TÉMAVÁZLAT 1-3. ALKALOM

Kémiai Számítástechnika Gyakorlat, Kémia BSc I. évf. 2018/2019 I. félév

LINUX ALAPISMERETEK

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

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

pwd	aktuális könyvtár kiíratása
ls (-l -a)	listázás (hosszú listában mi mit jelent, rejtett fájlok)
vi fájlnév	fájl létrehozása a *vi* 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

chmod (ugo)+x(rw) fájlnév	fájl hozzáférésének beállítása
cd .. *cd* /home/hallgato/tanf1	könyvtár váltása (könyvtár határoló /)
mkdir	könyvtár nyitás
cp név1 név2 (. ../ -r)	másolás (név2 helyett mi lehet, relatív utalások, -r kapcsoló)
*, ?, [0-9],[78], [a-z],[fh]	karakterek helyettesítése
mv név1 név2	átnevezés, mozgatás
rm (-r) fájlnév	törlés
man parancsnév, info	súgó *(ctrl/f, ctrl/b, q)* mozgás a szövegben
exit	kilépés
startx	grafikus környezet elindítása

terminálablak, fájlkezelő megnyitása, szöveges fájl szerkesztése

cat, *more fájlnév*	fájl kiíratása a képernyőre
w, who	bejelentkezettek listázása
ctrl/c leállítás	*ctrl/d* vészleállítás *clear* képernyő törlése
passwd	jelszó változtatása (általában, itt más)
lpr fájlnév	nyomtatás (nyomtató megadása)
& a parancs végére	háttérben fut (pl. *xclock&*)

> output átirányítása (>> hozzáírás) (< olvasás)

ps (–l), top, pstree	futó programok, shellek, PID, PPID számok
kill -9 PID szám	program leállítása
grep (-i –v –c) 'kakas' fájlnév	kakast tartalmazó sorok kiíratása
ssh	bejelentkezés más gépre
sftp	fájlok átvitele más gépre
rdesktop	bejelentkezés a Windows-szerverre (kb. távoli asztal)

EXCEL ALAPISMERETEK

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

Munnkafüzet, 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 a12, 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 előállítása)

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, logaritmikus 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() függvénnyel, átskálázás 0-50 közé (Win: Adatok/ Adatelemzés / Véletlenszám-generálás funkcióval (Adatelemzés életre keltése a Bővítménykezelővel)) és ábrázolása a felosztás közepére vonatkozó skálával

TUDOMÁNYOS KOMMUNIKÁCIÓ - ALAPISMERETEK

Szakmai önéletrajz

Többnyire tételes stílus, minták: Word, Europass Curriculum Vitae ...

Személyes adatok, Munkahelyek-Alkalmazások, Tanulmányok-Iskolák-Képzettségek, Nyelvismeret, Kutatási tapasztalat-ösztöndíjak-tanulmányutak, Oktatási tapasztalatok, Egyéb szakmai munka - szervezetek, Kitüntetések-elismerések, egyedi érdekességek (+publikációs lista)

Szerkesztési finomságok

A szöveg a lényeg, nem a betű!

Times New Roman, Ariel, `Courier (egyenletes)`

Szerkesztési jelek ki és bekapcsolásával ellenőrizhető:

Lágy elválasztójel: ctrl/-(nem numerikus)	labda
Nem törhető szóköz: ctrl/shift/szóköz, alt(bal oldali)/0160	8 Ft
Nem törhető kötőjel: ctrl/shift/- (nem numerikus)	lehet-e
Gondolatjel: ctrl/- (numerikus), alt(bal oldali)/0150	–
Idézőjel: alt(bal oldali)/0132 és alt(bal oldali)/0148	„ ”
Fok: alt(bal oldali)/0176	°

További részletek az érdeklődőknek: www.chem.elte.hu/toth/kemsz_bsc/BetuIrasGeppel.doc

Egyenletek szerkesztése

Beszúrás/Objektum/Microsoft Equation

Fizikai mennyiség - változó: dőlt betű, Vektor: vastag betű, vagy aláhúzás, Mátrix: nagybetű, Index: többnyire normál betű, Állandók, matematikai jelek, mértékegységek: többnyire normál betű, Egyenletek számozása (ha hivatkozunk rá)

Hivatkozások

Kézzel, vagy lábjegyzet szerkesztésével (vannak kész programok is), sok formai lehetőség, az alábbiak csak példák (pl. cím bevétele szakdolgozatnál, doktori disszertációnál ajánlott):

A szövegben a hivatkozás számmal vagy zárójelben a szerzőkkel: *a korábbi számolások alapján*[23] [23] (Kovács 1924; Kovács és Nagy, 1923; Kovács et al. 1925a) (időben a legrégebbi először, szám szerint növekedve)

Az irodalom felsorolásánál:

[1] Hill, T. L. 1956 *Statistical Mechanics* (New York, McGraw-Hill)

[2]Metropolis, N.; Rosenbluth, A. W.; Rosenbluth, M. N.; Teller, A. N. and Teller, E. 1953 *J. Chem. Phys.* **21** 1087.

[3] Alder, B. J. and Wainwright, T. E. in *Proceedings of the International Symposium on statistical mechanical theory of transport processes Brussels 1956* (ed. Prigogine, I.) 1958 p. 97-131. (Wiley, New York)

[4] WEB of Science (http://isiknowledge.com accessed at August 2006)

Dolgozatok

Példa - rövidebbeknél más a szerkezet

Szaklaboratóriumban végzett szakirodalmi és/vagy kísérleti és/vagy elméleti munkán alapuló írásos anyag, amely a témavezető személyén keresztül tanszékhez kötődik.

Formai elvárások:

Teljes terjedelme: 25-50 oldal. - A4 méretű oldalak, másfeles sorközzel, 12 pontos betűmérettel, 2,5 cm-es alsó, felső és oldalsó margók. - 25 oldalnál kisebb terjedelmű szakdolgozat nem fogadható el, 50 oldal felett pontlevonás járhat. Ha a függelék a megértéshez fontos és hasznos részletes adatokat, kiegészítő eredményeket, ábrákat tartalmaz, annak oldalszáma nem korlátozott, azért pontlevonás nem jár. - A dolgozat szerkezete nem szigorúan kötött, de meg kell felelnie az adott szakterület dokumentációs elvárásainak. Javasolt formai felépítés: Címlap; Köszönetnyilvánítás; Tartalomjegyzék; Bevezetés; Irodalmi áttekintés; A munka előzményeinek áttekintése, Célkitűzések; Saját munka ismertetése; Eredmények, Eredmények értékelése és következtetések; Egy-egy oldalas magyar és angol nyelvű összefoglaló; Irodalomjegyzék; A dolgozat eredetiségére vonatkozó „Nyilatkozat" (letölthető a Tanulmányi Osztály honlapjáról). (A Nyilatkozatot minden esetben a szakdolgozat végére, az Irodalomjegyzék után köttessék be.) Címlap, összefoglalók formája kötött.

Ábrák - táblázatok

Pl. EXCEL-ből megfelelő formában, a grafikus megoldások kisebb méretűek (Szerkesztés/Irányított beillesztés), Ábra (alatta) és táblázatfeliratok (felette), számozásuk

Szakmai cikk szerkezete

Title / Author / Affiliation / Abstract / Introduction / Theory-Experiments-Calculation details / Results / Discussion / Conclusion / Acknowledgment / References / Tables / Figure captions / Figures

Internetes források

http://www.eisz.hu: Web of Science (keresések, hivatkozásra is), Science Direct

Könyvtári elérhetőségek: www.oszk.hu (nemzeti periodika adatbázis=NPA fül jobbra, felső keresőhely)

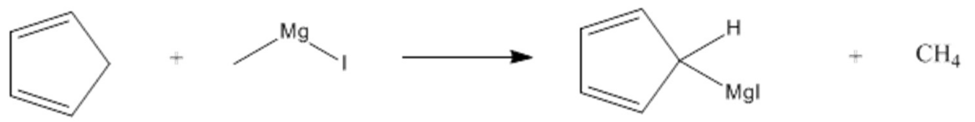
Előfizetett újságok: pl. www.aps.org, www.aip.org. www.acs.org

www.webelements.com

további forrásokra keresés

Kémiai képletek és ábrák készítése a Chem Office programcsomaggal (hallg-app2 gépen)

Chem Draw Ultra: egyszerű szerkezetek bevitele, módosítása, View menü pontjai, reakció ábrázolása, nyilak, töltések, név és szerkezet azonosítása, beépített tutorial. Példa elkészítése:



Chem 3D Ultra: térbeli szemléltetés, párhuzamosan 1D és 3D ablakban való munka, forgatás, megjelenítési módok, Calculation/MM2/Energia minimalizálás, név/SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System) kód beírása (lineáris kód, zárójelben az elágazások, további kötési helyek számmal jelölve, = kettős ill, # hármas kötés, szögletes zárójelben további elemek, . nem kovalens kötés, kis c aromás szén) Példa: C1=CC=CC1[Mg][I]

Keresés kémiai adatbázisban

Chem Finder Ultra

Adatbázis megnyitása Open : ISICCR (c:/Program Files/cambridgesoft/chemfinder/samples)

Enter Query: bevitel Chem Draw-ból, aztán Find

Chem Office: próba verzió letölthető www.cambridgesoft.com (illegális megoldások…)

Beadandó házi feladat

Minimum 2,5 maximum 3 oldalas dolgozat készítése rövid szakmai cikknek megfelelő formában (Times New Roman betűtípus, 11-es betűméret, 1,5-ös sorköz) egy tetszőleges vegyületről, vegyület csoportról, vegyészeti eljárásró. Pl. vegyületek estén szerepelhetnek benne: tulajdonságai, felfedezése-története, fő reakciói, érdekességei. A dolgozat tartalmazzon legalább 1-1 reakcióegyenletet, ábrát, táblázatot és megfelelő formában hivatkozásokat (min. 2 szakmai cikk + min. 2 könyv + min. 1 internetes oldal). A dolgozat a rövid szakmai cikknek megfelelő tagolású legyen (cím, szerzők, szerzők munkahelye és elérhetősége, absztrakt vagy kiemelt kezdőbekezdés, irodalmi áttekintés-szakmai rész kellő terjedelemben, összefoglalás, hivatkozások) A dolgozatot nyomtatott formában kell az őszi szünet utáni első foglalkozás elején a gyakorlatvezetőnek leadni.

A dolgozat késedelmes leadása esetén hetenként 25 %-kal csökken a rá kapható legjobb értékelés! Az értékelés főleg formai szempontok alapján történik.

Valószínűségszámítási alapismeretek kémiai alkalmazásokkal

A téma önállóan, az ajánlott irodalom alapján elsajátítandó. A gyakorlat során csak egy-egy kiemelten fontos elméleti rész illetve egy-egy típuspélda lesz tárgyalva.

Ajánlott irodalom: Solt György: Valószínűségszámítás (Bolyai-sorozat, Műszaki Könyvkiadó)

A következő fejezetek kivételével a teljes könyv anyaga szerepelhet a számonkérésben. Tehát a kimaradó fejezetek: "A Maxwell-Boltzmann, a Bose-Einstein és a Fermi-Dirac statisztika", "Negatív binomiális eloszlás és geometriai eloszlás" és "A nagy számok Bernoulli-féle törvénye".

KOMBINATORIKAI ISMÉTLÉS A VALÓSZÍNŰSÉGSZÁMÍTÁSHOZ

Permutáció

$P_n = n!$ n elem hányféleképpen rakható sorba

$n! = 1*2*3*\ldots*n$ $0! = 1$

Feladat: 8 vizsgázó sorrendje → 8!

Ismétléses permutáció

k_1 egyforma + k_2 egyforma + …. $$P_n^{k_1,k_2,k_3\ldots} = \frac{n!}{k_1!k_2!k_3!\ldots}$$

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. →

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

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

<u>Ismétléses kombináció</u>

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

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

Feladat: 20 utas van a villamoson, kétszer jön az ellenőr. Hány fajta ellenőrzés lehetséges, ha az ellenőr egy alkalommal csak egy főt ellenőriz? → $C_{20}^{2,ismétléses} = \binom{20+2-1}{2}$

Feladat: Hány fajta szavazati arány lehetséges, ha 3 jelöltre 20 fő szavaz és mindenki csak egy főre szavazhat? → $C_3^{20,ismétléses} = \binom{3+20-1}{20}$ *Alul van a kisebb szám!*

<u>Variáció</u>

= 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?

<u>Ismétléses variáció</u>

k alkalommal választunk *n* elemből, ismételhető a választás, de a sorrend is számít $V_n^{k,ismétléses} = n^k$

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? → $V_5^2 V_4^{3,ismétléses}$

***p* = (kedvező esetek száma)/(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? → $\frac{\binom{85}{5}}{\binom{90}{5}}$

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

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?

Valószínűségszámítási Alapok

<u>Kísérlet</u>: jelenség kb. azonos körülmények között, tetszőlegesen sokszor ismételhető → többféle kimenet. Kimenetelét <u>esemény</u>nek nevezzük (pontosabban elemi eseménynek), nagybetűvel jelöljük. Ha B mindig bekövetkezik, ha A bekövetkezik: $A\subset B$. Ha $A\subset B$ és $B\subset A$ elég csak az egyikről beszélni.

T = eseménytér = összes elemi esemény O = lehetetlen esemény

I = biztos esemény $\overline{A}$ = ellentet esemény

Példa: dobozban fekete és fehér golyók, 2 golyót húzunk. A=(fehér, fehér), B=(fehér, fekete), C=(fekete, fehér), D=(fekete,fekete), $\overline{A}$ ={B, C, D}

Példák kísérletekre és elemi eseményekre:

- Pénzérme feldobása 1 alkalommal: {fej, írás}
- Egyszerre 4 kockával dobunk: {(1,1,1,1); (1,1,1,2); ……}
  előre rögzítsük, hogy számít-e a sorrend, tehát (1,1,1,2) azonos-e (2,1,1,1)-vel
- 3 egymást követő évben fagy-e (igen, nem, igen)
- Magasságmérés végtelenül pontosan: végtelen sok elemi esemény
- Magasságmérés cm-es pontossággal: 100-220 cm, 1 cm- es beosztással
- Radioaktív részecske, elbomlott-e a megfigyelési idő alatt {igen, nem} Adott időhöz rendelt!

Feladat: Osztálylétszám 40 fő, egy tárgyból az átlag 3,7. A*: az osztályban van 5-ös tanuló,* B*: pontosan 5 tanuló bukott meg. Igaz-e, hogy* B⊂A*?*

Műveletek eseményekkel

A+B legalább A vagy B bekövetkezik, A+B=B+A (kommutatív), A+(B+C)=(A+B)+C (asszociatív)

B-A B bekövetkezik, de A nem

AB mind a kettő bekövetkezik, AB=BA (kommutatív), A(BC)=(AB)C (asszociatív)

AB=O ha A és B egymást kizáró események

Igazak-e a következő egyenlőségek? A+A=A, AA=A, A+O=A, AO=O, AI=A, A+I=I, $A+\overline{A}=I$, $A\overline{A}=O$

Lássuk be Venn-diagram segítségével: disztributivitás A(B+C)=AB+AC *és* A+(BC)=(A+B)(A+C)

Összetett esemény: legalább két különböző elemi esemény összege

*Feladat: Egy telephelyre vasúton (*A*) és közúton(*B*) is szállíthatnak az adott napon. Mondja el, mit jelentenek a következő események:* A+B, AB, B-A, $\overline{A}$, $\overline{A}+B$, $A\overline{B}$, $\overline{A+B}$, $\overline{AB}$, $\overline{A}\,\overline{B}$, $A\overline{B}+\overline{A}B$, $\overline{A}+\overline{B}$, $AB+\overline{A}\,\overline{B}$, $A+\overline{A}B$

Esemény valószínűsége

ha *n* kísérletből *k* alkalommal következik be A $$P(A)=\lim_{n\to\infty}\frac{k}{n}$$

1) 0≤P(A)≤1
2) P(O)=0, P(I)=1
3) ha AB=O, akkor P(A+B)=P(A)+P(B)

Igazak-e?

ha A⊂B, P(A)≤P(B)

P(A+B)=P(A)+P(B)-P(AB)

$P(A)+P(\overline{A})=1$

Ezek alapján elemi események valószínűségéből összetett események valószínűsége számítható.

Geometriai analógiák, ha pl. *n* és *k* nem megszámolható:

Feladat: mekkora a valószínűsége, hogyha egyenletesen dobálunk egy négyzetbe, akkor a legnagyobb beleírható körön belülre dobunk?

Feladat: Ha nem találom a kulcsomat, fél-fél a valószínűsége annak, hogy otthon vagy a munkahelyemen hagytam. Ha a munkahelyemen, akkor 9 fiók valamelyikében lehet egyenlő valószínűséggel. Egy konkrét *esetben a munkahelyemen már 8 fiókban megnéztem, de egyikben sem volt. Mekkora a valószínűsége, hogy a 9. fiókban van? (Vigyázat, a 8 fiók átnézésével csökken az eseménytér!)*

Feltételes valószínűség

bekövetkezett B esetén mekkora A bekövetkezésének a valószínűsége

ha $P(B)\neq 0$, $P(A|B)=P(AB)/P(B)$

Feladat: 32 lapos magyar kártya esetén mi a mi a valószínűsége, hogy először egy 7-est, utána 9-est, majd utána megint egy 7-est kapunk?

Megoldás: $P(A_1)=4/32$, $P(A_2|A_1)=4/31$, $P(A_3|A_1A_2)=3/30$, $P(A_1A_2A_3)=P(A_3|A_1A_2)P(A_2|A_1)P(A_1)$

Teljes valószínűség tétele

Ha $B_1 \ldots B_n$ teljes eseményrendszer és egymást kizáró események,

$$P(A)=\sum_{i=1}^{n} P(A|B_i)P(B_i)$$

Feladat: Egy termék 40%-át az első, 30-30%-át a második és a harmadik napon készítik el. Az első napon gyártottak 5%-a, a második napon gyártottak 7%-a, a harmadik napon gyártottak 10%-a hibás. Az összes termék hány %-a hibás?

Feladat: A hallgatók 80%-a az alap matematikát hallgatja, 20%-a a haladó kurzusra jár. Az alap matematikán a hallgatók 60%-a végzi el sikeresen a gyakorlatot, a haladón 80%-a. Összességében hány % végzi el sikeresen a gyakorlatot?

Bayes tétele

Hogyan számítható ki B_i A-ra vonatkoztatott feltételes valószínűsége A B_i-re vonatkoztatottjából.

$$P(B_i|A)=\frac{P(A|B_i)P(B_i)}{\sum_{j=1}^{n} P(A|B_j)P(B_j)}$$

Függetlenség

A és B események függetlenek, ha $P(A)P(B)=P(AB)$ (ez a definíciója!)

Feladat: Független-e a borsók alakja és színe, ha az alábbi az előfordulási valószínűségük?$_{(igen)}$

alak\szín	*zöld*	*sárga*
kerek	*9/16*	*3/16*
szögletes	*3/16*	*1/16*

Feladat: Független esemény-e egy kocka háromszori feldobásakor, hogy az első dobás 6-os és a három dobás összege 10?$_{(nem)}$

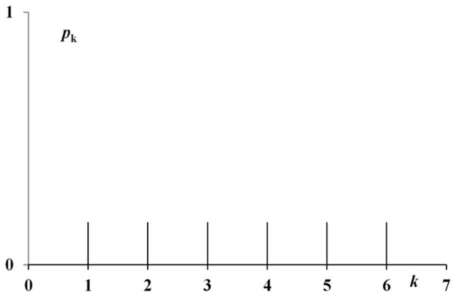
Valószínűségi változó

T eseménytér elemei → egy-egy számértéket rendelünk hozzá, ezt a számértéket valószínűségi változónak nevezzük, jele ξ. Vigyázat! Bár változónak nevezzük, igazából egy az események terén értelmezett függvény, aminek az értékkészletét $\{x_1,x_2,x_3\ldots\}$nevezzük valószínűségi változónak. Ha az esemény számértéket ad, többnyire azt a számot rendeljük az eseményhez. Más esetben pl. egész számokat.

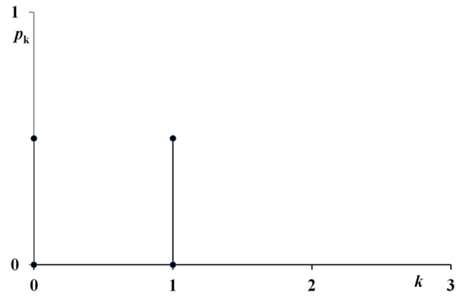
Diszkrét valószínűségi változó esetén:

$p_k=P(\xi=x_k)=P(A_k)$

p_k - x függvényében - diszkrét valószínűségi változó eloszlása

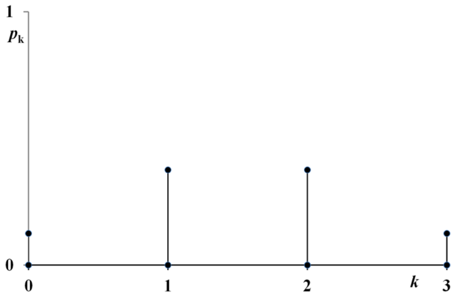


kockadobás eloszlása



pénzfeldobás eloszlása

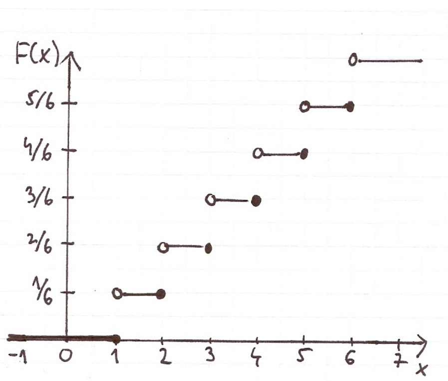
Feladat: Mi a valószínűsége, hogy 0, 1, 2, vagy 3 piros lámpánál kell megállnia, ha három lámpán halad át és mindegyiknél 50%-os valószínűséggel kap pirosat. Rajzolja le az eloszlást! Megoldás:



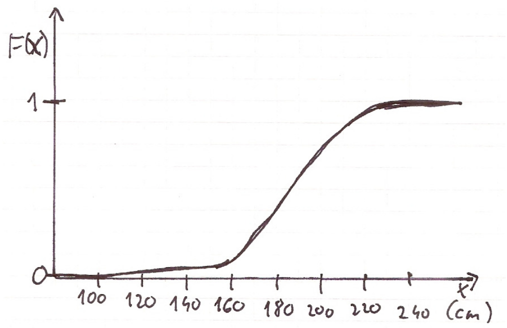
Eloszlásfüggvény

$F(x)=P(\xi<x)$, ahol $x\in R$ (az értelmezési tartomány a teljes számegyenes, nem csak ott, ahol ξ van!)

Tulajdonságai: monoton nő, $\lim_{x\to-\infty}F(x)=0$, $\lim_{x\to\infty}F(x)=1$, mindenütt folytonos balról



diszkrét esetre (pl. kockadobás, lépcsős, üres/teli karikák helye!)



folytonos esetre (pl. fiúk mérete)

<u>Sűrűségfüggvény</u>

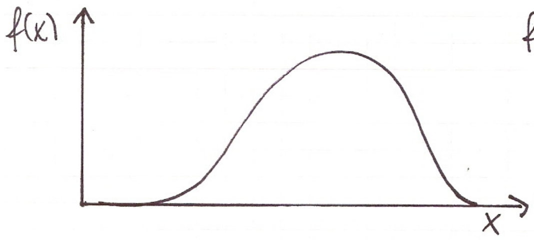
<u>folytonos</u> ξ esetén, ha létezik *f(x)*, úgyhogy

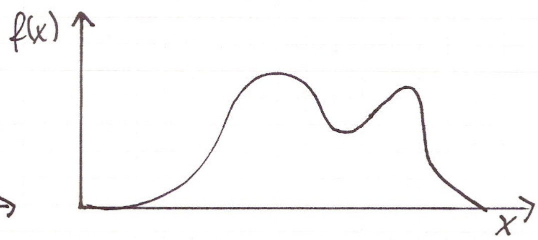
$$F(x) = \int_{-\infty}^{x} f(t)dt$$

Tulajdonságai: nem negatív, $\int_{-\infty}^{\infty} f(t)dt = 1$,

Mit jelent? $p = \int_{x_0}^{x_0+\Delta x} f(t)dt$ az adott $[x;x+\Delta x]$ intervallumba esés valószínűsége. De ha $\Delta x \to 0$, akkor $p \to 0$,

tehát *f(x)* adott értéke nem azonos *x* valószínűségével!





unimodális (pl. férfiak magassága) bimodális (pl. nők+férfiak egyszerre mérve)

Kérdések

x lehet-e negatív?$_{(igen)}$

f(x), F(x) lehet-e negatív? $_{(nem,nem)}$

Diszkrét valószínűségi változónál lehet-e sűrűségfüggvény?$_{(nem)}$

Diszkrét valószínűségi változónál van-e eloszlásfüggvény?$_{(igen)}$

<u>Várható érték</u> – eloszlás helyét jellemzi a számegyenesen

diszkrét ξ-re $E(\xi) = \sum p_k x_k$

folytonos ξ-re $E(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} xf(x)dx$ (másik neve eloszlás első momentuma)

Feladatok

Mennyi a kockadobás várható értéke?

Két dobókockával dobunk, a kapott nyeremény a dobások összege, kivéve, ha van 6-os a dobások között, akkor mi fizetjük be a dobások összegét. Mekkora a nyeremény várható értéke?

Az 5-ös Lottón az öt találatra 10^8, a négyesre 10^6, a hármasra 10^4, a kettesre 10^3 Ft-t fizetnek. Mekkora a nyeremény várható értéke?

Szórás – szórásnégyzet (variancia) – eloszlás szélességét jellemzi

szórásnégyzet, variancia $\sigma^2 = D^2(\xi) = E\left[(\xi - E(\xi))^2\right]$

szórás $\sigma = \sqrt{\sigma^2}$

sokszor így is számolják: $\sigma^2 = E(\xi^2) - [E(\xi)]^2$

diszkrét ξ-re $\sigma^2 = \sum p_i (x_i - E(\xi))^2 = \sum p_i x_i^2 - \left(\sum p_i x_i\right)^2$

folytonos ξ-re $\sigma^2 = \int_{-\infty}^{\infty} (x - E(\xi))^2 f(x)dx$ (másodrendű centrális momentum)

Mire jó a várható érték és a szórás? Majd konkrét eloszlásoknál és a statisztikánál látunk rá példákat.

Csebisev-egyenlőtlenség

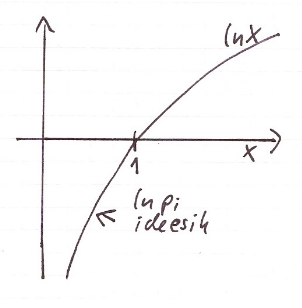
felső korlát a várhatóérték körüli szimmetrikus intervallumokon kívülre esés valószínűségére

$P(\varepsilon \leq |\xi - E(\xi)|) \leq \sigma^2/\varepsilon^2$, ahol $\varepsilon \in R^+$

Mennyi a valószínűség $\varepsilon = k\sigma$, $k=1,2,3$ esetén?

Valószínűségi változó entrópiája

$S = -\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \ln f(x) dx$ vagy $S = -\sum p_i \ln p_i$



az ln$x$ függvény (ln$x$ negatív, ha x <1)

Feladat: A szabályos vagy a cinkelt dobókockával való dobások entrópiája nagyobb, ha a cinkelés következtében a 6-os kétszer gyakrabban jön ki, mint a többi szám külön-külön?

Feladat: Melyiknek nagyobb a (valószínűségi) entrópiája, ha egy ideális gáz a rendelkezésre álló teret egészében egyenletesen tölti ki, vagy csak a tér felében található meg, ott egyenletes eloszlással?

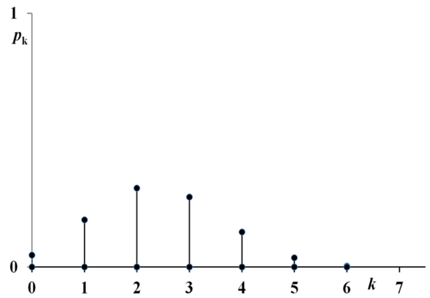
Fontosabb eloszlások

Ha a természetben lejátszódó és az általunk kitalált folyamatokat valószínűségi alapon vizsgáljuk, a folyamatok nagy része pár alap eloszlással leírható.

Binomiális eloszlás

n alkalommal végrehajtunk egy kísérletet. Ebből k alkalommal következik be az A esemény. Az A esemény valószínűségét p=P(A) jelölve, annak a valószínűsége, hogy pontosan k alkalommal következik be:

$p_k = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}$, ahol $0 \le k \le n$ és $k \in$ N.



binomiális eloszlás, n=6, p=0,4

ξ diszkrét valószínűségi változó és értéke azonos A bekövetkezésének számával. Az eloszlás alakja két paramétertől függ: n és p. (1-p)-t szokás q-val külön jelölni.

$E(\xi)=np$ $\sigma^2=np(1-p)$

Feladat: Ellenőrizzük, hogy logikai alapon a binomiális eredmény képletével azonoshoz jutunk-e a következő példában! Egy készletben (pl. kémcső) minden századik hibás. Ha 20 kémcsövet vizsgálunk, mi a valószínűsége, hogy mind jó? Hogy pontosan egy hibás?

Megoldás: p=0,01, n=20 mind jó: $(1-p)^{20}$, egy hibás: $20 \cdot p \cdot (1-p)^{19}$ (az elsőnek hibásat választunk, a többinek jót, és ezt 20-szal szorozzuk, mert annyi helyre választhatnánk a hibásat)

Feladat: Magyarországon a 0-s vércsoport gyakorisága p=0,32. Mi a valószínűsége, hogy véletlenszerűen kiválasztott n=3 emberből egy se 0-s vércsoportú? Pont 1 ember 0-ás vércsoportú? Kevesebb, mint 2 ember 0-s? Legalább 2 ember 0-s?

Megoldás EXCEL-lel: BINOM.ELOSZLÁS(k,n,p,0/1) Az utolsó helyre 0-t írunk, ha pont az adott k valószínűségét számoljuk. 1-t, ha $\sum_{i=0}^{k} p_i$ -t szeretnénk kiszámolni. (Az EXCEL hibásan tartalmazza az elméletet: sűrűségfüggvényt rendel diszkrét valószínűségi változóhoz, valamint $F(x)=P(\xi \le x)$-t használ az elvi $F(x)=P(\xi<x)$ helyett.)

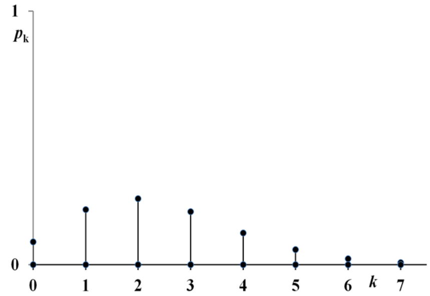
Feladat: A kémcsöves feladatnál mi a valószínűsége, hogy 15-nél több hibás? Használja ki, hogy $P(B)+P(\overline{B})=1$, vagyis néha a komplementert érdemes kiszámolni és annak valószínűségét 1-ből kivonni.

Poisson-eloszlás

Ha binomiálisnál $n \to \infty$ és $p \to 0$, vagyis ritka események eloszlása, ha az esemény bekövetkezése arányos a mérettel és/vagy időintervallummal, valamint az egymás utáni események függetlenek egymástól.

$p_k = P(\xi = k) = \frac{\lambda^k}{k!} e^{-\lambda}$, ahol 0<$\lambda$ és λЄR és kЄN (k=0-t is beleértve)

egy paraméteres (λ), ξ diszkrét, $E(\xi)=\lambda$, illetve $\sigma^2=\lambda$



Poisson-eloszlás λ=2,4 paraméterrel

Kémiai példa: adott nagy anyagmennyiségnél időegység alatt várható radioaktív bomlások száma.

Feladat: GM számlálóval radioaktív háttérsugárzást mérünk. Egy óra alatt 2700-t jelzett a gép. Mi a valószínűsége, hogy 1 másodperc alatt egyet se mérünk? Többet, mint kettőt mérünk? 2 másodperc alatt egyet se mérünk?

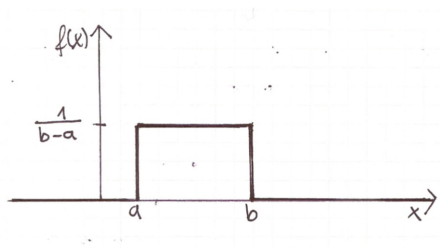
Megoldás EXCEL-lel: POISSON(k,λ,0/1) Először a kérdezett időegységre vonatkozó λ-t kell kiszámolni. A többet, mint kettőnél a komplementert kell 1-ből kivonni: $p=1-(p_0+p_1+p_2)$.

Feladat: Egy nagyvárosban naponta átlagosan 12 traumatológiai ellátást igénylő súlyos baleset történik. Tegyük fel, hogy 4 órára foglal le egy műtőt egy sérült. Hány műtő kell, hogy az 95%-ban legyen üres műtő? (4 órás intervallumra vonatkozó Poisson eloszlással dolgozzon!)

*Megoldás: POISSON(k,12*4/24,1) használatával próba-szerencse alapon megkeresni azt a k-t, ahol a valószínűség meghaladja a 0,95-t.*

Egyenletes eloszlás

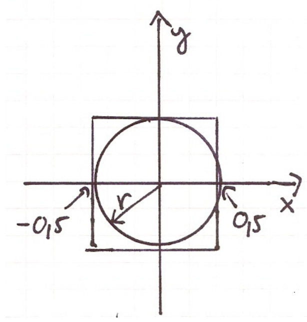
$$f(x) = \begin{cases} 0, \text{ha}(x \le a) \\ \frac{1}{b-a}, \text{ha}(a < x < b) \\ 0, \text{ha}(b \le x) \end{cases} \quad F(x) = \begin{cases} 0, \text{ha}(x \le a) \\ \frac{x-a}{b-a}, \text{ha}(a < x < b) \\ 1, \text{ha}(b \le x) \end{cases}$$



egyenletes eloszlás sűrűségfüggvénye

($a;b$) intervallumban folytonos valószínűségi változó. Könnyű ilyen véletlen számot generálni számítógéppel (pszeudo véletlen számot), pl. VÉL(), illetve Eszközök/ *Adatelemzés / Véletlenszám-generálás*

Feladat: A korábban említett geometriai analógia alapján becsüljük meg π értékét. Egyenletesen generáljunk pontokat egy origó központú egységnyi élhosszú kockába (pl. 100 x és y koordináta), és annak alapján becsüljünk, hogy a pontok hányadrésze kerül bele az origó középpontú egységnyi átmérőjű körbe.

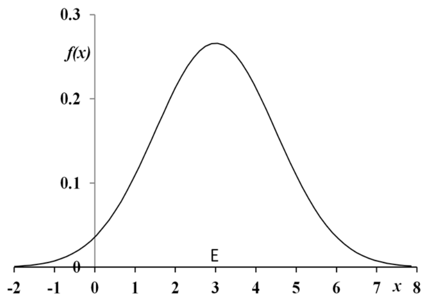


A négyzet és kör javasolt elrendezése

Megoldás: [-0,5;0,5] intervallumba eső egyenletes eloszlású véletlenszámokat generálunk az A és B oszlopokba. A C oszlopban kiszámoljuk a pontok (x-y számpárok) távolságát az origótól. A DARABTELI függvénnyel tudja megszámolni, hány távolság esik 0,5 alá.

<u>Normális eloszlás</u> (Gauss-eloszlás, haranggörbe)

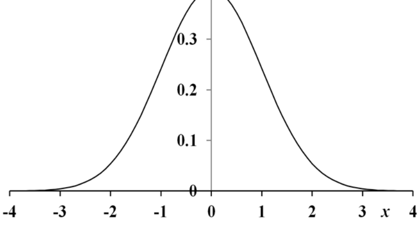
$f(x)=\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{(x-E)^2}{2\sigma^2}}$, ahol $\sigma, E \in R$ és $0<\sigma$



normális eloszlás sűrűségfüggvénye, E=3, σ=1,5

ξ folytonos valószínűségi változó, $\xi \in R$,az eloszlás két paramétere az eloszlás várható értéke és szórása, *f(x)* szimmetrikus „haranggörbe" vagy „Gauss-görbe" *E*-re

$F(x)=\int_{-\infty}^{x}\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{(t-E)^2}{2\sigma^2}}dt$, nem adható meg analitikus alakban elemi függvényekkel. Ma számítógéppel, számológéppel számoljuk, régen táblázatokban kerestük ki. Táblázatban csak egy volt megadva: <u>standard normális eloszlás</u> (E=0, σ=1). Erre átvihető mindegyik másik a változó standardizálásával: $x_{st}=\frac{x-E}{\sigma}$



a standard normális eloszlás sűrűségfüggvénye

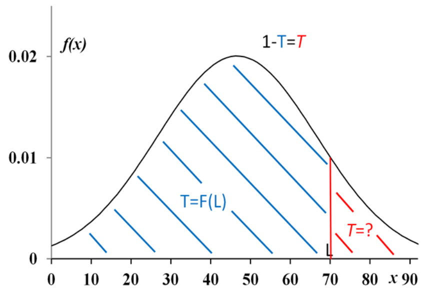
Egy számot célzó természettudományos mérések eredményei folytonos esetben többnyire ilyen eloszlásúak, mert „központi határeloszlás tétele”: ξ sok dologtól függ és sokat mérünk sok mintán → az eredmény normális eloszlású.

Értelmezzük az alábbi táblázat adatait! Hasonlítsuk össze a Csebisev-egyenlőtlenség értékeivel!

x_{st}	$f(x)$	$F(x)$
0	0,39	0,50
1	0,34	0,84
2	0,054	0,977
3	0,005	0,999

Feladat: Budaörsön 1998-ban NO_2 koncentrációjára E=46,6 $\mu g/m^3$ és σ=19,9 $\mu g/m^3$ értékeket határoztak meg a napi átlagokra. A napok hány %-ban lépték túl az akkori L=70 $\mu g/m^3$ egészségügyi határértéket, ha az adatokra normális eloszlást feltételezünk? Mivel indokolja, hogy egy kisvárosban ilyen magas NO_2 értékeket mérnek?

Megoldás menete: NORM.ELOSZL(x,E,σ,1) használatával az ábrának megfelelően.

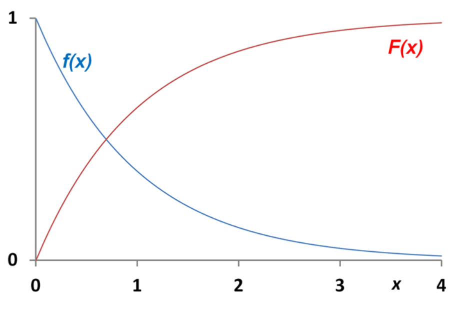


megoldás komplementer számításával

<u>Exponenciális eloszlás</u>

$$f(x)=\begin{cases}0,\text{ha}(x\le 0)\\ \lambda e^{-\lambda x},\text{ha}(0<x)\end{cases},\ \text{ahol } 0<\lambda,\ \lambda\in R \text{ és } F(x)=P(\xi<x)=\begin{cases}0,\text{ha}(x\le 0)\\ 1-e^{-\lambda x},\text{ha}(0<x)\end{cases}$$

ξ folytonos $(0,\infty)$-ben és $\xi \in R^+$, egyparaméteres (λ), $E(\xi)=1/\lambda$, $\sigma=1/\lambda$, $\lim_{x\to+0} f(x)=\lambda$



exponenciális eloszlás sűrűség- és eloszlásfüggvénye λ=1 paraméterrel

Általában olyan folyamatokra, ahol két esemény bekövetkezése közötti idő a meghatározó. Reakciókinetikában az ütközések a meghatározóak, x=idő (pl. bomlási folyamat). Nem öregedő élettartammal kapcsolatos eloszlás (mindegy honnan kezdjük, a görbe alakja ugyanaz lesz). Felezési idővel való kapcsolata: $t_{1/2}=\ln 2/\lambda$ (ennyi idő alatt csökken az adott anyag mennyisége a felére pl. radioaktív bomlásnál).

Kapcsolata a bomlások differenciál-egyenletével:

$\frac{dN}{dt}=-kN$ megoldása: $N(t)=N_0e^{-kt}=N_0(1-F(t))$, ahol t az időt, N az anyagmennyiséget, N_0 a kezdeti anyagmennyiséget, k a reakciósebességi együtthatót (reakciósebességi állandót) jelenti.

Feladat: Egy bomlási folyamat λ=0,0001 év^{-1} paraméterű exponenciális eloszlással írható le. Az anyag hányadrésze bomlik el 1000 év alatt? Mennyi marad 20000 év után? Mennyi a felezési idő? Hányadrésze marad meg három felezési idő után? EXP.ELOSZLÁS(x,λ,1)

Hipergeometriai eloszlás

Már találkoztunk vele a Lottónál.

$p(m,n,M,N)=\frac{\binom{M}{m}\binom{N-M}{n-m}}{\binom{N}{n}}$, ahol N,M,n,m€N, $0<N$, $n\leq N$, $M\leq N$, $m\leq n$, $m\leq M$

Feladat: Mi a valószínűsége annak, hogy egy 10 fős mintában 4 lány van, ha az iskolába 1000-n járnak és ebből 527 lány?

Megoldás: HIPERGEOM.ELOSZLÁS(4,10,527,1000)

Feladat: Mi az ötös Lottón a 2, 3, 4 és 5 találat valószínűsége?

Gyakorló feladatok eloszlásokhoz

1) Egy mérés során átlagosan minden 50-ik adatot hibásan jegyeznek fel. Mekkora a valószínűsége, hogy 50 kiválasztott adat mind helyes? Mekkora a valószínűsége, hogy 100 adatból pontosan 2 hibás.

2) Egy szennyezett vízben literenként átlagosan 10000 baktérium van. Mennyi annak a valószínűsége, hogy 0,5 ml-es mintában legalább 4 baktérium van? Mekkora mintát kell venni, hogy 95%-os valószínűséggel legalább egy baktérium legyen benne?

3) Egy monitoron átlagosan minden tízezredik pixel hibás. Mekkora a valószínűsége, hogy egy 150x150-szeres darabon minden pixel jó?

4) Azt tapasztalták, hogy 10 nap alatt egy anyag tömegének a fele elbomlott. Mennyi ideig kell várnunk, hogy már csak az eredeti mennyiség tizede maradjon? Mekkora része marad 20 nap után? 40 nap után?

5) Mekkora a valószínűsége, hogy egy standard normális eloszlással rendelkező valószínűségi változó értéke 0,2 és 0,8 közé esik? Milyen valószínűséggel negatív az értéke? Mennyi a valószínűsége, hogy –1 és 1 közé esik? Mennyi a valószínűsége., hogy 2-nél nagyobb?

6) Számítsuk ki két szabályos pénzérme feldobása esetén a kapott „fej" eredmények számának várható értékét és szórását!

7) Egy szerves kémiai reakciót átlagosan 5 kísérletből 4-szer sikerül reprodukálni. Mekkora a valószínűsége, hogy 10 próbálkozásból pontosan 8 sikerül?

8) Egy hallgató 30 tételből 20-t tanult meg. mekkora az esélye, hogy a húzott 3 tételből legalább kettőt megtanult?

9) Egy test többször megismételt tömegmérése során 5 mg várható értéket és 0,1 mg szórást állapítottak meg. Legalább mekkora tömeget mérünk 95%-os valószínűséggel? Melyik intervallumba esik az átlaghoz legközelebbi 80%-a méréseknek?

10) GM csöves méréskor átlagosan 4 beütést rögzítettek percenként a háttérsugárzásra. Mi a valószínűsége, hogy 12-nél több beütést rögzítenek egy percben? Mi a valószínűsége, hogy másfél óra alatt 1000 beütésnél többet észlelnek?

11) Egy palackozó gép átlagosan 0,998 dm^3 anyagot 0,006 dm^3 szórással tölt az üvegekbe. Mekkora palackot kell rendelni, hogy csak az esetek 2,3%-ban csorduljon túl a palack?

12) A csúcsidőben egy liftbe mindig a maximálisan megengedett 8 fő száll be, férfiak és nők 50-50%-os valószínűséggel. Ha az összeterhelés 660 kg feletti, a lift nem indul, valakinek ki kell szállnia. Mekkora a valószínűsége, hogy valakinek ki kell szállnia, ha a nőknél 60 kg, a férfiaknál 90 kg testsúllyal számolunk?

13) Ha a buszon a büntetés a jegy árának 20-szorosa, megéri-e bliccelni, ha az ellenőrzés gyakorisága λ=0,0667 paraméterű exponenciális eloszlással írható le? A példa természetesen csak züllött társadalomban értelmes!

Megoldások: binomiális: 1, 3, 6, 7, 12;Poisson: 2, 10; exponenciális: 4, 13; normális: 5, 9, 11; hipergeom.: 8.