

Požadavky ke státní závěrečné zkoušce z navazujícího magisterského studijního programu Počítačové modelování ve vědě a technice

Obecná pravidla:

Závěrečná zkouška je ústní a prověřuje úroveň znalostí, které měl student nabýt v průběhu navazujícího magisterského programu v rámci kurzů profilujícího základu. Závěrečná zkouška z oboru má dvě části:

1. **Fyzika:** Tato část prověřuje široké znalosti nejdůležitějších poznatků z fyziky (odpovídá kurzům: Termodynamika, Statistická fyzika, Kvantová fyzika, Teorie elektromagnetického pole, Speciální teorie relativity, Fyzika tekutin, Fyzika pevných látek, Fyzika plazmatu, Astronomie a astrofyzika).
2. **Počítačové modelování:** Tato část prověřuje široké znalosti metod počítačového modelování (odpovídá kurzům: Počítačové modelování spojitých soustav I - III, Počítačové modelování částicových soustav I - III)

Seznam témat:

Fyzika:

1. Cíle, základní pojmy a principy termodynamiky: termodynamická soustava, stavové parametry, vnitřní energie, empirická teplota, teplo, termodynamická práce, 1. a 2. postulát, stavové rovnice, termodynamický děj.
2. Tři termodynamické zákony: slovní a matematické formulace, adiabatické a polytropické děje, entropie, termodynamická teplota.
3. Termodynamické potenciály rovnovážných uzavřených soustav, Maxwellovy vzorce.
4. Cíle, základní pojmy a myšlenky statistické fyziky: mikroskopické stavy, časová střední hodnota, statistický soubor, souborová střední hodnota, ergodická hypotéza, princip apriorních pravděpodobností, mikrokanonické rozdělení.
5. Kanonický soubor: kanonické rozdělení, význam kanonické partiční funkce, termodynamické veličiny v kanonickém souboru. Kvaziklasická aproximace v kanonickém souboru, ekvipartiční teorém.
6. Klasický ideální plyn: faktorizace partiční funkce, termická stavová rovnice, závislost tepelné kapacity jedno- a dvou-atomárních plynů na teplotě. Ideální krystal: Einsteinův model, závislost tepelné kapacity jednoduchých krystalů na teplotě.
7. Postuláty kvantové mechaniky.
8. Atom vodíku: formulace úlohy, separace vlnové funkce, kvantová čísla a spektrum energie, vlnové funkce (základní grafické představy).
9. Soustavy identických částic, symetrie vlnové funkce, bosony a fermiony, Pauliho princip.
10. Maxwellovy rovnice, jejich fyzikální interpretace, definice příslušných veličin. Hraniční podmínky pro elektromagnetické pole.
11. Zákony zachování náboje, energie, hybnosti v teorii elektromagnetického pole a příslušné pojmy.
12. Potenciály v teorii elektromagnetického pole: definice, vlnová rovnice, d'Alambertovo řešení, retardované potenciály, dipólové záření.
13. Výchozí principy speciální teorie relativity. Lorentzova transformace. Dilatace času, kontrakce délek. Energie a hybnost ve speciální teorii relativity.

14. Základní strukturní charakteristiky tekutin.
15. Jednoduché modely mezimolekulárních interakcí a klasifikace tekutin.
16. Struktura pevných látek (skupenství, krystalické a amorfni látky), základní pojmy krystalografie (krystal, elementární buňka, krystalografické soustavy, symetrie, Millerovy indexy).
17. Základy pásové teorie pevných látek (energetické hladiny volného a vázaného elektronu, elektron v potenciálové krabici, elektron v periodické mřížce – existující modely).
18. Základní charakteristiky plazmatu: Debyeovo stínění, plazmový parametr, plazmová frekvence, beta parametr. Kritéria pro plazma, Saha rovnice.
19. Pohyb nabitě částice v magnetických a elektrických polích, Larmorova frekvence a poloměr, drifts. Magnetická zrcadla. Magnetický moment.
20. Zářivé procesy a popis záření v astrofyzice, Pogsonova rovnice, určování vzdáleností ve vesmíru.
21. Spektrální klasifikace hvězd, hmotnosti hvězd a jejich určování, Hertzsprungův-Russellův diagram, vznik a vývoj hvězd.

Počítačové modelování:

1. Modelování spojitých soustav, Eulerův a Lagrangeův popis kontinua, materiálová derivace, Leibnizovo integrální pravidlo/Reynoldsoův transportní teorém.
2. Bezrozměrná analýza, Buckinghamův Pi teorém, příklady použití: obtékání koule a tok potrubím.
3. Transport tepla vedením a konvekcí, příklady řešení rovnice transportu tepla.
4. Transport hmoty difúzí a konvekcí, složková bilance pro zředěné systémy, rovnice kontinuity.
5. Numerické řešení rovnic transportu tepla a hmoty.
6. Zákon zachování hybnosti v tekutinách, objemové a plošné síly, tenzor napětí.
7. Zjednodušené formy matematických modelů proudění tekutin, speciální případy analytického řešení Navierových-Stokesových rovnic.
8. Numerické řešení Navierových-Stokesových rovnic pro laminární nestlačitelné proudění za izotermních podmínek.
9. Nevazký tok, Eulerova rovnice, Bernoulliho rovnice.
10. Mezní vrstva, laminární a turbulentní proudění.
11. Základy metody molekulární dynamiky (MD) v mikrokanonickém souboru: pohybové rovnice a jejich numerické řešení.
12. Mezimolekulární interakce a párové interakční potenciály.
13. Mezimolekulární interakce v periodických okrajových podmínkách: „tail“ korekce krátkodosahových interakcí, princip Ewaldovy sumace, princip metody reakčního pole.
14. Výpočet základních veličin: vnitřní energie, teplota, tlak, radiální distribuční funkce.
15. Principy MD simulací v jiných statistických souborech: termostaty a barostaty.
16. Metoda Monte Carlo (MC) v molekulárních simulacích: princip Metropolisovy metody, matice přechodu, mikroskopická reverzibilita.
17. Realizace Metropolisovy metody v kanonickém souboru: počáteční konfigurace, translace, rotace, zlomky přijetí, konvergence, ekvilibrace.
18. Metody MC pro výpočet termodynamických veličin: tlak (virtuální změna objemu), chemický potenciál (virtuální vkládání částic).

19. Principy MC simulací v jiných statistických souborech: izobaricko-izotermický soubor, grandkanonický soubor.
20. Molekulární simulace fázových rovnováh: explicitní simulace fázového rozhraní, Gibbsův soubor.