

TÉMAVÁZLAT 1-4. ÓRA

Kémiai Számítástechnika Gyakorlat (1), Kémia BSc I. évf. 2016/2017 I. félév

LINUX ALAPISMERETEK

Linux rendszer: 3.124 terem (régí Windows elérhető), közös azonosító a két rendszeren, NEPTUN-os jelentkezések lezárása után kapják meg.

több felhasználós operációs rendszer: azonosító, jelszó, könyvtárak, 'home' könyvtár

<i>pwd</i>	aktuális könyvtár kiírása
<i>ls (-l -a)</i>	listázás (hosszú listában mi mit jelent, rejtett fájlok)
<i>vi</i> fájlnev	fájl létrehozása a <i>vi</i> szerkesztővel, parancsmód, beíró mód, pár alap

jelentés: r, R, a, A, i, I, o, O, dd, x, pp, Esc, :q!, :w!

fájlok elérése, névkonvenciók, korlátozott: olvasás, írás, futtatás

<i>chmod (ugo)+x(rw) fájlnev</i>	fájl hozzáféréseinek beállítása
<i>cd ..</i> <i>cd /home/hallgato/tanf1</i>	könyvtár váltása (könyvtár határoló /)
<i>mkdir</i>	könyvtár nyitás
<i>cp név1 név2 (. ../ -r)</i>	másolás (név2 helyett mi lehet, relatív utalások, -r kapcsoló)
<i>*</i> , <i>?</i> , <i>[0-9]</i> , <i>[78]</i> , <i>[a-z]</i> , <i>[fh]</i>	karakterek helyettesítése
<i>mv név1 név2</i>	átnevezés, mozgatás
<i>rm (-r) fájlnev</i>	törlés
<i>man parancsnév, info</i>	súgó (<i>ctrl/f</i> , <i>ctrl/b</i> , <i>q</i>) mozgás a szövegben
<i>exit</i>	kilépés
<i>startx</i>	grafikus környezet elindítása
terminálablak, fájlkezelő megnyitása, szöveges fájl szerkesztése	
<i>cat, more fájlnev</i>	fájl kiírása a képernyőre
<i>w, who</i>	bejelentkezettek listázása
<i>ctrl/c</i> leállítás	<i>ctrl/d</i> vészleállítás <i>clear</i> képernyő törlése
<i>passwd</i>	jelszó változtatása (általában, itt más)
<i>lpr fájlnev</i>	nyomtatás (nyomtató megadása)
<i>&</i> a parancs végére	háttérben fut (pl. <i>xclock&</i>)
<i>></i> output átirányítása (<i>>></i> hozzáírás) (<i><</i> olvasás)	
<i>ps (-l)</i> , <i>top</i> , <i>pstree</i>	futó programok, shellek, PID, PPID számok
<i>kill -9 PID szám</i>	program leállítása
<i>grep (-i -v -c) 'kakas' fájlnev</i>	kakast tartalmazó sorok kiírása
<i>ssh</i>	bejelentkezés más gépre
<i>sftp</i>	fájlok átvitele más gépre
<i>rdesktop</i>	bejelentkezés a Windows-szerverre (kb. távoli asztal)

EXCEL ALAPISMERETEK

Microsoft Office része, táblázatkezelő program (magyar változat) – Linuxos: Libre Office Calc

Munkafüzet, munkalap (váltás egérrel, jobb gomb menüi)

Cellák kitöltése adatokkal (szöveg/szám formátum) (123.123 123,123 , a tizedes határoló, 1,3e-4)

Cellák kitöltése más cellákon végzett műveletekkel $=a12*\cos(\$b12)$

hivatkozás az egyik cellában a másik cellára -

abszolút $\$a\12 , relatív $a12$ - vegyes $\$a12 a\12

Beszúrás / Függvény

Cellák, oszlopok, sorok, munkalap kijelölése egérrel

Kijelölt cellák mozgatása a kereténél az egérrel megfogva

speciális sokszorozása az alsó saroknál megfogva (számsorok előállítás)

jobboldali egérgomb menüi

ctrl/c, ctrl/x, ctrl/v és Szerkesztés/ Irányított beillesztés

(sok lehetőség, pl. transzponálás)

törlések, cellák formázása, oszlopok elrejtése

Feladat: p-T táblázat készítése ideális gáztörvényre a képlet csak egyszeri beírásával

Fájl/ Új munkafüzet

Megnyitás, Bezárás (nem EXCEL formátumú megnyitása is)

Mentés, Mentés másként

Oldalbeállítás, Nyomtatási kép, Nyomtatás

Szerkesztés / Visszavonás - Ismétlés

Beszúrás / Cellák, Sorok, Oszlopok, Munkalap, Diagram

Formátum/ Szegély és mintázat (táblázatok készítése)

Egyszerű adatbázis kezelése

kezdeti kitöltés (fejlécek, alá minimum egysornyi példa)

Adatok / Rendezés, Szűrő / Automatikus szűrő, Űrlap, Szövegből oszlopok

Feladat: Érettségi eredményekre táblázat, feltüntetve azt is, hogy szó- vagy írásbeli

Grafikon készítése

x és y mezők kijelölése egyben

Diagram (új lapra), x és y esetleges mezők módosítása

X-Y pont típusú grafikon választása (csak ez rendezi sorba az x értékeket!)

ábrázolási mód választása, jelmagyarázat, grafikoncím, tengelycím megadása (/mértékegység)

Grafikon javítása: kattintás a grafikonban a javítandó részre, majd a jobb egérgombbal előhozható egy menü. Más jó a képernyőn és más kinyomtatva!

Feladat: trigonometrikus függvények és polinomok ábrázolása (intervallum beállítása, esztétikus és tudományos helyen elfogadható forma, logaritmus skála...)

Hisztogram készítése, tömbfüggvények

Mi az a hisztogram? Esetleges normálás az összes esemény számával...

GYAKORISÁG – ctrl/shift/enter tömbfüggvény bevitelére (Windowsnál kikerülhetetlen)

Feladat: véletlenszámok generálása a vél() függvényvel, átskálázás 0-50 közé (Win: Adatok/ Adatelemzés / Véletlenszám-generálás funkcióval (Adatelemzés életre keltése a Bővítmenykezelővel)) és ábrázolása a felosztás közepére vonatkozó skálával

EGYENES ILLESZTÉSE

Egyenes illesztése legkisebb négyzetek módszerével

n darab x_i, y_i számpár esetén $y=f(x)=ax+b$ egyenes illesztésének egyenletei:

minimalizálandó célfüggvény (szélsőérték): $\sum (f(x_i) - y_i)^2$, a és b mint változók függvényében

$$a = \frac{\sum (x_i y_i - \bar{x} \bar{y})}{\sum (x_i x_i - \bar{x} \bar{x})} \text{ és } b = \bar{y} - a \bar{x}, \text{ ahol a felülvonás az } x_i \text{ és } y_i \text{ értékek átlagát jelenti}$$

reziduális (maradék): $r_i = y_i - f(x_i)$, ezeknek összege zérus

Origón átmenő egyenes esetén: $y=f(x)=ax$ és $a = \frac{\sum x_i y_i}{\sum x_i x_i}$

Legkisebb négyzetek módszerének grafikus szemléltetése

Illesztés grafikonon

mérési pontok esetében, ha az $y=f(x)$ függvény analitikus alakja vagy paraméterei nem ismertek, azok esetleges illesztése, valamint egy **adott x_0 értékhez y_0** meghatározása grafikon segítségével:

grafikon készítése

az illesztendő görbe kijelölése

Trendvonal beszúrása

illesztendő görbe kiválasztása

illesztett görbe egyenletének kiírása, esetleges átmásolása, és a keresett x_0 értéknél való kiszámítása

Feladat: Molekulatömeg meghatározása a tökéletes gáztörvényből:

(Griffiths-Thomas: Fizikai kémiai számítások, 3.6. példa)

Minden gáz tökéletes gázként viselkedik végtelen kis nyomáson és kellően magas hőmérsékleten. Ha a nyomás függvényében a sűrűség/nyomás értékét ábrázoljuk, és 0 nyomásra extrapolálunk, a kapott tengelymetszet kapcsolatba hozható a gáz molekulatömegével.

Elmélet:

$$pV=nRT$$

R moláris gázállandó

$$n=m/M$$

m a bemért tömeg, M a móltömeg

$$M=(mRT)/(pV)$$

$$m = \rho V$$

ρ a sűrűség

$$M = (\rho/p)RT$$

Ismeretlen AH_3 összetételű gázzal az alábbi értékeket mértük. Melyik az A elem?

Adatok:

p (Pa)	ρ/p ($\text{g/m}^3\text{Pa}$)
101300	0,015111
75975	0,015076
50650	0,015042
25325	0,015010

$$M_H = 1,008 \quad T = 273\text{K}$$

$$M_A = (\text{tengelymetszet} * 8,314 * 273) - 3 * 1,008$$

Feladat: a fenti feladat megoldása máshogy is (TREND, METSZ, MEREDEKSÉG, LIN.ILL függvényekkel)

Feladat: Hűlési sebesség számítása: 10 másodpercenként lett leolvasva a rendszer hőmérséklete.

t/s	0	10	20	30	40	50	60	70	80
T/K	366	364	357	351	348	341	336	333	327

Mi lehet a hűlési sebesség dimenziója? Mi a függő és mi a független változó? Az illesztett egyenes alapján mennyi volt a rendszer hőmérséklete 33 s-kor? 120 másodperckor? A mérés megkezdése előtt 1 perccel!?

Feladat: Hűlési sebesség számítása, 10 fokonként lett rögzítve az eltelt idő.

t/s	0	8	18	30	42	53	58	72	87
T/K	500	490	480	470	460	450	440	430	420

Mi a függő és mi a független változó? Hogyan illeszthető rá egyenes? Átmenjen-e az origón az illesztett egyenes? Műszeres mérési analógiák, kalibráció. Lehetőségek: a) $x=t, y=T, v=a$ b) $x=T, y=t, v=1/a \dots$

Számítsuk ki az összes (jó és rossz) meredekséget! Mi az eredmény, ha egyre több középső pontot kihagyunk az illesztésből? Illeszthetjük-e az egyenest a $t_{i+1}-t_i$ változásokra $x_i=10\text{ K}$ értékekkel?

KOMBINATORIKAI ISMÉTLÉS A VALÓSZÍNŰSÉGSZÁMÍTÁSHOZ

Javasolt könyv: Solt György: Valószínűségszámítás (Bolyai-sorozat, Műszaki Könyvkiadó)

Permutáció

$P_n = n!$ n elem hányféleképpen rakható sorba

$$n! = 1 * 2 * 3 * \dots * n \quad 0! = 1$$

Feladat: 8 vizsgázó sorrendje $\rightarrow 8!$

Ismétléses permutáció

k_1 egyforma + k_2 egyforma +

$$P_n^{k_1, k_2, k_3, \dots} = \frac{n!}{k_1! k_2! k_3! \dots}$$

Feladat: Hány különböző hatjegyű szám képezhető ezekből: 2,2,2,3,3,4?

Feladat: Hány olyan különböző hatjegyű szám létezik, ahol a 3. jegy 3-as és egyik számjegy se szerepelhet egynél többször?

Feladat: Hány lehetséges nemenkénti elrendezés lehetséges, ha 6 férfi és 5 nő áll sorba?

Kombináció

n -elem k -ad osztályú kombinációja = n elemből hányféleképpen tudunk k elemet kiválasztani, ha a sorrend nem fontos

$$C_n^k = \frac{n!}{k!(n-k)!} = \binom{n}{k}$$

Feladat: Maximálisan hány lehetséges síkot határoz meg 10 pont? Miért maximálisan a kérdés? Hány maximálisan lehetséges sík van, ha a pontokból 4 egy síkba esik? Mikor teljesül itt a maximális szám?

Feladat: 9 embert osztanak be 4 méréshez, mindegyikhez kettő kerül az elsőt kivéve, ahová három. →

$$\binom{9}{3} \binom{6}{2} \binom{4}{2} \binom{2}{2} \text{ Miért szorozzuk a kombinációkat?}$$

És ha a 9-ből 4 fiú van, akik nem kerülhetnek azonos csoportba?

Ismétléses kombináció

egy-egy elemet többször is kiválaszthatok (visszatevéses – visszamegy a kiválasztott)

$$C_n^{k, \text{ismétléses}} = \binom{n+k-1}{k}$$

Feladat: 20 utas van a villamoson, kétszer jön az ellenőr. Hány fajta ellenőrzés lehetséges, ha az ellenőr egy

alkalommal csak egy főt ellenőriz? → $C_{20}^{2, \text{ismétléses}} = \binom{20+2-1}{2}$

Feladat: Hány fajta szavazati arány lehetséges, ha 3 jelöltre 20 fő szavaz és mindenki csak egy főre

szavazhat? → $C_3^{20, \text{ismétléses}} = \binom{3+20-1}{20}$ Alul van a kisebb szám!

Variáció

= kombináció, de a sorrend is számít

$$V_n^k = C_n^k P_k = \binom{n}{k} k! = \frac{n!}{(n-k)!}$$

Feladat: 10 emberből 4-et választunk ki. Hány lehetséges eredmény van, ha a kiválasztás sorrendje is számít?

Ismétléses variáció

k alkalommal választunk n elemből, ismételhető a választás, de a sorrend is számít

$$V_n^{k, \text{ismétléses}} = n^k$$

Feladat: Hányféleképpen lehet kitölteni a Toto szelvényt? (13+1 meccs, 1,2,X lehetőségek) → 3^{14}

Feladat: Hányfajta lehetséges sorozat van, ha 5 szabályos dobókockával való dobáskor 1 db 1-es és 1 db 2-es van a dobások között? $\rightarrow V_5^2 V_4^{3,ismétléses}$

$p = (\text{kedvező esetek száma})/(\text{összes esetek száma})$

Gyakori eset: az összes lehetőség megvalósulásának az esélye azonos, és az a kérdés, hogy mennyi a „valószínűsége” az adott lehetőségek egy halmazának.

Feladat: Mekkora a valószínűsége, hogy 5-ös Lotto-n egy találatunk sincs? $\rightarrow \frac{\binom{85}{5}}{\binom{90}{5}}$

Feladat: Mekkora a valószínűsége, hogy 5-ös Lotto-n két találatunk van? $\rightarrow \frac{\binom{85}{3} \binom{5}{2}}{\binom{90}{5}}$

Feladat: Mekkora a valószínűsége, hogy 6-os Lotto-n 6 találatunk van? 45 számból 6-ot húznak.

Feladat: Szabályos pénzérme háromszori feldobásakor mindig fej jön ki?

Feladat: Szabályos kocka kétszeri feldobásakor az összeg 7? Az összeg 8?...(Pl. Catan telepesei játék)

További gyakorló feladatok:

Hány olyan nyolcjegyű szám írható fel az 1, 1, 1, 2, 3, 3, 3, 3 számjegyekből, amelyik 13-mal kezdődik?

Kétféle morzejelből (pont és vonal) hányféle 5-ös sorozat hozható létre?

Egy társaságban 5 lány és 7 fiú van, hányféleképpen alakulhat ki az 5 táncoló fiú-lány pár?

megoldás: $\binom{5}{5} \binom{7}{5} 5!$

Hányféleképpen olvashatjuk ki a MATEMATIKA szót az alábbi ábrán, ha a bal felső sarokból indulunk és jobbra vagy lefele lépkedhetünk egyesével?

M A T E M
A T E M A
T E M A T
E M A T I
M A T I K
A T I K A

megoldás: $9!/(4!5!)$

Minek nagyobb a valószínűsége, hogy három dobás összege 12, vagy két dobásé 8?