

TÉMAVÁZLAT 1-3. ALKALOM

Kémiai Számítástechnika Gyakorlat, Kémia BSc I. évf. 2019/2020 I. félév

LINUX ALAPISMERETEK

*Linux rendszer: 3.124-e linuxos terem vagy 534-es Windows teremből ssh-n keresztül, vagy a Windows alatt futó korlátozott szintű Mingw bash (keresés cmd-re, majd ott klikkelés) segítségével. Ez utóbbinál a *-os parancsok nem érhetőek el vagy korlátozottan csak használhatóak.*

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 fájlnev</i>	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, fájl létrehozása *touch* paranccsal

**chmod (ugo)+x(rw) fájlnev* fájl hozzáféréseinek 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) fájlnev 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 fájlnev* fájl kiírása a képernyőre

**w, *who* bejelentkezettek listázása

ctrl/c leállítás *ctrl/d* vészleállítás **clear* képernyő törlése

**passwd* jelszó változtatása (általában, itt más)

**lpr fájlnev* nyomtatás (nyomtató megadása)

& a parancs végére háttérben fut (pl. **xclock&, xeyes&*)

> 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' fájlnev kakast tartalmazó sorok kiírása

**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

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

Függvény beszúrása - f_x

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 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, Nyomtatás, Nyomtatási kép

Lapelrendezés / Oldalbeállítás

Kezdőlap / Visszavonás – Ismétlés, formátum, szegély és mintázat (táblázatok készítése)

Beszúrás / Cellák, Sorok, Oszlopok, Munkalap, Diagram

Egyszerű adatbázis kezelése

kezdeti kitöltés (fejlécek, alá minimum egysornyi példa)

Adatok / Rendezés, Szűrő, Irányított szűrő, Szövegből oszlopok

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

Grafikon készítése

x és y mezők kijelölése egyben

Beszúrás / 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() függvényrel, átskálázás 0-50 közé Adatok/ Adatelemzés /

Véletlenszám-generálás funkcióval és ábrázolása a felosztás közepére vonatkozó skálával

TUDOMÁNYOS KOMMUNIKÁCIÓ - ALAPISMERETEK

Szakmai önéletrajz

Többnyire tételes stílus, minták: Word -új fájl - önéletrajzok, Europass Curriculum Vitae ...

Személyes adatok, Munkahelyek-Alkalmazások, Tanulmányok-Iskolák-Képzetségek, 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 / Egyenlet ikon

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)

²Metropolis, 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 – terület függő

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

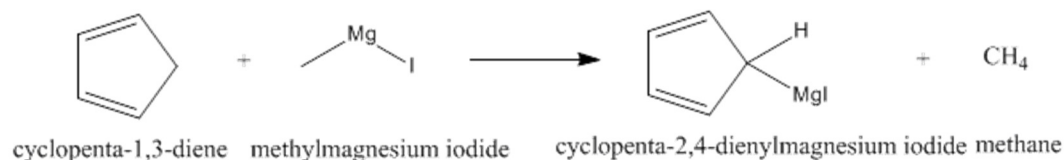
www.webelements.com

további forrásokra keresés

Kémiai képletek és ábrák készítése a Chemaxon Marvin Sketch programmal

Egyszerű szerkezetek bevitele, módosítása, Structure menü pontjai, reakció ábrázolása, nyilak, töltések, név és szerkezet azonosítása, Analysis box felvétele.

1. feladat



2. feladat név/SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System) kód beírása pl. Word-be, majd átmásolása (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] Kapott molekula adatainak számolása: Calculations menü

3. feladat Molekulabevitel nevekkel, pl. GlyGly, ungroup parancs, add explicit hydrogen parancs, áttérés 3D-re: Ctrl/3, Forgatás F7 lenyomása közben egérrel, Calculation pl. Conformerekre, exportálás képként vagy Ctrl/c

Kémiai adatbázis

Instant JChem: File/New Project/Pubchem demo megtekintése, Scifinder serepe a szerves kémiában

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 eljárásról. 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.

A házidolgozatokat Baranyai András tanár úr végzi. Néhány megjegyzése a korábbi évek dolgozatai alapján:

“Sokan nem tartották be az iránymutatást, hogy 11 Times New Roman betűméret, másfeles sortávolsággal. Ha a szöveget alcímekkel ellátott részekre osztják, akkor ezeket is meg kell számolni!

Ha a valamilyen forrásból copy-paste-tel berakott ábra, egyenlet nem egyezik a szöveg karaktereivel vagy egy másik ilyen egyenlettel, ábrával, akkor újra kell formázni, rajzolni ezeket!

Hivatkozunk a szövegben az egyenletre, a táblázatra, az ábrára! Ne csak úgy oda legyen dobva! Ezeket számokkal is lássuk el, hogy könnyen lehessen rájuk hivatkozni! Az ábrák, egyenletek, táblázatok mérete összemérhető legyen a szöveges rész betűméretével!

A dolgozat első lapja kezdődjön úgy, mint egy valóságos cikk! Középre centrálva nagyobb betűkkel a cím, alatta a szerző neve, ez alatt pedig az affiliációja, jelen esetben I. éves BSc hallgató, ELTE. Nem ceruzával odavetve az utolsó lap aljára, mert ez is része a feladatnak!

A hivatkozásnál, ha irodalmat használnak fel, próbálják szövegrészekhez kötni, mert nem tartalmi összefoglalót készítünk, hanem egy eredeti publikációt próbálunk imitálni!

A dolgozatnál nem a látványosság számít, hanem egy tudományos közlemény formai konvencióinak betartása. Természetesen, a színes, látványos dolgozat üdvözlendő, de ha az elmondottaknak nem felel meg, akkor nem javít az értékelésben.”

Valószínűségszámítási alapismeretek kémiai alkalmazásokkal

A téma önállóan, az ajánlott irodalom alapján sajátítható el

Javasolt módszer:

- 1) a könyv egy-egy fejezetének átolvasása, kezdő szinten való megértése
- 2) Az adott fejezettel kapcsolatos Moodle feladatok megoldása, még a könyv segítségével
- 3) Részvétel a 3. gyakorlaton, ahol típusfeladatok lesznek bemutatva, illetve lehetőség lesz a Moodle gyakorló feladatokkal kapcsolatban konzultációra
- 4) A 4. alkalommal ZH, a Moodle feladatokhoz hasonló elméleti és számolási kérdésekből lesz

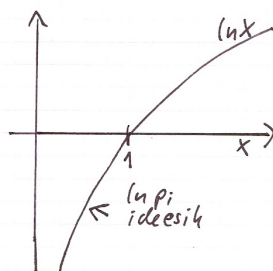
Kötelező irodalom: Solt György: Valószínűségszámítás (Bolyai-sorozat, Műszaki Könyvkiadó)

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”.

A könyvben nem szerepel, de az anyaghoz tartozik:

Valószínűségi változó entrópiája:

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



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

A 3. GYAKORLATRA JAVASOLT TÍPUSFELADATOK

A feladatok órai megoldása során a gyakorlatvezetők a szükséges elméleti ismeretekre, gyakorlati trükkökre, esetlegesen használható EXCEL függvényekre is kitérnek.

Hány féle különböző szomszédok szerinti sorrendben ülhet le a 12 hallgatóból 6 egy kör alakú asztalhoz?

Hány olyan különböző három dobásból álló kockadobássorozat van, amelyekben legalább egy hatos van?

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

Milyen számokkal fedett nyersanyagok jönnek ki a leggyakrabban a Catan telepesei játéknál?

Három ajtót lát, az egyik mögött rejlik a főnyeremény, a másik kettő mögött pedig nincs semmi. Ön kiválaszt egy ajtót. A kincs elrejtője kinyit a másik két ajtó közül egyet, ami üres. Majd felteszi a kérdést, hogy szeretne-e változtatni és esetleg másik ajtót választani? Számít-e a kincs megtalálásának az esélyénél, hogy marad az eredeti ajtónál, vagy vált a másik még zárt ajtóra?

Valószínűségszámítási szempontból független-e a nem és a hajszín, ha a társaságban a következő arányok vannak: barna fiú 1/5, szőke fiú 2/5, barna lány 1/5, szőke lány 1/5.

Ábrázolja a kockadobás és a pénzfeldobás eloszlását és eloszlásfüggvényét!

Sematikusan ábrázolja a férfiak és a nők magasságeloszlásának sűrűségfüggvényét és eloszlásfüggvényét, értelmezze a sűrűségfüggvény alatti területeket.

Hányadrésze esik egy tetszőleges eloszlásnak a +/- 1, 2, 3 szórású intervallumokba a Csebisev-egyenlőtlenség alapján, mennyi ez a normál eloszlásnál?

Vezesse le a binomiális eloszlás képletét arra esetre, ha 20 kémcsöve van és átlagosan minden 100. hibás.

A háttérsugárzás GM csővel való mérése óránként átlagosan 7200-t jelez. Számítsa ki annak az esélyét, hogy egy másodperc alatt 0-t, pontosan 2-t, legalább 3-t jelez.

Ábrázolja a standard normális eloszlás sűrűségfüggvényét. Próbálja meg utána az $N(1, \text{variancia}=4)$ normális eloszlást is ábrázolni. Sematikusan jelezze, hogyan tudná kiszámolni az $x \in [2, \infty)$ tartományra a sűrűségfüggvény integrálját.

Számítsa ki, hogy a 10000 év felezési idejű radioaktív izotópnak hányadrésze bomlik el 5000 év alatt és hányadrésze marad meg 15000 év után. Mikor lesz az anyag az eredetinek 60%-a?