

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Sztuczna inteligencja w nauce o materiałach i w nanotechnologii, PG_00070928						
Kierunek studiów	Nanotechnologia						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2027 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2027/2028		
Poziom kształcenia	II stopnia		Grupa zajęć		Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki		
Forma studiów	stacjonarne		Sposób realizacji		na uczelni		
Rok studiów	1		Język wykładowy		polski		
Semestr studiów	2		Liczba punktów ECTS		1.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki		Forma zaliczenia		zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Wydziały Politechniki Gdańskiej -> Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej -> Instytut Fizyki i Informatyki Stosowanej -> Zakład Fizyki Teoretycznej i Informatyki Kwantowej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		dr inż. Paweł Syty				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu		dr inż. Paweł Syty				
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	15.0	0.0	0.0	0.0	0.0	15
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów		Udział w konsultacjach		Praca własna studenta	RAZEM
	Liczba godzin pracy studenta	15		1.0		9.0	25
Cel przedmiotu	Celem przedmiotu jest pogłębienie wiedzy studentów w zakresie zaawansowanych metod sztucznej inteligencji stosowanych w nauce o materiałach i nanotechnologii, ze szczególnym uwzględnieniem integracji modeli uczenia maszynowego z wiedzą fizyczną i chemiczną. Przedmiot ma na celu rozwinięcie umiejętności krytycznej analizy możliwości i ograniczeń metod AI w modelowaniu, analizie i projektowaniu materiałów oraz nanostruktur. Studenci uzyskają kompetencje niezbędne do świadomego wykorzystania narzędzi AI w badaniach naukowych i pracach rozwojowych w obszarze nanotechnologii.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[K7_U06] potrafi zastosować zdobytą wiedzę specjalistyczną z zagadnień z obszaru innych nauk ścisłych, nauk przyrodniczych lub technicznych oraz dokonać krytycznej analizy i oceny sposobu funkcjonowania przyjętych rozwiązań	Student potrafi wykorzystać metody sztucznej inteligencji i uczenia maszynowego do analizy, modelowania oraz projektowania materiałów i nanostruktur, integrując wiedzę z zakresu fizyki, chemii i inżynierii materiałowej, a także dokonuje krytycznej oceny poprawności, wiarygodności i ograniczeń uzyskanych modeli oraz wyników predykcyjnych.	[SU1] Ocena realizacji zadania [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu
	[K7_W05] posiada pogłębioną znajomość metod matematycznych, numerycznych i symulacyjnych, klasycznych i kwantowych, stosowanych przy modelowaniu nanostruktur	Student posiada pogłębioną znajomość matematycznych i numerycznych podstaw metod uczenia maszynowego oraz wie jak zastosować je w symulacyjnym i wieloskalowym modelowaniu właściwości materiałów i nanostruktur, w tym w podejściach klasycznych i kwantowych.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej
	[K7_W01] posiada poszerzoną i uporządkowaną wiedzę w zakresie nauki o materiałach, ich wytwarzania lub kontroli procesów towarzyszących wytwarzaniu ze szczególnym uwzględnieniem materiałów i struktur w skali nano	Student rozumie możliwości zastosowania sztucznej inteligencji w badaniach materiałowych i nanotechnologii, w szczególności w: odkrywaniu nowych materiałów, analizie danych eksperymentalnych i symulacyjnych, optymalizacji procesów syntezy i wytwarzania, predykcji struktury, właściwości i stabilności nanostruktur oraz potrafi dobrać odpowiednie narzędzia AI do konkretnego problemu inżynierskiego lub badawczego.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej

Treści przedmiotu	Treści przedmiotu - wykład 1. Rola sztucznej inteligencji (AI) we współczesnej nauce o materiałach - AI jako czwarty paradygmat nauki po teorii, eksperymencie i symulacji - Specyfika problemów materiałowych i nanotechnologicznych - Przegląd aktualnych trendów 2. Reprezentacja materiałów i nanostruktur w modelach ML - Deskrytory materiałowe - Reprezentacje atomistyczne - Wyzwania specyficzne dla nanoskali 3. Głębokie uczenie w nauce o materiałach - Sieci neuronowe dla danych materiałowych - Modele sekwencyjne i attention w analizie struktur - Transfer learning w problemach materiałowych - Ograniczenia w kontekście małych zbiorów danych 4. Uczenie oparte na fizyce (Physics-Informed Machine Learning) - Integracja praw fizyki z modelami ML - Modele hybrydowe - Rola interpretowalności i zgodności fizycznej 5. Modelowanie właściwości materiałów i nanostruktur - Predykcja właściwości - Wielozadaniowe uczenie - Niepewność predykcji i propagacja błędów - Modele probabilistyczne i Bayesian ML 6. Projektowanie materiałów i nanostruktur z użyciem AI - Problem odwrotny - Algorytmy generatywne - Optymalizacja materiałów - Eksploracja przestrzeni projektowej 7. Analiza danych eksperymentalnych - AI w analizie danych z mikroskopii (SEM, TEM, AFM) i spektroskopii - Segmentacja, denoising, super-resolution - Automatyzacja interpretacji eksperymentów - Active learning w planowaniu eksperymentów 8. Integracja AI z symulacjami numerycznymi - Przyspieszanie symulacji - Uczenie potencjałów międzyatomowych - Redukcja kosztu obliczeń wielkoskalowych - Coupling MLMDDFT 9. Interpretowalność, wiarygodność i etyka AI w naukach inżynierskich - Explainable AI (XAI) - Walidacja modeli w kontekście fizycznym - Reprodukowalność badań opartych na AI - Ryzyka black-box models 10. Przyszłe kierunki rozwoju - Autonomiczne laboratoria - AI jako narzędzie współpracy człowiekalgorytm - Kompetencje przyszłego inżyniera nanotechnologii		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Znajomość podstawowych metod sztucznej inteligencji i uczenia maszynowego.		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	Zaliczenie ustne	50.0%	70.0%
	Ocena zadania domowego (pisemnego)	50.0%	30.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	- Mieczysław Muraszkiewicz (red.), Robert Nowak (red.), Sztuczna inteligencja dla inżynierów. Metody ogólne, Oficyna Wydawnicza Politechniki Warszawskiej, 2022 - Chip Huyen, Jak projektować systemy uczenia maszynowego. Iteracyjne tworzenie aplikacji gotowych do pracy, Helion, 2023	
	Uzupełniająca lista lektur	- Tongyi Zhang, An Introduction to Materials Informatics: The Elements of Machine Learning, Springer, 2024 - Olexandr Isayev, Alexander Tropsha, Stefano Curtarolo, Materials Informatics: Methods, Tools, and Applications, Wiley VCH, 2019	
	Adresy eZasobów		

Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	- Wyjaśnij, na czym polega specyfika zastosowań sztucznej inteligencji w nauce o materiałach i nanotechnologii w porównaniu z klasycznymi problemami uczenia maszynowego. - Omów znaczenie reprezentacji danych materiałowych w modelach AI. Jak wybór deskryptorów wpływa na zdolność modelu do uogólniania wyników? - Porównaj klasyczne metody uczenia maszynowego i metody głębokiego uczenia w kontekście modelowania właściwości materiałów. W jakich sytuacjach każda z nich jest bardziej uzasadniona? - Na czym polega podejście physics-informed machine learning? Podaj przykłady korzyści i potencjalnych ograniczeń tego podejścia w nanotechnologii. - Wyjaśnij problem odwrotny (inverse design) w projektowaniu materiałów. Jakie klasy algorytmów AI są najczęściej wykorzystywane do jego rozwiązania?
Zajęcia praktyczne w ramach przedmiotu	(Zadanie dodatkowe dla chętnych, związane np. z przygotowywaną pracą dyplomową). Zaproponowanie odpowiedniego modelu dla wybranych danych pochodzących z rzeczywistego doświadczenia lub symulacji, np. przeprowadzonych w laboratorium Nanotechnologii (zebranych w ramach pracy dyplomowej, projektu badawczego lub innego kursu).

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.