

Státní závěrečné zkoušky programu **Datové inženýrství v chemii**

Organizace a průběh

Státní závěrečné zkoušky (dále jen SZZ) magisterského studijního programu [Datové inženýrství v chemii](#) se řídí aktuálně platným [Studijním a zkušebním řádem VŠCHT Praha](#) a skládají se z obhajoby diplomové práce a ústní části.

Při obhajobě diplomové práce student přednese teze diplomové práce, vyjádří se k posudkům práce a diskutuje o své práci se členy zkušební komise. V ústní části **SZZ** se prověří znalosti studenta tím, že student odpovídá na otázky členů zkušební komise nejméně ze čtyř tematických okruhů (**jeden povinný a tři volitelné**) v souladu se schválenou akreditací magisterského studijního programu:

Povinné okruhy

TO1 Měření a zpracování dat v chemii

Volitelné okruhy

TO2 Chemická termodynamika

TO3 Kvantová chemie

TO4 Molekulové modelování a simulace

TO5 Chemická kinetika

TO6 Strojové učení a umělá inteligence v chemii

Náplň tematických okruhů

TO1 Měření a zpracování dat v chemii

(vychází z předmětů M444006 Měřicí technika, M402018 Analytická chemometrika, M445002 Číslíkové zpracování signálů a obrazů)

Skladba měřicího řetězce. Statické a dynamické vlastnosti měřicích přístrojů. Snímače teploty dotykové a bezdotykové. Snímače tlaku. Snímače hladiny. Snímače průtoku a proteklého množství. Měření množství tepla. Snímače složení kapalin a plynných směsí. Optické absorpční analyzátory. Magnetické analyzátory. Ionizační analyzátory. Odběr a úprava vzorku pro automatické analyzátory. Analogové a číslíkové zpracování signálu snímačů (měřicí můstky, operační zesilovače, převodníky).

Náhodná veličina a její charakterizace, číselné charakteristiky rozdělení, normální rozdělení a jeho standardizace, náhodný výběr a jeho realizace, bodové a intervalové odhady parametrů základního souboru, testování hypotéz (chyba I. a II. druhu, síla testu, volba hypotézy), parametrické testy středních hodnot a rozptylů, vylučování odlehlých výsledků, neparametrické testy středních hodnot, analýza rozptylu, faktoriální pokusy, optimalizace

experimentu, kontingenční tabulky, regresní a korelační analýza, kalibrace analytické metody, nejistoty měření.

Matematický popis systémů a signálů. Z-transformace, základní definice a vlastnosti, řešení diferenčních rovnic. Popisy systémů v časové a frekvenční oblasti. Diskrétní přenos. Stabilita systémů. Analýza signálů. Diskrétní Fourierova transformace, definice, složkové vyjádření, základní vlastnosti, spektrální analýza, frekvenční charakteristiky, výběrová okénka, krátkodobá DFT, interpretace při analýze vícerozměrných dat, princip FFT.

TO2 Chemická termodynamika

(vychází z předmětu M403018 Chemická termodynamika)

Stavové chování čistých tekutin, kritické veličiny a jejich odhady. Stavové rovnice pro reálné tekutiny, teorém korespondujících stavů. Stavové chování reálných směsí, viriální stavová rovnice, odhady viriálních koeficientů. Termodynamické vlastnosti látek, výpočty tepla a práce při různých dějích. Doplnkové veličiny a jejich použití. Termodynamické vlastnosti složek ve směsi, dodatkové veličiny. Aktivita a aktivní koeficienty. Rovnováhy kapalina-pára, kapalina-kapalina, kapalina-pevná fáze. Rozpustnost plynů v kapalinách. Chemická rovnováha v jednoduchých a složitých systémech.

TO3 Kvantová chemie

(vychází z předmětu M403001 Kvantová chemie)

Schrödingerova rovnice, operátory fyzikálních veličin, atom vodíku a víceelektronové atomy, elektronový spin a Pauliho vylučovací princip, výpočty vlastností molekul, Bornova–Oppenheimerova aproximace, Hartreeho–Fockova metoda, metody výpočtů zahrnující korelační energii, semiempirické metody, Hückelova metoda a modernější přístupy, relativistické efekty, mezimolekulové interakce, modelování kondenzované fáze, elektronově excitované stavy.

TO4 Molekulové modelování a simulace

(vychází z předmětu M403002 Statistická termodynamika, molekulové modelování a simulace)

Klasické molekulární modelování, síly mezi molekulami, silové pole. Molekulová mechanika, okrajové podmínky, výpočet dlouhodosahových sil. Molekulární dynamika: integrátory, integrály pohybu. Termostat a barostat. Monte Carlo: Markovův řetězec, Metropolisův algoritmus, kinetické MC. Počítačový experiment: Návrh experimentu, měření veličin v simulacích, zpracování naměřených dat, stanovení nejistot.

TO5 Chemická kinetika

(vychází z předmětu M403005 Kinetika chemických a fotofyzikálních dějů)

Základní pojmy chemické kinetiky. Experimentální metody chemické kinetiky (vsádkový, průtokový a trubkový, studium rychlých reakcí). Kinetická analýza homogenních reakcí. Řešení komplexních kinetických schémat. Chemická kinetika a reakční mechanismus: základní principy, řetězové reakce, exploze, oscilační reakce. Koncept katalýzy: kinetika enzymových reakcí, reakce v roztocích (rozpuštědlo jako katalyzátor), základy fotochemie (foton jako katalyzátor). Teorie chemické kinetiky: srážková teorie, teorie tranzitního stavu.

TO6 Strojové učení a umělá inteligence v chemii

(vychází z předmětů M445024 Strojové učení v Pythonu, M445004 Neuronové sítě, M445014 Aplikovaná umělá inteligence)

Normalizace dat. Umělé neuronové sítě (matematický model neuronu a sítě, aktivační funkce). Typy učení neuronových sítí, metody optimalizace vah, metrika, ztrátová funkce, gradient, trénovací a testovací množiny dat. Kapacita neuronové sítě, overfitting, underfitting, regularizace neuronových sítí. MLP, konvoluční sítě, současné architektury a modely neuronových sítí (pro zpracování textu a obrazu). Samoorganizující se mapy. Support vector machine (SVM). Algoritmus k-nejbližších sousedů. Shluková analýza. Rozhodovací stromy. Validace a vyhodnocování přesnosti klasifikace.

Nástroje a metody umělé inteligence. Inteligentní agenty (architektura, dělení, základní pojmy). Reprezentace znalostí, výroková a predikátová logika, odvozování znalostí, neurčitost ve znalostech a odvozování. Expertní a produkční systémy, znalostní řídicí systémy. Fuzzy modely, pravidla usuzování a fuzzy řízení. Programovací jazyky umělé inteligence.