

A tantárgy neve:	magyarul:	Kémiai informatika						Kódja:	TTKBG0902	
	angolul:	Computer science for chemists								
A képzés 2. féléve										
Felelős oktatási egység:		DE TTK, Alkalmazott Kémiai Tanszék								
Kötelező előtanulmány neve:		Kémiai informatikai alapok						Kódja:	TTKBG0901	
Típus		Heti óraszámok						Követelmény	Kredit	Oktatás nyelve
		Előadás		Gyakorlat		Labor				
Nappali	X	Heti	0	Heti	2	Heti	0	gyakorlati jegy	2	magyar
Levelező		Féléves		Féléves		Féléves				
Tantárgyfelelős oktató		neve:		Dr. Kuki Ákos				beosztása:	egyetemi docens	
A kurzus célja, hogy a hallgatók										
<p>a korábban megtanult alapokra építve megismerjék a természettudományos, kémiai irányú számítástechnikai és informatikai eszközöket, szoftvereket és elsajátítsák azok alkalmazását.</p>										
Tanulás eredmények, kompetenciák: a hallgató										
<p><i>Tudás:</i></p> <p>ismeri a személyi számítógép, azon belül is kiemelten a táblázatkezelő programok, által nyújtott lehetőségeket a kémiai, természettudományos szakmai munka során felmerülő matematikai problémák megoldására.</p> <p>Rendelkezik azokkal az ismeretekkel, amelyek (megfelelő szakmai irányítással) lehetővé teszik számára a vizsgálható kémiai folyamatok, rendszerek, tudományos problémák tudományos gyakorlatban elfogadott módszerekkel történő tesztelését, a mérési eredmények számítógépes feldolgozását.</p> <p><i>Képesség:</i></p> <p>képes az adott kémiai, természettudományos feladat megoldásához megfelelő szoftvert választani, az eredményeket előállítani, azok helyességét megítélni.</p> <p>Képes a mérési eredmények kiértékelésére, értelmezésére, dokumentálására.</p> <p><i>Attitűd:</i></p> <p>Érdeklődik a kémiai, természettudományos feladatok számítógépes megoldása iránt. Nyitott a megfelelő szoftverek újabb verzióinak megértésére, az újabb alkalmazási lehetőségekre.</p> <p>Hitelesen képviseli a természettudományos világnézetet, és közvetíteni tudja azt a szakmai és nem szakmai közönség felé. Tisztában van a szakmai kijelentések jelentőségével és következményeivel.</p> <p><i>Autonómia és felelősség:</i></p> <p>Önállóan felismeri a kémiai, természettudományos feladatok adatfeldolgozási, számítási vonatkozásait és megfelelő módszert választva, számítógéppel megoldja azokat. Felelősséget vállal az eredményekért, az alkalmazott módszerek lényegét ismerteti, eljárását megvédi, ha szükséges.</p> <p>Saját munkájának eredményét reálisan értékeli, azokat hasonló szakmai beosztásban dolgozó munkatársak eredményeivel összeveti.</p>										
A kurzus tartalma, témakörei										
<ul style="list-style-type: none"> - Bonyolultabb matematikai függvények alkalmazása kémiai problémák megoldására - Egyenletek megoldása. - Egyenletrendszerek megoldása. - Regresszió - Interpoláció - Numerikus differenciálás. - Numerikus integrálás. - Mátrixok és lineáris egyenletrendszerek. - Valószínűségszámítási alapfeladatok, nevezetes eloszlások. 										

Tervezett tanulási tevékenységek, tanítási módszerek

- Az alkalmazandó módszerek, feladatok frontális ismertetése, ha szükséges, számítógépes szemléltetése.
- Az előbbieket internetes kiegészítéssel, ha szükséges.
- Önálló számítógépes feladatmegoldás, tanári segítséggel, ha szükséges.

Értékelés

- Az órai feladatokhoz hasonló évközi vizsgafeladatokkal

Gyakorlati jegy az évközi feladatokra adott összesített pontszám alapján:

Jeles: 90 %, jó: 75 %, közepes 60 %, elégséges: 50 %, 50 % alatt elégtelen

Kötelező olvasmány:

A gyakorlatvezető által biztosított gyakorlatleírások.

Ajánlott szakirodalom:

- Szövegszerkesztés, táblázatkezelés, általános rajzolás: MS Office, OpenOffice, leírások.
- Számítások táblázatkezelővel: MS Office, OpenOffice, leírások.
- <https://support.office.com/hu-hu>

Heti bontott tematika	
1. hét	Bonyolultabb matematikai függvények interpretálása táblázatkezelőben. Az eredmények ábrázolása xy diagramon. TE: A hallgató önállóan képes bonyolultabb függvények táblázatkezelőben történő alkalmazására, az adatok és eredmények szakmailag megfelelő ábrázolására.
2. hét	Bonyolultabb matematikai függvények alkalmazása kémiai problémák megoldására TE: A hallgató önállóan képes szintaktikai, szemantikai hibáit felismerni és javítani.
3. hét	Numerikus differenciálás táblázatkezelővel, alkalmazása kémiai, vegyipari feladatok megoldására, szemléltetésére. TE: A hallgató megtanulja az alapvető numerikus deriválási módszereket és ezek használatát táblázatkezelőben.
4. hét	Numerikus integrálás táblázatkezelővel, alkalmazása kémiai, vegyipari feladatok megoldására. TE: A hallgató megtanulja az alapvető numerikus integrálási módszereket és ezek használatát táblázatkezelőben.
5. hét	Regresszió, görbeillesztés mérési pontokra. TE: A hallgató képes mérési eredményeire görbét illeszteni, az illesztést értékelni, szemléltetni
6. hét	Interpoláció alkalmazása tipikus kémiai, analitikai problémák megoldására. TE: A hallgató megtanulja kalibrációs görbék táblázatkezelővel történő létrehozását, alkalmazását.
7. hét	Nemlineáris egyenletek megoldása táblázatkezelővel. Alkalmazása kémiai feladatok megoldására.

	TE: A hallgató megismeri a táblázatkezelő program célérték keresés funkcióját, és alkalmazza nemlineáris egyenletek megoldására.
8. hét	Nemlineáris egyenletrendszerek megoldása táblázatkezelővel. Alkalmazása kémiai, vegyipari feladatok megoldására.
	TE: A hallgató tudja alkalmazni a táblázatkezelő solver eszközét kémiai, természettudományos feladatok megoldására.
9. hét	A matematikai tanulmányokra alapozva a táblázatkezelő mátrixműveleteivel kapcsolatos rutinjainak (transzponálás, szorzás, determináns, inverzió stb.) ismertetése, feladatok megoldása.
	TE: A hallgató megismeri a táblázatkezelő program mátrixokkal kapcsolatos műveleteit és függvényeit, azok alkalmazását.
10. hét	Lineáris egyenletrendszerek megoldása mátrixműveletekkel. Összehasonlítás a solver-rel történő megoldással.
	TE: A hallgató megtanulja a mátrixműveletekkel történő lineáris egyenletrendszer megoldást.
11. hét	Valószínűségszámítási alapeladatok megoldása táblázatkezelővel
	TE: A hallgató megtanulja és alkalmazza a táblázatkezelő eszközeit kombinatorikai, valószínűségszámítási feladatok megoldására.
12. hét	Statisztikai alapok, fontosabb eloszlások.
	TE: A hallgató megtanulja a táblázatkezelő eloszlás függvényeit, és azok alkalmazását.
13. hét	Gázok sebességeloszlása, tipikus sebességek.
	TE: A hallgató elmélyíti tudását a bonyolultabb képletek interpretálása, eloszlások szemléltetése, numerikus integrálás területén.
14. hét	A t-próba különféle változatai, implementációjuk a táblázatkezelőben és ezek kémiai, természettudományos alkalmazása.
	TE: A hallgató megtanulja, a t-próba segítségével – kémiai, természettudományos feladatokon keresztül – megállapítani, hogy a mért adatsorban észlelhető változások szignifikánsak-e vagy csak statisztikus ingadozásnak tekinthetők.