

# POŽADAVKY K STÁTNÍ ZÁVĚREČNÉ ZKOUŠCE MATEMATICKÉ A POČÍTAČOVÉ METODY VE FYZICE [FYZIKA]

## 1. ÚVOD

Tento dokument je neformálním průvodcem po státní závěrečné zkoušce v magisterském studiu na oboru “Matematické a počítačové metody ve fyzice”, což je magisterský obor na programu *fyzika*. Pokud studujete v programu *matematika*, váš obor se jmenuje “Matematické modelování ve fyzice a technice”, a požadavky k státní závěrečné zkoušce jsou odlišné, jejich znění najdete na internetových stránkách matematického modelování.

Státní závěrečná zkouška, se skládá z

- obhajoby diplomové práce,
- ústní části,

a obvykle v tomto pořadí i probíhá. Podrobný popis jednotlivých částí je uveden níže.

## 2. OBHAJOBA DIPLOMOVÉ PRÁCE

Student během dvaceti minut představí<sup>1</sup> výsledky získané při řešení diplomové práce. Poté následuje diskuse, během které student reaguje na případné připomínky oponentů. (Posudky od oponentů jsou předem dostupné v Studijním informačním systému. Je naprosto nezbytné abyste kvalifikovaně reagovali na připomínky oponentů, důkladně se připravte! Opět se očekává, že během odpovědi použijete předpřipravenou prezentaci.) Na závěr student zodpoví případné dotazy členů komise či dalších zúčastněných.

## 3. ÚSTNÍ ZKOUŠKA

**3.1. Průběh ústní zkoušky.** Ústní zkouška spočívá v zodpovězení několika otázek týkajících se níže uvedených témat. V principu se jedná o témata probíraná v povinných předmětech studijního plánu. Přesněji, zkouška probíhá tak, že student zodpoví celkem šest otázek z těchto oblastí

- teorie parciálních diferenciálních rovnic (jedna otázka),
- funkcionální analýza (jedna otázka),
- metoda konečných prvků (jedna otázka),
- teorie řešení systémů algebraických rovnic (jedna otázka).

Zbývající dvě otázky se týkají oblasti, ve které se student rozhodl specializovat. Otázky jsou tedy zaměřeny na *jednu* z následujících oblastí:

- mechanika kontinua (dvě otázky),
- molekulární dynamika (dvě otázky),
- kvantové systémy (dvě otázky),
- obecná teorie relativity (dvě otázky),
- částicová fyzika (dvě otázky).

Každé z odpovědí je zpravidla věnováno deset minut. Očekává se, že student prokáže hlubší pochopení jednotlivých témat a schopnost nahlédnout daná tvrzení v širším kontextu. (Neočekává se se důkladná znalost *technických detailů* v jednotlivých důkazech a podobně. Student by měl prokázat, že rozumí základním úvahám, které jsou použity při důkazech zásadních tvrzení, a měl by prokázat, že chápe proč jsou daná tvrzení/definice formulována právě daným způsobem. Detailní technickou znalost problematiky už jste prokázali během zkoušek z příslušných předmětů!) Seznam témat k ústní zkoušce je přiložen níže.

## 3.2. Témata k ústní zkoušce.

### (1) Parciální diferenciální rovnice

Zkoušená látka je probírána zejména v přednáškách Parciální diferenciální rovnice 1 a Parciální diferenciální rovnice 2. Předpokládá se, že se student se rovněž velmi dobře orientuje v základech teorie parciálních diferenciálních rovnic ve smyslu vstupních požadavků pro navazující magisterské studium, tedy v teorii parciálních diferenciálních rovnic kupříkladu na úrovni přednášky Úvod do parciálních diferenciálních rovnic.

#### (a) Sobolevovy prostory

Slabá derivace, definice a základní vlastnosti Sobolevových prostorů  $W^{k,p}$  – reflexivita, separabilita, hustota hladkých funkcí, operátor prodloužení pro  $W^{1,p}$ -funkce a lipschitzovskou hranici. Věty o spojitým a kompaktním vnoření Sobolevových prostorů do Lebesgueových a Hölderových prostorů. Zavedení stop pro funkce ze Sobolevových prostorů, věta o stopách, inverzní věta o stopách.

<sup>1</sup>Očekává se prezentace s pomocí projektoru, standardně je k dispozici počítač s Adobe Acrobat Reader a operačním systémem Windows. Pokud vaše prezentace vyžaduje spuštění videa, ověřte si předem, že na univerzitním počítači jsou nainstalovány všechny potřebné kodeky a podobně. Totéž se týká dalších nestandardních požadavků na software. Po domluvě lze použít vlastní počítač. Pozor, projektor je typicky vybaven pouze VGA/HDMI konektorem. Pro použití DisplayPort/USB-C budete pravděpodobně potřebovat redukci, zajistěte si ji předem.

(b) Slabá řešení pro lineární eliptické rovnice na omezené oblasti

Formulace slabé úlohy pro lineární eliptickou rovnici s různými okrajovými podmínkami, řešení pomocí Rieszovy věty o reprezentaci (symetrický operátor), pomocí Lax-Milgramova lematu respektive Galerkinovou metodou. Kompaktnost řešícího operátoru, vlastní vektory a vlastní čísla řešícího operátoru. Fredholmova alternativa a její aplikace. Princip maxima pro slabé řešení.  $W^{2,2}$  regularita pomocí techniky diferencí. Samoadjungovaný operátor: ekvivalence úlohy s minimalizací kvadratického funkcionálu.

(c) Slabá řešení pro nelineární eliptické rovnice na omezené oblasti

Úvod do variačního počtu, základní věta variačního počtu, duální formulace, souvislost s konvexitou. Existence a jednoznačnost řešení nelineárních úloh pomocí věty o pevném bodu (nelineární Lax-Milgram pro dvojkovou strukturu). Existence řešení pomocí Galerkinovy metody a Mintyho metody – monotónní operátor a semilineární člen.

(d) Lineární parabolické rovnice 2. řádu

Bochnerovy prostory a jejich základní vlastnosti, Gelfandova trojice, Aubin-Lionsova věta. Slabá formulace, nabývání počáteční podmínky, existence řešení pomocí Galerkinovy aproximace, jednoznačnost a regularita řešení (časová a prostorová), zhlazující vlastnost, princip maxima.

(e) Lineární hyperbolické rovnice 2. řádu

Slabá formulace hyperbolického problému, nabývání počátečních podmínek, existence řešení pomocí Galerkinovy aproximace, jednoznačnost, regularita řešení (časová a prostorová), konečná rychlost šíření signálu.

(2) **Numerická matematika**

Zkoušená látka je probírána zejména v přednáškách Metoda konečných prvků a Analýza maticových iteračních metod – principy a souvislosti/Algoritmy maticových iteračních metod. Předpokládá se, že se student velmi dobře orientuje v základech numerické matematiky ve smyslu vstupních požadavků pro navazující magisterské studium, tedy v látce probírané kupříkladu v přednáškách Analýza maticových výpočtů a Základy numerické matematiky.

(a) Metoda konečných prvků pro řešení eliptických rovnic

Galerkinova a Ritzova metoda pro řešení abstraktní lineární eliptické rovnice. Odhad diskretizační chyby této metody – Céovo lemma. Definice abstraktního konečného prvku, jednoduché příklady konečných prvků Lagrangeova a Hermiteova typu. Teorie aproximací v Sobolevových prostorech: aproximační vlastnosti operátorů zachovávajících polynomy. Aplikace těchto výsledků pro prvky Lagrangeova a Hermiteova typu. Odvození řádu konvergence přibližných řešení konkrétních eliptických úloh 2. řádu. Odhad řádu konvergence v  $L^2$  normě – Nitscheho lemma. Základy numerické integrace v metodě konečných prvků.

(b) Metody pro řešení soustav algebraických rovnic a výpočet vlastních čísel

Metody pro řešení soustav algebraických rovnic a výpočet vlastních čísel Spektrální rozklad operátorů a matic. Invariantní podprostory a spektrální informace, normalita. Srovnání přímých a iteračních metod pro řešení lineárních algebraických soustav. Projekční proces. Popis konvergence iteračních metod. Souvislost mezi iteračními metodami pro řešení soustav rovnic a metodami pro výpočet vlastních čísel. Srovnání metod pro řešení lineárních a nelineárních soustav algebraických rovnic. Numerická stabilita výpočtů a algebraická chyba.

(3) **Funkcionální analýza**

Zkoušená látka je částečně probírána v přednášce Funkcionální analýza I/Pokročilé metody v matematické analýze. Teorie prostorů funkcí je také částečně pokryta přednáškami Parciální diferenciální rovnice 1 a Parciální diferenciální rovnice 2. Předpokládá se, že se student velmi dobře orientuje v základech funkcionální analýzy ve smyslu vstupních požadavků pro navazující magisterské studium, tedy v teorii kupříkladu na úrovni přednášky Úvod do funkcionální analýzy.

(a) Hilbertovy a Banachovy prostory

Definice, norma, skalární součin, příklady Banachových prostorů. Lineární funkcionály, Hahn-Banachova věta. Duální prostory, reprezentace některých duálů (Hilbertovy prostory, Lebesgueovy prostory). Rieszova věta o reprezentaci. Slabá a \*-slabá konvergence. Banach-Alaogluova věta. Slabá kompaktnost a reflexivita.

(b) Spojité lineární zobrazení

Definice, základní vlastnosti, norma, prostor lineárních zobrazení, adjungované zobrazení. Základní vlastnosti spektra a spektrálního poloměru. Kompaktní operátory, symetrický operátor, samoadjungovaný operátor, uzávěr operátoru, uzavřený operátor, definice a vlastnosti adjungovaného operátoru. Vlastní čísla a vlastní funkce symetrických eliptických operátorů.

(c) Věty o pevných bodech

Banachova věta, Brouwerova věta, Schauderova věta, Schaeferova věta.

(d) Integrovní transformace a základy teorie distribucí

Definice Fourierovy transformace na  $L^1$  a její základní vlastnosti, věta o inverzi, Fourierova transformace konvoluce a derivace, Plancherelova věta. Prostor testovacích funkcí a konvergence v něm, definice distribuce, základní příklady, charakterizace distribuce, řád distribuce, operace s distribucemi (derivování, násobení funkcí), Schwarzův prostor a temperované distribuce, Fourierova transformace funkcí ze Schwarzova prostoru  $\mathcal{S}$  a z prostoru temperovaných distribucí  $\mathcal{S}'$ , její základní vlastnosti. Fourierova transformace na  $L^2$ .

(4) **Mechanika kontinua**

Zkoušená látka je probírána zejména v přednáškách Mechanika kontinua, Termodynamika a mechanika newtonovských tekutin a Termodynamika a mechanika pevných látek.

(a) Kinematika kontinua

Popis pohybu spojitého prostředí. Deformace čárových, plošných a objemových elementů, deformace, deformační gradient, polární rozklad deformačního gradientu a jeho interpretace, pravý a levý Cauchyův–Greenův tenzor, Greenův–Saint-Venantův tenzor. Rychlost deformace čárových, plošných a objemových elementů. Zavedení materiálové a prostorové rychlosti, gradient rychlosti, symetrický gradient rychlosti, materiálová derivace. Isochorická deformace. Proudnic a proudočáry. Nutné a postačující podmínky pro materiálové plochy. Lagrangeův a Eulerův popis. Podmínky kompatibility pro tenzor malých deformací. Izotropní tenzorové funkce, věta o reprezentaci izotropních tenzorových funkcí.

- (b) Dynamika kontinua  
Bilanční rovnice (hmota, hybnost, moment hybnosti, celková energie, vnitřní energie, entropie) v prostorovém i materiálovém popisu. Integrální tvar bilančních rovnic, princip lokalizace. Cauchyho tenzor napětí, první Piolův–Kirchhoffův tenzor napětí, Piolova transformace. Formulace bilančních rovnic v neinerciální vztažné soustavě.
- (c) Jednoduché konstitutivní vztahy  
Stlačitelná a nestlačitelná Navierova–Stokesova–Fourierova tekutina (viskózní tepelně vodivá tekutina), stavová rovnice ideálního plynu. Geometrická linearizace, linearizovaná teorie pro elastické pevné látky. Okrajové podmínky, okrajové podmínky pro posunutí a napětí.
- (d) Nenewtonské tekutiny  
Bilanční rovnice termodynamiky kontinua v případě nenewtonovských tekutin, identifikace produkce entropie. Clausiova–Duhemova nerovnost. Předpoklad maximalizace rychlosti produkce entropie a jeho využití pro návrh matematických modelů pro tekutiny, pojem přirozené konfigurace. Přehled nenewtonovských jevů – závislost viskozity na symetrickém gradientu rychlosti a tlaku, rozdíl normálových napětí, aktivační/deaktivační kritéria, relaxace napětí (stress relaxation), tečení (non-linear creep). Princip objektivnosti a jeho důsledky, objektivní veličiny v mechanice tekutin, objektivní časová derivace. Využití věty o reprezentaci izotropních tenzorových funkcí. Přehled nejpoužívanějších materiálových modelů pro nenewtonské tekutiny. Tekutiny mocninného typu, tekutiny s viskozitou závislou na tlaku, tekutiny Binghamova typu. Viskoelastické tekutiny a zjednodušené modely typu pružina–tlumič. Kortewegovy tekutiny.
- (e) Pevné látky  
Princip objektivnosti a jeho důsledky, objektivní veličiny v mechanice pevných látek. Elastické materiály v teorii konečných deformací, linearizovaná teorie. Nestlačitelné materiály v teorii konečných deformací a v linearizované teorii. Elastický materiál jako materiál, který neprodukuje entropii, souvislost mezi tenzorem napětí a volnou energií. Hyperelastický materiál, příklady hyperelastických materiálů, chování vzhledem k determinantu deformačního gradientu. Variační formulace statické úlohy pro hyperelastický materiál. Viskoelastické pevné látky – Kelvinův–Voigtův model – a zjednodušené modely typu pružina–tlumič.
- (5) **Molekulární dynamika** Zkoušená látka je probírána zejména v přednáškách Simulace ve fyzice mnoha částic, Pokročilé simulace ve fyzice mnoha částic a Počítačové modelování ve fyzice plazmatu I. Předpokládá se, že se student velmi dobře orientuje v základech statistické fyziky na úrovni přednášky Termodynamika a statistická fyzika II.
  - (a) Základy statistické fyziky  
Statistický popis termodynamiky. Liouvilleova rovnice. Základní statistické soubory, mikrokanonický, kanonický a velký kanonický soubor. Kvantová statistická mechanika. Maxwellovo–Boltzmannovo, Fermiho–Diracovo a Boseovo–Einsteinovo rozdělení. Základní vztahy statistické mechaniky pro simulace (výpočet termodynamických veličin, egodický teorém) a role numerických simulací.
  - (b) Základy simulace fyzikálních systémů metodou Monte Carlo  
Základy metody Monte Carlo (integrace metodou MC, Markovovy řetězce, chyba MC integrace). Realizace Monte Carlo kroku (prosté a přefreční vzorkování, Metropolisova metoda). Metody generování pseudonáhodných čísel. MC simulace diskrétních modelů (Isingův model, práh perkolace). MC simulace jednoduchých modelů kapalín.
  - (c) Základy molekulární dynamiky  
Princip metody molekulární dynamiky. Pohybové rovnice klasického mnohočásticového systému. Interakční potenciály a okrajové podmínky. Simulace v různých statistických souborech – NVE, NVT, NPT, grandkanonický.
  - (d) Určování termodynamických a strukturních vlastností ze simulací  
Výpočet měrného tepla a susceptibility pomocí fluktuací. Radiální distribuční funkce.
  - (e) Pokročilé metody simulace mnoha částic  
Fázové přechody a kritické jevy. Fázové a reakční rovnováhy. Simulace procesů růstu. Kvantové simulace. Výpočet kinetických koeficientů. Kinetické Monte Carlo. Určování energetických bariér užitím molekulární statiky. Optimalizační metody.
  - (f) Základy modelování fyziky plazmatu  
Charakteristika a typy plazmatu. Kvazineutralita plazmatu, Debyeova stínící vzdálenost. Teoretický popis plazmatu, kinetický popis, Boltzmannova rovnice, zákony zachování, magnetohydrodynamický popis.
- (6) **Kvantové systémy** Zkoušená látka je probírána zejména v přednáškách Quantum scattering theory a Theory of collisions of atoms and molecules. Předpokládá se, že se student velmi dobře orientuje v základech kvantové na úrovni přednášek Kvantová mechanika II (NTMF067) or Kvantová mechanika II (NJSF095) nebo Kvantová teorie II a přednášek jim předcházejících.

- (a) Základy kvantové mechaniky  
Popis stavů a měřitelných veličin. Operátory, komutační relace. Časový vývoj v kvanové mechanice. Popis měření. Stacionární stavy a integrály pohybu.
- (b) Řešitelné systémy  
Částice v potenciálové jámě, lineární harmonický oscilátor, coulombické pole.
- (c) Moment hybnosti a spin  
Definice momentu hybnosti, spektrum a vlastní funkce. Skládání momentů hybnosti, Clebschovy-Gordanovy koeficienty. Vektorové a tenzorové operátory, ireducibilní složky a Wignerova-Eckartova věta.
- (d) Základní přibližné metody  
Variační metoda a poruchový počet. Systémy mnoha částic: symetrizační postulát, bosony, fermiony, Slaterův determinant, vliv spinu.
- (e) Teorie rozptylu  
Mollerovy operátory a S-matice. Účinný průřez. Časově nezávislá formulace rozptylu, Lippmannova-Schwingerova rovnice. Póly S-matice a vlastní fáze. Základy mnohokanálové teorie rozptylu.
- (f) Základní metody mnohočásticové kvantové fyziky  
Metoda středního pole, korelační energie a metody pro její výpočet, druhé kvantování. Základy teorie atomů a molekul: elektronová struktura, vibrační a rotační stavy molekul, použití teorie grup, optické přechody.
- (g) Výpočetní metody teorie rozptylu  
Rozvoj do parciálních vln. Bornova řada. Variační principy. Teorie R-matice.
- (7) **Obecná teorie relativity** Zkoušená látka je probírána zejména v přednáškách Obecná teorie relativity, Relativistická fyzika I a Základy numerického studia prostoročasu.
  - (a) Výchozí principy speciální a obecné teorie relativity  
Prostoročas, čtyřrozměrný formalismus, transformace souřadnic. Metrika, afinní konexe, kovariantní derivace. Paralelní přenos a rovnice geodetiky. Posun frekvence v gravitačním poli. Lieova derivace a Killingovy vektory, tenzorové hustoty. Integrovaní na varietách (hustoty, integrální věty). Křivost prostoročasu.
  - (b) Einsteinův gravitační zákon a jeho důsledky  
Tenzor energie a hybnosti, zákony zachování a pohybové rovnice. Einsteinovy rovnice gravitačního pole. Schwarzschildova a Reissnerova-Nordströмова metrika. Kerrova a Kerrova-Newmanova metrika.
  - (c) Relativistická astrofyzika a kosmologie  
Relativistické modely hvězd. Gravitační kolaps a černé díry. Kritické chování gravitačního kolapsu. Relativistická kosmologie, FLRW modely.
  - (d) Vlastnosti Einsteinových rovnic  
Linearizovaná teorie gravitace a rovinné gravitační vlny. Lagrangeovský formalismus v obecné relativitě, zákony zachování. Hamiltonovský formalismus v obecné relativitě, počáteční problém. Konformní rozklad rovnic vazeb, počáteční data. Einsteinovy rovnice jako hyperbolický systém parciálních diferenciálních rovnic.
- (8) **Částicová fyzika** Zkoušená látka je probírána zejména v teoreticky zaměřené přednášce Fyzika elementárních částic, praktické výpočetní aspekty jsou probírány zejména v přednáškách Software a zpracování dat ve fyzice částic II, Neuronové sítě v částicové fyzice.
  - (a) Základní představy a metody kvantové teorie pole  
Rovnice relativistické kvantové mechaniky. Kvantování volných polí. Interakce polí, Feynmanovy diagramy.
  - (b) Klasifikace a vlastnosti elementárních částic  
Leptony, hadrony a nositelé interakcí. Spin, parita, nábojová parita, podivnost, izospin. Zákony zachování.
  - (c) Struktura hadronů  
Kvarkový model, barva, partony, distribuční funkce.
  - (d) Základy standardního modelu elementárních částic  
Elektroslabé interakce. Higgsův mechanismus. Kvantová chromodynamika.
  - (e) Interakce částic s prostředím a metody měření částic v experimentech  
Měření energie, hybnosti a doby letu částic. Identifikace částic. Monte Carlo simulace průchodu částic detektorem.
  - (f) Metody analýzy dat v experimentech fyziky částic  
Softwarové nástroje. Výběrová pravidla a multivariační analýza. Neuronové sítě.

#### 4. KONTAKT

V případě nejasností se prosíme obraťte na Martina Čížka (cizek@mbox.troja.mff.cuni.cz) nebo na Vítka Průšu (prusv@karlin.mff.cuni.cz). Těšíme se na vás u státní závěrečné zkoušky a doufáme, že nás potěšíte tím, co všechno jste se během studia naučili!