

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

Obecná pravidla:

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

1. **Fyzika:** Tato část prověřuje znalosti nejdůležitějších poznatků z fyziky (odpovídá kurzům: Mechanika, Termika a molekulová fyzika, Elektřina a magnetismus, Kmity a vlny, optika, Atomová a jaderná fyzika, Teoretická mechanika, Základy kvantové mechaniky).
2. **Počítačové modelování:** Tato část prověřuje znalosti základních metod počítačového modelování (odpovídá kurzům: Počítačové modelování, Počítačové zpracování obrazu a signálu, Umělé neuronové sítě a evoluční algoritmy, Numerická matematika I-II, Počítačové metody Monte Carlo).
3. **Programování:** Tato část prověřuje znalosti programování potřebné pro řešení výpočetních problémů a formulaci počítačových modelů (odpovídá kurzům: Programování – Fortran, Programování – C/C++).

Studentu bude zadána jedna otázka z části Fyzika, jedna otázka z části Počítačové modelování a jedna praktická úloha k části Programování. Student bude mít poté k dispozici celkem minimálně 40 minut na přípravu. Připravené odpovědi student přednese před komisí, která může položit doplňující dílčí otázky menšího rozsahu.

Seznam témat:

Fyzika:

1. Pohybové zákony – formulace. Inerciální a neinerciální vztažné soustavy, Galileiho transformace, setrvačné síly (v nerotující i rotující vztažné soustavě).
2. Práce síly, potenciál síly, potenciální a kinetická energie, potenciálové a konzervativní síly, zákon zachování mechanické energie a jeho souvislost s pohybovými zákony.
3. Pohyb částic v poli centrální síly – matematická formulace problému, důsledky, příklady centrálního silového působení.
4. Impulzové věty (věta hybnosti a momentu hybnosti), zákony zachování hybnosti a momentu hybnosti v soustavách částic a pro tuhé těleso. Aplikace na jednoduché mechanické soustavy.
5. Základní pojmy a zákony mechaniky kontinua (Pascalův zákon, Archimédův zákon, stacionární proudění, rovnice kontinuity, Bernoulliho rovnice, elementární Hookův zákon pro tah a smyk, moduly pružnosti v tahu a ve smyku).
6. Analytická mechanika – mechanické stupně volnosti, vazby, virtuální posunutí. Princip virtuálních prací, D'Alambertův princip, Lagrangeovy rovnice II. druhu, Hamiltonův princip nejmenší akce.
7. Zobecněné souřadnice a hybnosti, zobecněná energie, fázový prostor, Hamiltonovy kanonické rovnice. Hamiltonián, jeho význam, příklady pro jednoduché systémy.
8. Mechanika tuhého tělesa – popis otáčivého pohybu, kinetická energie a moment hybnosti tuhého tělesa. Rotace kolem pevné osy, Steinerova věta. Otáčení kolem pevného bodu a tenzor setrvačnosti.
9. Základní pojmy termiky – termodynamická soustava, stav termodynamické rovnováhy, vnitřní energie, empirická teplota, teplo, objemová práce, vratné a nevratné termodynamické děje.

10. První a druhý termodynamický zákon – matematická formulace, aplikace na termodynamické děje s ideálním plynem. Carnotův cyklus.
11. Ideální plyn – definice, stavová rovnice, vnitřní energie a klasické tepelné kapacity ideálních plynů, Maxwellovo rozdělení, střední kvadratická rychlost.
12. Kmity netlumené, tlumené a vynucené harmonickou silou, rezonance – pohybové rovnice a jejich řešení, rezonance.
13. Huygensův-Fresnelův princip. Vlnová rovnice a její řešení (rovinná a kulová vlna).
14. Fermatův princip a jeho aplikace při výkladu odrazu a lomu světla.
15. Interference světla – skládání koherentních a nekoherentních vln, podmínky pro interferenční maxima a minima (Youngův pokus nebo tenká vrstva).
16. Difrakce Fresnelova a Fraunhoferova – podmínky pro interferenční minimum na štěrbině, ohyb na mřížce.
17. Základní pojmy a zákony elektrostatiky ve vakuu – Coulombův zákon, princip superpozice, intenzita elektrostatického pole, Gaussova věta, potenciál elektrostatického pole.
18. Vlastnosti elektrostatického pole ve vakuu – vzájemný vztah mezi intenzitou a potenciálem elektrostatického pole, konzervativnost elektrostatického pole. Elektrický dipól, dipólový moment, síly působící na elektrický dipól v elektrostatickém poli ve vakuu.
19. Stacionární magnetické pole buzené ve vakuu – Ampérův zákon, Biotův-Savartův zákon a jeho aplikace na jednoduchou fyzikální soustavu. Silové působení homogenního magnetického pole na proudovou smyčku, magnetický moment smyčky.
20. Pohyb elektricky nabitě částice v homogenním elektrickém a magnetickém poli.
21. Faradayův zákon elektromagnetické indukce – matematická formulace, aplikace.
22. Fotoelektrický a Comptonův jev – selhání klasické fyziky, korpuskulární interpretace experimentů. Rozptyl elektronu na dvouštěrbině (Davisson-Germerův pokus) – vlnové vlastnosti částic, De Broglieho vlnová délka.
23. Původ radioaktivity, zákon radioaktivního rozpadu, typy radioaktivních rozpadů.
24. Modely atomů – spektra atomů, Franckův-Hertzův experiment, Bohrovy postuláty.
25. Struktura atomového jádra, hmotností schodek jádra a vazbová energie jádra.
26. Základní představy kvantové mechaniky – fyzikální význam vlnové funkce a její souvislost s měřením pozorovatelných veličin, jakým způsobem předpovídá kvantová mechanika možné hodnoty fyzikálních veličin. Relace neurčitosti (Heisenbergovy), jejich význam a souvislost s komutativností operátorů přiřazených fyzikálním veličinám.
27. Schrödingerova rovnice a její řešení – obecná Schrödingerova rovnice a její souvislost s nečasovou Schrödingerovou rovnicí. Časový vývoj středních hodnot pozorovatelných veličin (Ehrenfestovy rovnice).

Počítačové modelování:

1. Numerické řešení rovnice $f(x) = 0$ (metody vyžadující separaci kořenů: metoda půlení intervalu, metoda sečen; iterační metody: prostá iterační metoda, Newtonova iterační metoda).
2. Řešení soustav lineárních rovnic (přímé metody: Gaussova eliminace; iterační metody: Jacobiho metoda, Gaussova-Seidlova metoda, superrelaxační metoda).
3. Aproximace a interpolace (aproximace metodou nejmenších čtverců; Lagrangeova a Newtonova interpolace, interpolace kubickými spliny).

4. Numerická integrace (Newtonovy–Cotesovy vzorce: lichoběžníková metoda, Simpsonova metoda, Rombergova metoda).
5. Numerické řešení obyčejných diferenciálních rovnic a jejich soustav (počáteční úloha, princip numerického řešení, jednokrokové metody, vícezkrokové metody).
6. Numerické řešení parciálních diferenciálních rovnic metodou sítí (princip metody, Dirichletova úloha pro Poissonovu rovnici, smíšená úloha pro rovnici vedení tepla, smíšená úloha pro rovnici kmitání struny/vlnovou rovnici).
7. Signál, obraz a digitalizace – typy signálů a jejich základní vlastnosti, nežádoucí složky v signálu, kvantování a vzorkování, obraz (barevné modely).
8. Statistické analýzy signálů – střední hodnota a průměr, rozptyl a směrodatná odchylka, standardní chyba střední hodnoty, autokorelační funkce, bloková metoda pro odhad chyby.
9. Klasická filtrace a morfologické operátory – masky, odstranění šumu, hledání hran, otevření, uzavření.
10. Spektrální analýzy signálů – Fourierův teorém, Fourierovy řady, princip a využití integrálních transformací signálu.
11. Vícevrstvá dopředná neuronová síť (učení s učitelem) – formální neuron (potenciál neuronu, aktivační funkce), geometrická interpretace funkce jednoho neuronu, tréninková a testovací množina, chyba neuronové sítě, princip učebního algoritmu Backpropagation, případné modifikace tohoto základního algoritmu (např. Rprop), přeučení neuronové sítě a možnosti redukce tohoto nežádoucího fenoménu, včetně specializovaných metod (dropout, L1 a L2 regularizace), aplikace vícevrstevných dopředných neuronových sítí.
12. Samoorganizace – Vektorová kvantizace, základní algoritmy (Lloydův algoritmus, Kohonenovo učení – interpretace vah a potenciálu neuronu), Kohonenovy samoorganizační mapy (SOM), možnost doučení SOM pro předem definovanou (pomocí tréninkové množiny) klasifikaci dat (LVQ), využití samoorganizačních algoritmů.
13. Genetické algoritmy (základní myšlenky, pojmy a operace) – jedinec alias „chromozóm“ či „gen“, problematika kódování resp. reprezentace jedinců (binární – Základní či přímé binární kódování, Grayovo kódování, vektory reálných čísel, ...), populace jedinců, fitness funkce, selekce či reprodukce (ruleta, turnaj), křížení, mutace, možnosti vylepšení konvergence (elitářství, škálování), zohlednění okrajových podmínek dané optimalizační úlohy (fitness s penalizací, opravné algoritmy), využití genetických algoritmů.
14. Generování náhodných veličin – pseudonáhodná čísla, diskrétní náhodné veličiny, spojitě náhodné veličiny, metoda inverzní funkce, metoda výběru (Acceptance-Rejection Method též Neumannova), metoda superpozice, specializované vzorce pro efektivní vzorkování Normálního (Gaussova) rozdělení a Maxwelllova-Boltzmannova rozdělení (rychlosti částic v termodynamické rovnováze).
15. Aplikace metody Monte Carlo v numerické matematice a ve fyzice (Student si vybere jednu z uvedených aplikací metody Monte Carlo a pohovoří o ní.) – (a) Numerická integrace metodou Monte Carlo (geometrická metoda, metoda střední hodnoty, vícerozměrné integrály, metody snižování rozptylu). (b) Interpolace funkcí metodou Monte Carlo. (c) Řešení Laplaceovy rovnice (rozložení potenciálu el. pole) metodou Monte Carlo. (d) Transportní problém (rozptylové procesy, účinný průřez, střední volná dráha, náhodná volná dráha, umělé obraty pro zvýšení efektivity).
16. Metropolisův algoritmus – popis algoritmu, matice přechodu, Markovův řetězec, detailní rovnováha a mikroskopická reverzibilita, způsoby navržení zkušebního stavu a obecné pravděpodobnostní kritérium pro jeho přijetí.

17. Principy částicového modelování – interakční modely, párová aditivita interakční energie, periodické okrajové podmínky, metoda nejbližšího obrazu (nearest image convention), ekvilibrace, základní veličiny (energie, kinetická teplota, radiální distribuční funkce).
18. Metoda molekulární dynamiky – Verletův a rychlostní Verletův algoritmus, principy jednoduchých termostatů.
19. Aplikace Metropolisova algoritmu v částicovém modelování – generování zkušebních pohybů v kanonickém souboru, pravděpodobnostní kritérium přijetí, zlomek přijetí, principy aplikace v jiných statistických souborech.

Programování:

Student vyřeší zadané úlohy pomocí vlastního programu. Programovací jazyk si student zvolí z C/C++, Fortran, případně Python. Úlohy budou prověřovat dovednosti v následujících oblastech:

1. Deklarace proměnných – celočíselné, logické, s plovoucí čárkou, komplexní čísla, vektor/pole, matice, odvozené datové typy a struktury, inicializace, nastavení přesnosti/rozsahu.
2. Dynamická alokace proměnných.
3. Operace se základními proměnnými – matematické výrazy, přiřazení, logické operátory, zaokrouhlování, přetypování.
4. Operace s poli – skalární součin, násobení matic, maximum, minimum, suma, produkt, reshape.
5. Cykly – jednoduché, vnořené, do, for, while, exit, cycle, break, continue.
6. Větvení – if, elseif, else, case.
7. Vstupy a výstupy na obrazovku – formátování vstupů a výstupů.
8. Čtení a zápis dat ze/do souborů – textově i binárně.
9. Funkce a subroutiny – deklarace, vstupní a výstupní parametry, pole jako argument.
10. Práce s textovými řetězci – spojování, rozdělování, porovnání, přístup k jednotlivým znakům.
11. Generování (pseudo)náhodných čísel.
12. Měření výpočetního času.
13. Použití debuggeru – identifikace chyby, krokování, prohlížení obsahu proměnných.