

Teori och modellering inom naturvetenskap

/Theory and Modelling in Natural Sciences/

Bestämmelser gemensamma för all forskarutbildning vid Tekniska högskolan, LiU, finns i fakultetens studiehandbok för utbildning på forskarnivå. Vissa övergripande bestämmelser finns även i LiUs lokala regelverk samt i högskolelagen och högskoleförordningen.

Forskarutbildningsämnet Teori och modellering inom naturvetenskap omfattar fyra ämnesområden:

- **Teoretisk fysik**/Theoretical Physics/SCB koder: 10304, 10302, 10399/
- **Beräkningskemi**/ Computational Chemistry/SCB kod: 10407/
- **Teoretisk biologi**/Theoretical Biology/SCB kod: 10611, 10699/
- **Bioinformatik** /Bioinformatics/SCB kod: 10203/

Ämnesbeskrivning

Forskningen som bedrivs inom forskarutbildningsämnet Teori och modellering inom naturvetenskap har en bred naturvetenskaplig profil och delar en gemensam kärna av matematisk modellering, numeriska metoder och datorsimulering.

Forskningen kan i huvudsak indelas i fyra huvudmoment, nämligen modellering, metodutveckling, simulering och analys. En modell utarbetas för att beskriva den komplexa verkligheten på ett praktiskt hanterbart sätt utan att förlora nödvändig flexibilitet. Modellen innefattar ett antal grundläggande ekvationer vars lösningar är kopplade till systemets egenskaper. För att kunna lösa ekvationerna krävs ofta en utveckling av nya metoder som kan implementeras i datorprogram och simuleras på datorer. En analys av resultaten visar om ny och användbar kunskap kan extraheras från modellen eller om den eventuellt måste omarbetas. Angreppssättet är generellt applicerbart i teoretiskt forsknings- och utvecklingsarbete och det är vår ambition att forskarutbildningen skall ge en god grund för fortsatt FoU-arbete i såväl akademi som näringsliv.

Behörighet och urval

Den grundläggande behörigheten samt allmänna principer för urval anges i fakultetens *Studiehandbok för utbildning på forskarnivå*.

Särskild behörighet

Behörig att antas till forskarutbildning i Teori och modellering inom naturvetenskap är den som har fullgjort kursfordringar om minst 60 högskolepoäng på avancerad nivå inom ämnesområdena: teoretisk fysik, teoretisk biologi, beräkningskemi eller bioinformatik. Den sökande skall ha genomfört ett större arbete (examensarbete) med en omfattning om minst 30 högskolepoäng inom ett ämnesområdena relevant för forskarutbildningsämnet: teoretisk fysik, teoretisk biologi, beräkningskemi eller bioinformatik.

- Den särskilda behörigheten för teoretisk fysik innefattar därutöver att kurser på grundutbildningsnivå har examinerats i ämnena kvantmekanik, statistisk och termisk fysik, elektrodynamik och fasta tillståndets fysik. Undantag för regeln om särskild behörighet får göras om synnerliga skäl föreligger. Undantag från regeln beslutas i samråd mellan huvudhandledare och forskarstudierektor.

Examen

Utbildning på forskarnivå i Teori och modellering inom naturvetenskap leder till en doktorsexamen eller licentiatexamen. Den senare kan också utgöra en etapp i forskarutbildningen.

Licentiatexamen omfattar 120 hp varav kurser motsvarar studier om 30 hp för ämnesområdena teoretisk biologi, beräkningskemi och bioinformatik samt 45 hp för teoretisk fysik. Avhandlingsarbetet motsvarar studier om 90 hp för teoretisk biologi, beräkningskemi och bioinformatik samt 75 hp för teoretisk fysik.

Doktorsexamen omfattar 240 hp varav kurser motsvarar studier om 60 hp för teoretisk biologi, beräkningskemi och bioinformatik samt 90 hp för teoretisk fysik. Avhandlingsarbetet motsvarar studier om 180 hp för teoretisk biologi, beräkningskemi och bioinformatik samt 150 hp för teoretisk fysik.

Utbildningens mål och genomförande

Gemensamma mål och syften med utbildning på forskarnivå anges i inledningen av fakultetens *Studiehandbok för utbildning på forskarnivå*, samt i högskoleförordningens examensordning (återgiven i bilaga till Studiehandboken).

Utbildning i forskarutbildningsämnet Teori och modellering inom naturvetenskap ger doktoranden förutsättningar att uppfylla samtliga examensmål. Utbildningen skall ge doktoranden en bred kunskap och förståelse inom sitt forskningsområde.

Utbildningen ger doktoranden bred och djup kunskap och förståelse inom forskarutbildningsämnet genom ett urval av följande moment: doktoranden följer grundläggande och övergripande kurser samt fördjupningskurser inom sitt forskningsområde i sin forskningsinriktning, deltar i undervisningen av grundutbildningskurser, arbetar med forskningsprojekt, deltar i de mångvetenskapliga forskarskolornas verksamhet, samt förbereder och genomför presentationer av sin forskning vid nationella och internationella konferenser.

Mer specifikt så ger utbildningen doktoranden djup kunskap och förståelse inom forskarutbildningsämnet genom att doktoranden deltar i kärnämneskurser. Exempel på allmänna kärnämneskurser inom Teori och modellering är kurser inom matematisk modellering, statistik, vetenskaplig programmering, olika programmeringsspråk, visualisering och databashantering. Exempel på specifika kärnämneskurser inom

- inriktningen mot teoretisk fysik är kurser i fasta tillståndets fysik, statistisk och termisk fysik, och kvantmekanik
- inriktningen mot beräkningskemi är kurser i beräkningskemi/teoretisk kemi och statistisk termodynamik
- inriktningen mot teoretisk biologi är kurser i teoretisk ekologi, evolution och matematisk modellering av biologiska system
- inriktningen mot bioinformatik är kurser i biofysik, molekylfysik, biokemi, molekylärbiologi, genetik, proteinkemi, struktur och dynamik i komplexa biologiska system, bioinformatiska metoder, och maskininlärningsmetoder

Doktoranden utvecklar förtrogenhet med vetenskaplig metodik genom egen forskning och genom att genomgå en obligatorisk kurs i forskningsmetodik.

Doktoranden i forskarutbildningsämnet Teori och modellering inom naturvetenskap förvärvar färdigheter och förmågor genom att

- granska och modellera olika system relevanta för forskningsinriktningen.
- självständigt planera och genomföra teoretiskt forskningsarbete.
- visa förmåga att genom egen forskning bidra till kunskapsutvecklingen inom teori och modellering.
- delta i forskargruppens möten eller seminarieverksamhet. I detta ingår att minst en gång per år redovisa uppnådda resultat och presentera planer för det fortsatta avhandlingsarbetet.
- delta i konferenser och presentera sin egen forskning. Detta uppövar förmågan att presentera sitt arbete inför kollegor och utstå kritisk granskning.
- delta i så kallade icke-kärnämneskurser inom t.ex. presentationsteknik, ledarskap, management, entreprenörskap, mediaträning, metodik/etik, och/eller pedagogik.
- delta i popularisering av vetenskap.

Ovanstående ger doktoranden goda förutsättningar för att såväl inom forskning och utbildning som i andra kvalificerade professionella sammanhang bidra till samhällets utveckling och stödja andras lärande inom den valda inriktningen av området Teori och modellering.

Värderingsförmågor och förhållningssätt utvecklas inom forskarutbildningsämnet Teori och modellering inom naturvetenskap t.ex. genom att doktoranden:

- skapar intellektuell självständighet och vetenskaplig redlighet att bedriva egen forskning inom Teori och modellering inom naturvetenskap
- följer en obligatorisk kurs i forskningsetik
- deltar i forskargruppens seminarieverksamhet eller gruppmöten
- ingår i interna och/eller externa forskningssamarbeten
- tränar sig i att kritiskt och konstruktivt granska andras resultat och artiklar, och samtidigt tränar sig i att ta till sig kritisk och konstruktiv kritik.

Doktoranden inom forskarutbildningsämnet Teori och modellering inom naturvetenskap visar intellektuell självständighet genom att självständigt driva forskningsprojekt och presentera uppnådda resultat i olika interna och externa sammanhang samt genom att skriva en avhandling. Doktoranden utvecklar sin muntliga och skriftliga kommunikation samt sitt kritiska tänkande genom att regelbundet (minst en gång per år) redovisa i seminarier serie hittills uppnådda resultat och planering för det fortsatta avhandlingsarbetet.

Avhandling

Övergripande regler kring utformning, framläggning och betygssättning av avhandlingar återfinns i fakultetens *Studiehandbok för utbildning på forskarnivå*.

a) Doktorsavhandling

Omfattningen av den vetenskapliga undersökningen skall motsvara minst tre års (2.5 år för inriktning mot teoretisk fysik) forskningsarbete på heltid. Resultatet av undersökningen framläggs i en

doktorsavhandling, vilken kan utformas antingen som ett sammanhängande verk eller som en sammanläggning av vetenskapliga uppsatser.

Avhandlingen skall kvalitetsmässigt ligga på en sådan nivå att den i sin helhet bedöms uppfylla rimligt ställda krav för att antas till publicering i vetenskapliga tidskrifter av god kvalitet.

I en sammanläggningsavhandling bör en större del av de ingående arbetena vara publicerade eller accepterade för publicering.

b) Licentiatavhandling

Omfattningen av avhandlingsarbetet skall motsvara minst 1,5 års (1,25 år för inriktningen mot teoretisk fysik) heltidsarbete. Avhandlingen kan bestå av en eller flera vetenskapliga uppsatser och/eller en på vetenskaplig grund utarbetad utredningsrapport.

För båda typer av avhandlingar gäller att de kan utformas som ett lagarbete, men den studerandes andel skall innebära en självständig insats och särskilt redovisas i avhandlingens inledning.

Individuell studieplan

För varje doktorand ska en individuell studieplan upprättas. Den närmare planeringen av kurser och andra moment görs i samråd med handledaren och dokumenteras i den individuella studieplanen (se Studiehandbok för utbildning på forskarnivå, avsnitt 5.3). Studieplanen upprättas senast en månad efter antagningen och revideras minst en gång per år.

Handledning

Allmänna bestämmelser för handledning finns i *Studiehandbok för utbildning på forskarnivå*, Kapitel 4 och i Policy för handledning inom forskarutbildning vid LiTH.

För varje doktorand utses i början av studierna en huvudhandledare. Därutöver ska en eller flera biträdande handledare utses. Handledarnas roll är att vägleda den studerande under studietiden bland annat när det gäller val av kurser samt val av forskningsuppgift. Den studerande och handledarna ska ha regelbundna möten för att diskutera och samråda om forskningsarbetets fortskridande.

Kurser

För kursverksamheten i Teori och modellering inom naturvetenskap indelas kurser såsom kurser inom allmänna kärnämnen, specifika kärnämnen, samt icke-kärnämnen.

Fakultetsgemensamma kurskrav

Vetenskapsteori, metodik och etik

Samtliga doktorander antagna från och med 1 januari 2010 ska för att få examen ha genomgått av fakulteten beslutade obligatoriska kurser i metodik och etik eller bedömts ha motsvarande kompetens.

Pedagogisk utbildning

Alla doktorander som undervisar ska genomgå en grundläggande pedagogisk kurs. Minst 3 högskolepoäng från denna kurs ska ingå i utbildningen på forskarnivå och eventuella resterande poäng ska räknas som institutionstjänstgöring (se Studiehandbok för utbildning på forskarnivå, avsnitt 5.5).

Allmänna kärnämnen

Allmänna kärnämnen är matematisk och fysikalisk modellering, statistik, vetenskaplig programmering/datormodellering, storskalig datahantering, maskinlärning.

Övriga obligatoriska moment

I forskarutbildningen ingår obligatoriska moment rörande presentation av egen forskning. Dessa moment får tillgodoräknas som forskarutbildningskurser med 2 hp för licentiatexamen och totalt 5 hp för doktorexamen. De obligatoriska momenten lyder:

- Licentiatutbildning skall inkludera deltagande och presentation av egen forskning vid minst ett nationellt eller internationellt vetenskapligt möte. Detta moment får tillgodoräknas som forskarutbildningskurs med 2 hp.
- Doktorsutbildning skall inkludera deltagande och presentation av egen forskning vid minst ett större internationellt vetenskapligt möte samt muntlig presentation av egen forskning vid minst ett nationellt eller internationellt vetenskapligt möte. Dessa moment får tillgodoräknas som forskarutbildningskurs med 3 hp.

Rekommenderade kurser

Det föreligger en allmän rekommendation att prioritera kärnämneskurser. Forskarstuderande uppmuntras att delta vid nationella och internationella intensivkurser (s.k. sommarskolor) inom sina respektive forskningsområden. En kurs i vetenskaplig programmering på högpresterande datorer rekommenderas.

Kurser inom icke-kärnämnen

Förutom kärnämneskurser kan också icke-kärnämneskurser (t ex presentationsteknik, ledarskap, immaterialrätt, projektledning, entreprenörskap, mediaträning, vetenskaplig publicering, etc) ingå.

Tillgodoräknande

Kurser på avancerad nivå motsvarande högst 15 hp för licentiatexamen och högst 30 hp för doktors examen, som inte ingår i det grundläggande eller särskilda behörighetskravet till ämnesområdet och som är relevanta för utbildningen, får tillgodoräknas. Ansökan om tillgodoräknande görs på avsedd blankett av doktoranden; ansökan tillstyrks eller avstyrks av huvudhandledaren och ett eventuellt positivt beslut om tillgodoräknande tas av forskarstudierektorn. Beslut om avslag rörande begäran om tillgodoräknande får inte fattas av forskarstudierektorn, utan endast av fakultetens forskarutbildningsnämnd.

Ämnesområden

Teoretisk fysik

Forskning och forskarutbildning inom teoretisk fysik baseras på fysikens grundläggande lagar, utifrån vilka en mikroskopisk förståelse för fysikaliska processer och materialegenskaper eftersträvas. Forskningen är primärt fokuserad på kondenserade materiens teori, nanovetenskap, kvantfysik, elektromagnetisk modellering och icke-linjär fysik; ett exempel på ledmotiv i forskningen är att via uppnådd förståelse för kopplingen mellan struktur och egenskaper kunna medverka till en utveckling av nya och förbättrade material inom en rad tillämpningsområden. Arbetet är nära förankrat i experimentell verksamhet vid och utanför institutionen IFM, och detta samspel mellan teori och experiment utgör kärnan och drivkraften för forskningen inom teoretisk fysik. Ett viktigt mål med utbildningen i teoretisk fysik är att ge doktorander en djup kunskap och förståelse i de teoretiskt grundläggande ämnena kvantmekanik, statistisk mekanik och fasta tillståndets fysik, samt att ge kunskaper och färdigheter i att genomföra numeriska simuleringar utförda på högpresterande

datorer.

Områdesspecifika kurskrav

Specifika kärnämnen för ämnesområdet teoretisk fysik är analytisk mekanik, kvantmekanik, kvantinformation, termodynamik och statistisk mekanik, elektrodynamik, strömningsmekanik, optik, fasta tillståndets fysik, materialvetenskap (inkl. halvledarfysik, ytfysik, nanofysik, materialdefekter), täthetsfunktionalteori, relativitetsteori, differentialgeometri och topologi, gruppteori, kosmologi och astrofysik, elementarpartikelfysik, kaos och icke-linjära system, kärnfysik, plasmafysik, strängteori, samt tillhörande tillämpade ämnen. Kurser indelas i nivåerna avancerad grundutbildningsnivå och forskarnivå.

Kurspoängsfördelning

För licentiatexamen krävs minst 25 hp inom kärnämneskurser (varav 15 hp i teoretisk fysik) och för doktorsexamen minst 45 hp inom kärnämneskurser (varav 30 hp i teoretisk fysik).

Obligatoriska kurser

Obligatoriska kurser är: Kvantmekanik (6 hp), Statistisk och termisk fysik (6 hp), Fasta tillståndets fysik (6 hp). För licentiatexamen ingår endast två av de tre kärnämneskurserna som obligatoriska moment.

Beräkningskemi

Forskning och forskarutbildning inom beräkningskemi behandlar en rad olika frågeställningar inom kemi och biologi, som studeras med exempelvis kvantkemiska beräkningsmetoder och metoder inom statistisk termodynamik. Frågeställningarna har typiskt sitt ursprung i kemiska och biologiska problem kring molekylers funktion, reaktivitet och egenskaper. Aktuella forskningsprojekt syftar bl.a. till att fastställa fotokemiska reaktionsmekanismer, att designa molekyllära motorer för nanoteknologisk användning, samt att utforska och utveckla ytkemiska processer. Ett viktigt mål med utbildningen i beräkningskemi är att ge den studerande färdigheter i att modellera molekylers funktion, reaktivitet och egenskaper, att ställa upp och kritiskt granska modeller inom beräkningskemi, att knyta an teoretiska forskningsresultat till experimentella studier, samt att ge fördjupade ämneskunskaper inom beräkningskemi och färdigheter i att genomföra numeriska simuleringar på högpresterande datorer.

Områdesspecifika kurskrav

Specifika kärnämnen inom beräkningskemi är beräkningskemi, kvantkemi, responsteori, ytkemi, fotokemi, statistisk termodynamik, täthets-funktional teori, vetenskaplig programmering, kvantmekanik och fasta tillståndets fysik.

Kurspoängsfördelning

För licentiatexamen krävs minst 20 hp inom kärnämneskurser (varav 10 hp i beräkningskemi/teoretisk kemi) och för doktorsexamen minst 40 hp inom kärnämneskurser (varav 20 hp i beräkningskemi/teoretisk kemi).

Obligatoriska kurser

Obligatoriska kurser är: Kvantmekanik (6 hp).

Teoretisk biologi

Forskning och forskarutbildning inom teoretisk biologi behandlar i huvudsak struktur och dynamik i komplexa ekologiska nätverk. Forskningen har en inriktning mot analys och metodutveckling. Frågeställningar utgår från biologiska processer. Analyser och metoder utgår från matematiska eller statistiska modeller. Exempel på aktuella frågeställningar är ekosystemens sårbarhet för olika typer av störningar, bevarande av biologisk mångfald i dynamiska landskap, kontroll av skadeorganismer, spridning av smittsamma sjukdomar, och effektiv hantering av näringsämnen i växtproduktion. Ett viktigt mål med utbildningen i teoretisk biologi är att ge den studerande färdigheter i att utföra sårbarhetsanalyser och riskbedömningar i biologiska system, fördjupade ämneskunskaper inom teoretisk biologi, samt att ge kunskaper och färdigheter inom matematiska modeller, statistik och programmering.

Områdesspecifika kurskrav

Specifika kärnämnen inom teoretisk biologi är teoretisk ekologi, epidemiologi, evolution, matematisk analys, statistik, programmering, databashantering.

Kurspoängsfördelning

För licentiatexamen krävs minst 20 hp inom kärnämneskurser och för doktorsexamen minst 40 hp inom kärnämneskurser.

Obligatoriska kurser

Obligatoriska kurser är: Doktorandseminarium inom biologiämnet.

Bioinformatik

Forskning och forskarutbildning inom bioinformatik behandlar metoder för att tolka och förstå informationen i arvsmassan, DNA och kartlägga funktionen hos proteiner. Forskningen är inriktad på utveckling av metoder för datahantering, förutsägelser och att koppla experiment till modellering. Vidare används existerande metoder för att lösa biologiskt och medicinskt relevanta problem, ofta i samarbete med andra forskargrupper. Exempel på forskningsområden är bl.a. användning av molekylmodellering för att studera dynamiska förlopp och metodutveckling för förutsägelser av struktur och funktion hos proteiner, förutsägelser av protein-protein interaktioner, analys av data från storskalig sekvensbestämning, samt för konstruktion och analys av gen- och proteinnätverk.

Områdesspecifika kurskrav

Specifika kärnämnen inom bioinformatik är biofysik, molekylfysik, biokemi, molekylärbiologi, genetik, proteinkemi, struktur och dynamik i komplexa biologiska system, visualisering, bioinformatiska metoder, programmering, maskininlärningsmetoder, statistik och databashantering.

Kurspoängsfördelning

För licentiatexamen krävs minst 20 hp inom kärnämneskurser och för doktorsexamen minst 40 hp inom kärnämneskurser.

Övergångsbestämmelser

Ändringar i allmänna studieplanen gäller inte de som redan antagits i ämnet. Byte till den nya studieplanen kan dock ske om både huvudhandledare och doktorand är överens. Detta skall i så fall dokumenteras i den individuella studieplanen.