

Maskininlärning för atomistiska simuleringar, 3.0 hp

Machine learning for atomistic simulations, 3.0 credits

Forskarutbildningskurs

6FIFMB6

Institutionen för fysik, kemi och biologi

Gäller från: Första halvår 2026

Fastställd av

Fastställandedatum

Diarienummer

Behörighetskrav

Grundläggande behörighet till kurser på forskarutbildningsnivå har den som har

- avlagt en examen på avancerad nivå,
- fullgjort kursfordringar om minst 240 högskolepoäng (hp), varav minst 60 hp på avancerad nivå,
- eller på något annat sätt förvärvat motsvarande kunskaper.

Särskild information

Kursen riktar sig till alla studenter som är direkt involverade i atomistiska simuleringar, men också till studenter inom materialvetenskap, datavetenskap eller till och med visualisering som (kanske genom samarbeten) är intresserade av ML/AI tillämpat på atomistiska simuleringar. Förkunskapskraven för kursen är endast grundläggande kunskaper i matematik och Python. Därför är den en perfekt introduktion för studenter som vill starta egna projekt eller bättre förstå hur de kan stärka sina samarbeten.

Kursinnehåll

Kursen kommer att ge en introduktion till grunderna och tillämpningarna av maskininläring inom atomistiska simuleringar, med särskilt fokus på maskininlärningsbaserade interatomära potentialer (MLIP). Den behandlar de vanligaste deskriptorerna, de underliggande matematiska formuleringarna för de mest relevanta modellerna och arkitekturerna, samt introducerar nyligen utvecklade strategier för generering av träningsdata och modellträning. Kursen avslutas med en översikt över moderna förtränade grundmodeller för MLIP, inklusive både "out-of-the-box"-användning och systemspecifika metoder för transfer learning/finjustering. Vi kommer särskilt att fokusera på MACE-arkitekturen i två laborationer där studenterna får lära sig hur man genererar data, effektivt väljer träningsdata samt tränar och tillämpar maskininlärd interatomära potentialer.

Undervisnings- och arbetsformer

Cirka 6 föreläsningar och 2 laborationer.

Föreläsningarna kommer att omfatta:

- Grunder och historik för deskriptorer för atomistiska system
- Generering av träningsdata och databaser; grundmodeller Moderna MLIP-arkitekturer och deras relationer: BP, GAP, ACE, MACE, Nequip m.fl.
- Översikt: förtränade MLIP:er, koordinatfria modeller, generativa modeller, arbetsflöden och begränsningar

Laborationer:

- (1) Generering och urval av träningsdata, träning av potentialer samt utvärdering av fel
- (2) Molekyldynamik och mekaniska egenskaper med MLIP:er

Examination

Deltagande i laborationer samt laborationsrapport

Betygsskala

Tvågradig skala

Kurslitteratur

En lista med rekommenderad litteratur kommer att tillhandahållas av kursansvarig före kursstart

Övrig information

Planering och genomförande av kursen skall utgå från kursplanens formuleringar. Kursvärdering samt analys och förslag som rör generell utveckling och förbättring av kursen återkopplas till Forsknings- och forskarutbildningsnämnden av kursansvarig lärare.

Lärare:

Föreläsare: Florian Trybel & Johan Klarbring

Laborationsansvarig: Abhijith S. Parackal