

# POŽADAVKY K RIGOROZNÍ ZKOUŠCE

## “POČÍTAČOVÉ MODELOVÁNÍ VE VĚDĚ A TECHNICE”

### Organizace zkoušky

Zkouška je ústní a má čtyři části:

1. Numerická matematika, pravděpodobnost a statistika.
2. Počítačová fyzika.
3. Fyzika.
4. Specializace.

Z každé z těchto částí bude položena jedna otázka. U úspěšného kandidáta se požaduje znalost dané problematiky v širším kontextu a schopnost jejich jednoduchých aplikací. Členové komise mohou pro doplnění představy o vědomostech uchazeče položit uchazeči další drobné doplňující otázky předpokládající okamžitou stručnou odpověď.

## 1. Numerická matematika, pravděpodobnost a statistika

### a) numerická matematika

Reprezentace čísel a chyby výpočtu.

Aproximace a interpolace. Řešení soustav lineárních rovnic. Matice. Numerická integrace a derivování. Řešení nelineárních rovnic a jejich soustav. Řešení obyčejných diferenciálních rovnic. Řešení parciálních diferenciálních rovnic.

### b) pravděpodobnost

Pravděpodobnost náhodných jevů. Náhodná veličina a její základní charakteristiky. Důležitá rozdělení pravděpodobnosti a jejich základní vlastnosti.

### c) statistika

Náhodný výběr a jeho vlastnosti. Výběrové charakteristiky. Speciální statistická rozdělení. Testování hypotéz.

## 2. Počítačová fyzika

Náplň pojmu počítačová fyzika. Charakteristika výpočetní techniky. Strukturované programování. Hlavní směry klasické počítačové fyziky.

Základní techniky počítačového modelování. Metoda Monte Carlo a její použití v matematice a fyzice. Metoda molekulární dynamiky, postupy pro zefektivňování deterministického částicového modelování. Spojité modelování. Hybridní modelování.

Počítačová grafika.

Zpracování obrazu. Základy matematické morfologie a teorie perkolace.

Integrální transformace a jejich použití ve fyzice. Řízení experimentu. Symbolické manipulace.

Moderní směry počítačové fyziky. Paralelismus.

### 3. Fyzika

Předpokládá se, že posluchač zná zavedení základních a odvozených fyzikálních veličin (včetně představy o konkrétních možnostech experimentálního uspořádání pro jejich indikaci a měření), jejich jednotky, jakož i přibližnou (případně alespoň řádovou) číselnou hodnotu základních fyzikálních konstant. Posluchač má prokázat porozumění základním zákonům a teoriím fyzikálních jevů a jejich vzájemným souvislostem.

#### a) teoretická mechanika

Mechanika soustavy hmotných bodů (Newtonovy pohybové zákony, impulsové věty, zákony zachování energie, hybnosti a momentu hybnosti. Pohyb v centrálním poli. Harmonické knity a jejich skládání). Mechanika tuhého tělesa (unášivá rychlost, tenzor setrvačnosti, kinetická energie a moment setrvačnosti tuhého tělesa). Pohyb v neinerciálním systému.

Analytická mechanika (Princip virtuální práce, d'Alambertův princip, Lagrangeovy rovnice, Hamiltonův princip nejmenší akce, kanonické rovnice).

Základy mechaniky kontinua: Eulerova a Lagrangeova metoda popisu pohybu kontinua. Tenzor malých deformací, tenzor napětí, Hookeův zákon. Základní zákony a rovnice hydrostatiky a hydrodynamiky.

#### b) teorie elektromagnetického pole

Elektrostatické pole ve vakuu a látkovém prostředí (základní rovnice a jejich řešení, multipólový rozvoj, materiálové vztahy, energie pole, hraniční podmínky).

Stacionární magnetické pole (základní vztahy, rovnice a jejich řešení – Biotův a Savartův zákon, energie, materiálové vztahy, hraniční podmínky).

Obecná soustava Maxwellových rovnic a jejich fyzikální interpretace. Materiálové vztahy a okrajové podmínky pro veličiny elektromagnetického pole.

Zákony zachování v teorii elektromagnetického pole.

Řešení soustavy Maxwellových rovnic pro nestacionární pole (potenciály elektromagnetického pole, rovinná a kulová elektromagnetická vlna a její šíření, Fresnelovy vzorce, superpozice a retardace řešení). Vyzařování elektromagnetických vln.

#### c) termodynamika a statistická fyzika

Termodynamická soustava a její stav, termodynamická rovnováha, rovnovážné a nerovnovážné děje, vnitřní a vnější parametry, teplota, stavové rovnice.

0., I., II. a III. zákon termodynamiky, entropie a její vlastnosti, termodynamické potenciály, Maxwellovy vzorce, popis otevřených soustav, podmínky termodynamické rovnováhy, rovnováha heterogenních soustav, fázové přechody.

Popis systému a jeho vývoje ve statistické fyzice, fázový prostor, mikrostav, makrostav, statistický soubor, časové a souborové střední hodnoty, ergodická hypotéza, rozdělovací funkce, Liouvilleův teorém, vztah mezi entropií a počtem dostupných mikrostavů.

Kanonické rozdělení, partiční funkce a její vztah k termodynamickým veličinám, aplikace: ideální plyn, paramagnetika, Maxwellovo rozdělení. Ekvipartiční teorém a jeho aplikace. Tepelné kapacity ideálních plynů a pevných látek (Dulongův-Petitův zákon, Einsteinova aproximace, Debyeova aproximace).

Vlastnosti fermionů a bosonů, Fermi-Diracova a Bose-Einsteinova rozdělovací funkce a jejich aplikace: záření ACT, elektronový plyn v kovech, stabilita bílých trpaslíků.

#### **d) kvantová fyzika**

Východiska a postuláty kvantové fyziky. Schrödingerova rovnice, pravděpodobnostní proudová hustota. Komutativnost operátoru a měřitelnost veličin, relace neurčitosti.

Operátor časové změny, kvantově-mechanické pohybové rovnice (I. a II. Ehrenfestův teorém).

Stacionární stavy, nečasová Schrödingerova rovnice. Řešení jednoduchých stacionárních úloh (potenciálová stěna, val a krabice). Lineární harmonický oscilátor.

Moment hybnosti (vlastní hodnoty a funkce, kreační a anihilační operátory stavů). Pohyb v centrálním poli. Schrödingerův model atomu vodíku. Atom ve vnějším magnetickém poli.

Popis systému mnoha částic. Princip nerozlišitelnosti mikročástic. Symetrie vlnové funkce. Pauliho princip.

Základy poruchového počtu (stacionární porucha, nedegenerované spektrum).

## **4. Specializace**

Předseda rigorózní komise určí uchazeči bezprostředně po obdržení přihlášky speciální okruh blízky tématu předpokládané rigorózní práci. V případě, že téma předložené rigorózní práce se bude lišit od předpokládaného, může předseda speciální okruh změnit.

## **Doporučená literatura**

Vicher M.: Numerická matematika, skripta PF UJEP, Ústí nad Labem 2003.

Press W.H. et al.: Numerical Recipes, Cambridge University Press, Cambridge 2007.

Hrach R.: Počítačová fyzika I, skripta PF UJEP, Ústí nad Labem 2003.

Hrach R.: Počítačová fyzika II, skripta PF UJEP, Ústí nad Labem 2003.

Nezbeda I., Kolafa J., Kotrla M.: Úvod do počítačových simulací, skripta MFF UK, Praha 2003.

Lísal M.: Paralelní programování s aplikacemi. skripta PřF UJEP, Ústí nad Labem 2007.

Fišer K.: Teoretická mechanika, skriptum PF UJEP, 2003.

Štoll I.: Mechanika. Skripta FJFI ČVUT Praha, 1998.

Brdička, M. – Hladík, A.: Teoretická mechanika. Academia, Praha, 1987.

Brdička, M. – Samek, L. – Sopko, B.: Mechanika kontinua. Academia, Praha, 2000.

Kvasnica J.: Mechanika. Academia Praha, 1988.

Novotný D.: Teorie elektromagnetického pole, skripta PF v Ústí n.L., 1985.

Sedlák B., Štoll I.: Elektřina a magnetismus, Academia Praha, 2002.

Kvasnica J.: Teorie elektromagnetického pole, Academia Praha 1985.  
Jackson, J.D.: Classical Electrodynamics, John Willey, New York, Academic Press 1998.

Skála L.: Úvod do kvantové mechaniky, Academia Praha, 2005.  
Kvasnica J.: Kvantová fyzika, skripta PF UL, 1985.  
Dlouhá J.: Kvantová mechanika, skripta MFF UK Praha.  
Pišút J.: Úvod do kvantovej mechaniky, Alfa Bratislava 1983.  
Pišút J.: Zbierka úloh z kvantovej mechaniky, Alfa, Bratislava 1985.  
Landau L.D.: Kvantová mechanika, překlad Alfa, Bratislava 1982.

Obdržálek J., Vaněk A.: Termodynamika a molekulová fyzika, skripta PF UJEP, 2000.  
Kvasnica J.: Termodynamika, SNTL, Praha, 1965.  
Varady M.: Statistická fyzika, lecture notes – web KFY, PřF UJEP, 2006.  
Mandl F.: Statistical Physics, John Willey and Sons, 2002.  
Reif F.: Fundamental of Statistical and Thermal Physics, McGraw-Hill Series in Fundamentals of Physics, 1965.  
Kvasnica J.: Statistická fyzika, Academia, Praha 1983.