

# Számítógépes modellezés a kémiában

## Reakciókinetikai modellezés, SIMLAB házi feladat

Kovács Márton

**Beadandó:** 2019. Szeptember 30. 24:00-ig  
a [kmarci95@hotmail.com](mailto:kmarci95@hotmail.com) címre elküldve pdf formátumban

Egy előadás keretein belül bemutattam a lokális- és globális érzékenységtanulmány szerepét a modellek elemzésében, valamint ismertettem néhány módszert ezek közül. A gyakorlati részben a SIMLAB programcsomaggal ismerkedtünk. Az előadás diái és a program letöltéséhez, használatához szükséges minden információ elérhető a honlapomon:

[http://garfield.chem.elte.hu/kovacsmarton/SzamModell\\_1920\\_osz](http://garfield.chem.elte.hu/kovacsmarton/SzamModell_1920_osz)

### BEADANDÓ FELADAT

Végezz mintagenerálást a megadott eloszlások és korrelációs együtthatók alapján. Használj Latin-Hiperkocka eljárást, legalább 10 000-es elemszámú mintával. Minden esetben a különböző változók eloszlásairól mellékelj ábrát, térj ki arra, hogyan fedezhető fel ezen az adott eloszlás várható értéke, szórása (3 kép), és vedd össze a megadott eloszlás "eredeti" eloszlásfüggvényével. Mutass rá a generált képek alapján, hogyan ismerhető fel a megfelelő változók között a korreláció, ez mit is jelent. (3 kép). Mellékelj a mintagenerálás alapján számított korrelációs mátrixot, térj ki az eredeti és a tapasztalati értékek összehasonlítására.

	NÉV	X	Y	Z	Korreláció
1.	Baglyas Márton	N(0,1)	U(0,2)	N(2,4)	Corr(X,Z)= 0.6
2.	Béres Kende Attila	U(-1,4)	N(1,3)	N(0,2)	Corr(Y,Z)= -0.6
3.	Ember Orsolya	N(1,3)	N(2,3)	U(-2,2)	Corr(X,Y)= 0.3
4.	Fazekas Nóra Kamilla	N(0,4)	N(1,1)	U(0,2)	Corr(X,Y)= -0.4
5.	Filarszky Ildikó	U(1,3)	N(0,2)	N(2,3)	Corr(Y,Z)= 0.4
6.	Kóhalmi Luca Virág	N(0,2)	U(0,4)	N(3,3)	Corr(X,Z)= 0.7
7.	Kőszeg Edina Tekla	U(1,3)	N(0,3)	N(1,2)	Corr(Y,Z)= -0.3
8.	Kotschy András Miklós	U(-1,4)	N(1,4)	N(2,1)	Corr(Y,Z)= 0.8
9.	Lovasi Dávid	N(2,1)	N(4,2)	U(-3,0)	Corr(X,Y)= 0.9
10.	Medveczki Tímea	N(1,3)	N(-1,3)	U(0,4)	Corr(X,Y)= 0.6
11.	Nagy Gréta	N(-1,2)	U(1,4)	N(0,4)	Corr(X,Z)= -0.7
12.	Nagy Kinga	N(1,3)	N(-2,2)	U(0,2)	Corr(X,Y)= -0.8
13.	Nagy László	N(1,2)	N(0,3)	U(-1,2)	Corr(X,Y)= -0.3
14.	Szabó Gergely Olivér	N(-1,2)	U(1,2)	N(0,2)	Corr(X,Z)= 0.8
15.	Szilágyi Fanni	N(1,2)	N(-1,2)	U(0,3)	Corr(X,Y)= 0.5
16.	Vajda Dániel	U(2,4)	N(0,2)	N(3,3)	Corr(Y,Z)= 0.5
17.	Vörösmarty Máté	N(-2,2)	N(1,1)	U(3,5)	Corr(X,Y)= -0.5