking) и естествен език могат да се разработват фактологично верни симулации на физико-химични и механични процеси, при което не се налага употреба на платен софтуер. За успешното създаване на симулациите трябва потребителят да е експерт в съответната област, за да зададе логическата рамка на модела, както и да има минимални познания за езика на разработения код. Отказът на Gemini да приложи специфично визуално оформяне на симулаторите наложи преминаване от програмиране на естествен език към директна ръчна корекция на програмния код. Това доказва, че коректно формулираните промптове със стремеж за нулева граматична и пунктуационна ентропия на входа определят в голяма степен логическата издържаност на изхода, така че експертът в цикъла се явява неизбежна необходимост при генериране на дидактично съдържание.

## **ЛИТЕРАТУРА**

1. Liu, C. A comprehensive review of applications of AI technologies in higher engineering education. Discover Education, vol. 4, 2025.
2. Pino Tarragó, J. C., et al. Artificial intelligence and soft skills in civil engineering education: A Latin American curriculum gap with global implications. Research in Globalization, vol. 11, 2025.

3. Fan, L., et al. Educational impacts of generative artificial intelligence on learning and performance of engineering students in China. *Scientific Reports*, vol. 15, 2025.
4. Naseer, F., et al. Integrating deep learning techniques for personalized learning pathways in higher education. *Heliyon*, 2024.
5. Denny, P., et al. Computing Education in the Era of Generative AI. *Communications of the ACM*, vol. 67, no. 2, 2024.
6. Niksiar, P., & Michalaka, D. Generative Artificial Intelligence for Enhanced Engineering Education; Strengths, Challenges and Validation. *ASEE Annual Conference & Exposition*, 2025.
7. Puthumanaim, G., et al. The Lazy Student's Dream: ChatGPT Passing an Engineering Course on Its Own. *arXiv preprint arXiv:2503.05760*, 2025.
8. Qadir, J. Engineering Education in the Era of ChatGPT: Promise and Pitfalls of Generative AI for Education. *14th IEEE Global Engineering Education Conference (EDUCON)*, 2023.
9. Phokoye, S. P., et al. A Comprehensive Review of ChatGPT in Teaching and Learning Within Higher Education. *Informatics*, vol. 12, no. 74, 2025.
10. Memarian, B., & Doleck, T. Human-in-the-loop in artificial intelligence in education: A review and entity-relationship (ER) analysis. *Computers in Human Behavior: Artificial Humans*, vol. 2, 2024.
11. Akolekar, H., et al. The role of generative AI tools in shaping mechanical engineering education from an undergraduate perspective. *Scientific Reports*, vol. 15, 2025.
12. Francis, N. J., et al. Generative AI in higher education: Balancing innovation and integrity. *British Journal of Biomedical Science*, vol. 81, art. 14048, 2025.
13. Ouyang, F., et al. Integration of artificial intelligence performance prediction and learning analytics to improve student learning in online engineering course. *International Journal of Educational Technology in Higher Education*, 2023.
14. Haugsbaken, H., & Hagelia, M. A new AI literacy for the algorithmic age: Prompt engineering or educational promptization?. *4th International Conference on Applied AI*, 2024.
15. Gemini Team, Google. Gemini: A Family of Highly Capable Multimodal Models. *arXiv preprint arXiv:2312.11805*, 2023/2025.
16. Vaswani, A., et al. Attention Is All You Need. *Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS)*, vol. 30, 2017.
17. Kaplan, J., et al. Scaling Laws for Neural Language Models. *arXiv preprint arXiv:2001.08361*, 2020.
18. Li, C., et al., "Large Language Models Understand and Can be Enhanced by Emotional Stimuli," *arXiv preprint arXiv:2307.11760*, 2023. [Online]. Available: <https://arxiv.org/abs/2307.11760>
19. Yin, J. et al., "Should We Respect LLMs? A Cross-Lingual Study on the Influence of Prompt Politeness on LLM Performance," *arXiv preprint arXiv:2402.14531*, 2024. [Online]. Available: <https://arxiv.org/abs/2402.14531>