

Artificial Intelligence for Materials Science
6 hp

TFYB16

Gäller från:

Fastställd av	Huvudområde	
	Teknisk fysik	
Fastställandedatum	Utbildningsnivå	Fördjupningsnivå
	Avancerad nivå	A1X
Reviderad av	Utbildningsområde	
	Information saknas	
Revideringsdatum	Ämnesgrupp	
Gavs första gången	Gavs sista gången	
VT 2027		
Institution	Ersätts av	
Institutionen för fysik, kemi och biologi		

Kursen ges för

- Civilingenjörsprogram i teknisk fysik och elektroteknik - internationell
- Civilingenjörsprogram i teknisk fysik och elektroteknik
- Civilingenjörsprogram i medicinsk teknik

Rekommenderade förkunskaper

Grundläggande kunskaper i linjär algebra, matematisk statistik och programmering. Bakgrundskunskaper inom materialvetenskap, fysik, kemi eller ett relaterat område.

Lärandemål

Syftet med kursen är att introducera maskininlärning och artificiell intelligens-metoder och utrusta studenten med de kunskaper och färdigheter som behövs för att börja tillämpa sådana metoder för att lösa problem inom materialvetenskap. Efter kursen ska studenterna kunna:

- implementera och använda klassiska maskininlärningstekniker och neurala nätverk
- få tillgång till och använda materialdata från öppna online-databaser
- välja lämpliga tekniker/algoritmer för ett givet problem
- tillämpa artificiell intelligens-metoder i ett materialvetenskapligt projekt och presentera resultaten.

Kursinnehåll

Kursinnehållet är uppdelat i sex moduler.

1. Introduktion till Python Denna korta modul är valfri och främst för studenter utan tidigare Python-erfarenhet. Modulen erbjuder de grundläggande kunskaperna i Python som krävs för att följa resten av kursen.
2. Klassisk maskininläring. Denna modul introducerar grundläggande maskininlärningsalgoritmer för regression, klassificering, klusterbildning och dimensionalitetsreduktion. Vid sidan av algoritmiska diskussioner kommer vi att utforska datahantering, modellträning, kostnadsfunktioner, regularisering och modellutvärdering.
3. Neuronala nätverk. Denna modul fokuserar på grunderna i neurala nätverk, inklusive komponenter, aktiveringsfunktioner, träningsprocesser, nätverksdesign och regulariseringstekniker. Vanliga nätverksarkitekturer som feedforward-nätverk, faltningsnätverk och autokodare kommer att utforskas.
4. Avancerade ämnen Denna modul introducerar några mer avancerade ämnen, såsom transformatorer och grafiska neurala nätverk.
5. Materialinformatik Denna modul ger en introduktion till materialinformatik, inklusive hur man representerar och karakteriserar molekyler och material. Den ger också en introduktion till hur man får åtkomst till materialdatabaser.
6. Projektarbete I slutet av kursen tillämpar studenterna AI-metoder i ett materialvetenskapligt projekt. Studenterna väljer ett projektämne i samråd med kursläraren. Projektet presenteras i en skriftlig rapport och muntligt.

Examination

UPG1	Uppgift	4 hp	U, G
UPG2	Projekt	2 hp	U, G

Betygsskala

Tvågradig skala, U, G

Generella bestämmelser

Kursplan

För varje kurs ska en kursplan finnas. I kursplanen anges kursens mål och innehåll samt de särskilda förkunskaper som krävs för att den studerande skall kunna tillgodogöra sig undervisningen.

Schemaläggning

Schemaläggning av programkurser görs enligt beslutad blockindelning för respektive kurs. Fristående kurser kan schemaläggas på andra tider.

Avbrott och avanmälan på kurs

Enligt beslut vid Linköpings universitet skall avbrott i studier registreras i Ladok, se Riktlinjer och rutiner för bekräftelse av deltagande i utbildning med mera på grund- och avancerad nivå, Dnr LiU-2020-02256 (<https://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/764582>). Alla studenter som inte deltar i kurs man registrerat sig på är alltså skyldiga att anmäla avbrottet så att detta kan noteras i Ladok. Avanmälan eller avbrott från kurs görs via webbformulär [Blanketter och formulär](#)

Inställd kurs eller avvikelse från kursplanen

Kurser med få deltagare (< 10) kan ställas in eller organiseras på annat sätt än vad som är angivet i kursplanen. Om kurs skall ställas in eller avvikelse från kursplanen skall ske prövas och beslutas detta av dekan. För fristående kurser måste inställande av kurs ske innan studenter har antagits på kursen (i enlighet med LiUs antagningsordning Dnr LiU-2022-01200, <https://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/622645>).

Riktlinjer rörande examination och examinator

Se Beslut om Riktlinjer för utbildning och examination på grundnivå och avancerad nivå vid Linköpings universitet Dnr LiU-2023-00379, (<http://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/917592>).

Examinator för en kurs ska inneha en läraranställning vid LiU i enlighet med LiUs anställningsordning, Dnr LiU-2022-04445 (<https://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/622784>). För kurser på avancerad nivå kan följande lärare vara examinator: professor (även adjungerad och gästprofessor), biträdande professor (även adjungerad), universitetslektor (även adjungerad och gästlektor), biträdande universitetslektor eller postdoktor. För kurser på grundnivå kan följande lärare vara examinator: professor (även adjungerad och gästprofessor), biträdande professor (även adjungerad), universitetslektor (även adjungerad och gästlektor), biträdande universitetslektor, universitetsadjunkt (även adjungerad och gästadjunkt) eller

postdoktor. I undantagsfall kan även en Timlärare utses som examinator på både grund- och avancerad nivå, se Tekniska fakultetsstyrelsen vidaredelegationer.

Examination

Principer för tentamina

Skriftlig och muntlig tentamen samt digital salstentamen och datortentamen ges minst tre gånger per år; en gång omedelbart efter kursens slut, en gång i augustiperioden samt vanligtvis i en av omtentamensperioderna. Annan placering beslutas av programnämnden.

Principer för tentamensschemat för kurser som följer läsperioderna:

- kurser som ges Vt1 förstagångstenteras i mars och omtenteras i juni och i augusti
- kurser som ges Vt2 förstagångstenteras i maj och omtenteras i augusti och i januari
- kurser som ges Ht1 förstagångstenteras i oktober och omtenteras i januari och augusti
- kurser som ges Ht2 förstagångstenteras i januari och omtenteras i mars och i augusti

Tentamensschemat utgår från blockindelningen men avvikelser kan förekomma främst för kurser som samläses/samtenteras av flera program samt i lägre årskurs.

För kurser som ges vartannat år ges tentamina 3 gånger endast under det år kursen ges.

För kurser som flyttas eller ställs in så att de ej ges under något eller några år ges tentamina 3 gånger under det närmast följande året med tentamenstillfällen motsvarande dem som gällde före flyttningen och/eller inställandet av kursen.

När en kurs, eller ett tentamensmoment (TEN, DIT, DAT, MUN), ges för sista gången ska ordinarie tentamen och två omtentamina erbjudas. Därefter fasas examinationen ut under en avvecklingsperiod med tre tentamina samtidigt som tentamen ges i eventuell ersättningskurs under det följande läsåret. Undantaget är kurser som gavs i perioden HT1, där de tre examinationstillfällena blir januari, mars och augusti. Om ingen ersättningskurs finns ges tre tentamina i omtentamensperioder under det följande läsåret. Annan placering beslutas av programnämnden. I samtliga fall ges dessutom tentamen ytterligare en gång under det därpå följande året om inte programnämnden föreskriver annat. Totalt erbjuds alltså 6 omtentamenstillfällen, varav 2 ordinarie omtentamenstillfällen. I tentaansmälningssystemet markeras tentamina som ges för näst sista respektive sista gången.

Om en kurs ges i flera perioder under året (för program eller vid skilda tillfällen för olika program) beslutar programnämnden/programnämnderna gemensamt om placeringen av och antalet omtentamina.

För fristående kurser med tentamensmoment som inte följer blockplacering kan

andra tider förekomma.

Omprov övriga examinerande moment

För riktlinjer för omprov vid andra examinerande moment än skriftliga tentamina, digital salstentamina och datortentamina hänvisas till de generella LiU-riktlinjerna för examination och examinator, Dnr LiU-2023-00379 (<http://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/917592>).

Även andra examinationsmoment ska principmässigt hanteras på samma sätt som ett tentamensmoment när de ges för sista gången. Dock kan tidpunkterna för examinationen variera utifrån momentets karaktär jämfört med tentamenstiderna.

Nedlagd kurs

För Beslut om Rutiner för administration vid avveckling av utbildningsprogram, fristående kurser och kurser inom program, se Dnr LiU-2021-04782 (<https://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/1156410>). Efter beslut om nedläggning och efter avvecklingsperiodens slut hänvisas studenterna till ersättande kurs (eller motsvarande) enligt information i kursplan eller utbildningsplan. Om en student har godkänt i något/några delmoment (men inte alla) i en avvecklad programkurs och det finns en åtminstone delvis ersättande kurs så kan en bedömning om eventuellt tillgodoräknande ske. Vid eventuella frågor om tillgodoräkning av del av kurs kontakta studievägledare.

Anmälan till tentamen

För deltagande i skriftlig tentamen, digital salstentamen och datortentamen är anmälan obligatorisk, se beslut i regelsamlingen Dnr LiU-2020-04559 (<https://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/622682>). En oanmäld student kan således *inte* erbjudas plats. Anmälan till tentamen är öppen 30 kalenderdagar före provdatum och stänger 10 kalenderdagar innan provdatum om inget annat anges. Anmälan görs av studenten i Studentportalen eller via LiU-appen. Anvisad sal meddelas fyra dagar före tentamensdagen via e-post.

Ordningsföreskrifter för studerande vid tentamensskrivningar

Se särskilt beslut i regelsamlingen, Dnr LiU-2020-04559 (<http://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/622682>).

Plussning

Vid Tekniska fakulteten vid LiU har studerande rätt att genomgå förnyad examination (s.k. plussning) för högre betyg på skriftliga tentamina, digital salstentamina och datortentamina, dvs samtliga provmoment med modulkod TEN, DIT och DAT. På övriga examinationsmoment ges inte möjlighet till plussning, om inget annat anges i kursplan.

Plussning är ej möjlig på kurser som ingår i utfärdad examen.

Betyg och examinationsformer

Företrädesvis skall betygen underkänd (U), godkänd (3), icke utan beröm godkänd (4) och med beröm godkänd (5) användas.

- Kurser med skriftlig tentamen och digital salstentamen skall ge betygen (U, 3, 4, 5).
- Kurser med stor del tillämpningsinriktade moment såsom laborationer, projekt eller grupparbeten får ges betygen underkänd (U) eller godkänd (G).
- Examensarbete samt självständigt arbete ger betyg underkänd (U) eller godkänd (G).

Examinationsmoment och modulkoder

Nedan anges vad som gäller för de examinationsmoment med tillhörande modulkod som tillämpas vid Tekniska fakulteten vid Linköpings universitet.

- Skriftlig tentamen (TEN) och digital salstentamen (DIT) skall ge betyg (U, 3, 4, 5).
- Examinationsmoment som kan ge betygen underkänd (U) eller godkänd (G) är laboration (LAB), projekt (PRA), kontrollskrivning (KTR), digital kontrollskrivning (DIK), muntlig tentamen (MUN), datortentamen i datorsal (DAT), uppgift (UPG), hemtentamen (HEM), digital kontrollskrivning i datorsal (DAK).
- Övriga examinationsmoment där examinationen uppfylls framför allt genom aktivt deltagande som basgrupp (BAS) eller moment (MOM) ger betygen underkänd (U) eller godkänd (G).
- Examinationsmomenten Opposition (OPPO) och Auskultation (AUSK) inom examensarbetet ger betyg underkänd (U) eller godkänd (G).

Allmänt gäller att:

- Obligatoriska kursmoment skall vara poängsatta och ges en modulkod.
- Examinationsmoment som ej är poängsatt får ej vara obligatoriskt. Det är frivilligt att delta på dessa moment och information om det samt tillhörande villkor skall tydligt framgå i den beskrivande texten.
- För kurser med flera examinationsmoment med graderad betygsskala skall det anges hur slutbetyg på kursen vägs samman.

För obligatoriska moment gäller att (i enlighet med Riktlinjer för utbildning och examination på grundnivå och avancerad nivå vid Linköpings universitet, Dnr LiU-2023-00379 <http://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/917592>):

- Om det finns särskilda skäl, och om det med hänsyn till det obligatoriska momentets karaktär är möjligt, får examinator besluta att ersätta det obligatoriska momentet med en annan likvärdig uppgift.

För möjlighet till anpassade examinationsmoment gäller att (i enlighet med Riktlinjer för utbildning och examination på grundnivå och avancerad nivå vid Linköpings universitet, Dnr LiU-2023-00379 <http://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/917592>):

- Om LiU: s koordinator för studenter med funktionsnedsättning har

beviljat en student rätt till anpassad examination vid salstentamen har studenten rätt till det.

- Om koordinatören har gett studenten en rekommendation om anpassad examination eller alternativ examinationsform, får examinator besluta om detta om examinator bedömer det möjligt utifrån kursens mål.
- Examinator får också besluta om anpassad examination eller alternativ examinationsform om examinator bedömer att det finns synnerliga skäl och examinator bedömer det möjligt utifrån kursens mål.

Rapportering av examinationsresultat

Rapportering av den studerandes examinationsresultat sker på respektive institution.

Plagiering

Vid examination som innebär rapportskrivande och där studenten kan antas ha tillgång till andras källor (exempelvis vid självständiga arbeten, uppsatser etc) måste inlämnat material utformas i enlighet med god sed för källhänvisning vad gäller användning av andras text, bilder, idéer, data etc. Detta sker genom referenser eller citat med angivande av källa. Det ska även framgå ifall författaren återbrukat egen text, bilder, idéer, data etc från tidigare genomförd examination, exempelvis från kandidatarbete, projektrapporter etc. (ibland kallat självplagiering).

Underlåtelse att ange sådana källor kan betraktas som försök till vilseledande vid examination.

Försök till vilseledande

Vid grundad misstanke om att en student försökt vilseleda vid examination eller när en studieprestation ska bedömas ska enligt Högskoleförordningens 10 kapitel examinator anmäla det vidare till universitetets disciplinnämnd. Möjliga konsekvenser för den studerande är en avstängning från studierna eller en varning. För mer information se [Fusk och plagiat](#).

Linköpings universitet har även tagit fram en vägledning för lärares och studenters användning av generativ AI i utbildningen (Dnr LiU-2023-02660). Som student förväntas du alltid ta reda på vad som gäller för respektive kurs (inklusive examensarbetet). Generellt gäller tydlighet för var och hur generativ AI har använts.

Regler

Universitetet är en statlig myndighet vars verksamhet regleras av lagar och förordningar, exempelvis Högskolelagen och Högskoleförordningen. Förutom lagar och förordningar styrs verksamheten av ett antal styrdokument. I Linköpings universitets egna regelverk samlas gällande beslut av regelkaraktär som fattats av universitetsstyrelse, rektor samt fakultets- och områdesstyrelser.

LiU:s regelsamling angående utbildning på grund- och avancerad nivå nås på <https://styrdokument.liu.se/Regelsamling/Innehall>.

