

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	AI in modelling and simulations of materials and nanomaterials, PG_00071218						
Kierunek studiów	Nanotechnologia, Nanotechnologia (studia w jęz. angielskim)						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2027 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2027/2028		
Poziom kształcenia	II stopnia		Grupa zajęć		Grupa zajęć specjalnościowych 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		angielski		
Semestr studiów	2		Liczba punktów ECTS		2.0		
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						
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	0.0	0.0	0.0	26.0	4.0	30
	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	30		2.0		18.0	50
Cel przedmiotu	Celem części projektowej jest rozwinięcie praktycznych umiejętności samodzielnego i zespołowego rozwiązywania problemów badawczych z zakresu nauki o materiałach i nanotechnologii z wykorzystaniem zaawansowanych metod sztucznej inteligencji. Studenci nauczą się projektować, implementować i weryfikować modele AI na rzeczywistych danych materiałowych oraz interpretować uzyskane wyniki w kontekście fizycznym. Zajęcia przygotowują do prowadzenia badań naukowych oraz pracy w zespołach R&D, w których AI stanowi integralne narzędzie analizy i projektowania materiałów. Celem seminarium jest rozwinięcie praktycznych umiejętności prezentacji wyników swojej pracy i ich dyskusji.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[K7_W05] posiada pogłębioną znajomość metod matematycznych, numerycznych i symulacyjnych, klasycznych i kwantowych, stosowanych przy modelowaniu nanostruktur	Student posiada pogłębioną znajomość metod sztucznej inteligencji, uczenia maszynowego i analizy danych stosowanych w modelowaniu i symulacjach materiałów oraz nanomateriałów, w tym metod integrujących podejścia klasyczne i kwantowe, oraz rozumie ich matematyczne i numeryczne podstawy w kontekście problemów fizycznych i materiałowych.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej [SW2] Ocena wiedzy zawartej w prezentacji
	[K7_K01] potrafi współdziałać i pracować w grupie, przyjmując w niej różne role w zależności od zmieniających się potrzeb. Przestrzega zasad etyki zawodowej i wykazuje się kreatywnością i przedsiębiorczością. Potrafi dokonywać samooceny oraz konstruktywnej oceny efektów pracy innych osób	Student potrafi efektywnie współpracować w zespole projektowym przy realizacji zadań badawczych z wykorzystaniem metod AI w nauce o materiałach i nanotechnologii, przyjmując różne role organizacyjne i merytoryczne, przestrzegając zasad etyki badań naukowych i odpowiedzialnego wykorzystania AI, wykazując kreatywność, inicjatywę oraz zdolność do samooceny i konstruktywnej oceny pracy innych, a także prezentowania i dyskusowania wyników własnych badań.	[SK1] Ocena umiejętności pracy w grupie [SK4] Ocena umiejętności komunikacji, w tym poprawności językowej
	[K7_U05] potrafi planować i przeprowadzać obliczenia teoretyczne, numeryczne i symulacje zjawisk i procesów, krytycznie analizować ich wyniki, wyciągać wnioski i formułować umotywowane opinie z nanotechnologii oraz pokrewnych nauk ścisłych i przyrodniczych	Student potrafi zaplanować, zaimplementować i przeprowadzić obliczenia oraz symulacje z wykorzystaniem narzędzi sztucznej inteligencji na rzeczywistych danych materiałowych, dokonać krytycznej analizy i walidacji uzyskanych wyników w świetle praw fizyki i chemii, wyciągać uzasadnione wnioski oraz formułować merytoryczne opinie dotyczące zjawisk i procesów w nanotechnologii.	[SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU1] Ocena realizacji zadania

Treści przedmiotu	Treści przedmiotu - projekt Założenia ogólne - Forma: projekt zespołowy (23 osoby) lub indywidualny - Charakter: badawczo-projektowy - Narzędzia: Python, biblioteki ML/DL, narzędzia do analizy danych materiałowych - Dane: rzeczywiste lub półsyntetyczne z obszaru nauki o materiałach / nanotechnologii - Efekt końcowy: - działający model ML/AI - raport techniczno-badawczy - prezentacja wyników Etapy realizacji projektu 1. Definicja problemu badawczego - wybór problemu z zakresu: - predykcji właściwości materiałów/nanostruktur - analizy danych eksperymentalnych - projektowania materiałów - określenie: - zmiennych wejściowych i wyjściowych - znaczenia fizycznego problemu - identyfikacja ograniczeń danych i modelu 2. Reprezentacja danych materiałowych - wybór i implementacja deskryptorów - preprocessing danych 3. Budowa i trenowanie modelu ML/DL - implementacja i porównanie co najmniej dwóch podejść: - klasyczny ML (np. Random Forest, Gradient Boosting) - model głębokiego uczenia (np. GNN, CNN) - dobór architektury i hiperparametrów - walidacja 4. Integracja wiedzy fizycznej - wprowadzenie ograniczeń fizycznych: - filtracja danych - modyfikacja funkcji straty - interpretacja wyników pod kątem fizycznym - analiza zgodności predykcji z oczekiwaniami fizycznymi 5. Analiza niepewności i interpretowalność - estymacja niepewności predykcji - interpretacja modelu - krytyczna ocena wiarygodności wyników 6. Projektowanie i optymalizacja materiału / nanostruktury - zastosowanie: - optymalizacji bayesowskiej - algorytmów generatywnych - poszukiwanie struktur o zadanych właściwościach - analiza kompromisów projektowych 7. Integracja z danymi eksperymentalnymi i/lub symulacyjnymi - analiza danych: - mikroskopowych - spektroskopowych - symulacyjnych - budowa modelu zastępczego - przyspieszanie obliczeń lub analizy 8. Dokumentacja wyników - raport techniczny zawierający: - opis problemu - metodologię - analizę wyników - ograniczenia i perspektywy Treści przedmiotu - seminarium Prezentacja ustna wyników projektu wytworzonego w ramach części projektowej. Czas trwania prezentacji pojedynczego projektu około 15-20 minut (z dyskusją).		
	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
	Ocena postępów w realizacji projektu	50.0%	30.0%
	Ocena jakości zrealizowanego projektu, w tym dokumentacji projektowej	50.0%	50.0%
	Ocena przedstawienia projektu w ramach seminarium	50.0%	20.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	- Kritesh Kumar Gupta, Sudip Dey, Tanmoy Mukhopadhyay, Machine Learning in Nanoscale Materials Design, Springer, 2025 - Kunal Roy, Arkaprava Banerjee, Materials Informatics II, Springer, 2025	
	Uzupełniająca lista lektur	- Yuling An, Machine Learning in Materials Informatics: Methods and Applications, American Chemical Society, 2022 - Yuan Cheng, Tian Wang, Gang Zhang, Artificial Intelligence for Materials Science, Springer, 2021	
	Adresy eZasobów		

Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	- Predykcja właściwości mechanicznych nanokompozytów - Analiza obrazów TEM i SEM z użyciem CNN - Projektowanie nanostruktur o zadanej przerwie energetycznej - Surrogate modeling dla symulacji DFT - Active learning w planowaniu eksperymentów materiałowych
Zajęcia praktyczne w ramach przedmiotu	Nie dotyczy

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.