

TANTÁRGYI TEMATIKA
Vegyésszmérnök MSc 2025.

Tantárgy neve: SZÁMÍTÁSOS KÉMIA, IPARI ADATELEMZÉS ÉS MESTERSÉGES INTELLIGENCIA	Tantárgy neptun kódja: MAKKEM317VM(L) Tárgyfelelős intézet: Kémiai Intézet Tantárgyelem: kötelező
Tárgyfelelős: Prof. Dr. Szőri Milán, egyetemi tanár, dr. habil, Ph.D.	
Közreműködő oktató(k): -	
Javasolt félév: 3. félév	Előfeltétel: Fizikai kémia és anyagszerkezet
Óraszám/hét: 1 ea + 2 gy Óraszám/félév: 5 ea + 10 gy	Számonkérés módja (a/gy/k/b): aláírás + kollókvium
Kreditpont: 3	Munkarend: nappali / levelező
Tantárgy feladata és célja: A kurzus egyik célja, hogy a hallgató megismerjen és önállóan használjon szabad hozzáférésű kvantumkémiai programot, az sűrűségfüggvény alapú kvantumkémiai számításokból származó adatokat feldolgozni és képes legyen eredményeket önállóan értelmezni. Fejlesztendő kompetenciák: tudás: - Ismeri a vegyész-mérnöki szakmához kapcsolódó matematikai, természettudományos (kémiai, fizikai) és műszaki elméletet és gyakorlatot. - Ismeri a vegyész-mérnöki területhez kapcsolódó információs és kommunikációs technológiákat. - Ismeri a számítógépes modellezés és szimuláció vegyész-mérnöki szakterülethez kapcsolódó eszközeit és módszereit. - Ismeri a technológiai fejlesztés legmodernebb eredményeit és megközelítéseit. - Az eljárások és technológiák kutatásához, fejlesztéséhez és működtetéséhez szükséges analitikai és szerkezetvizsgálati módszerek birtokában van. képesség: - Alkotóan képes alkalmazni a vegyész-mérnöki szakterülethez kapcsolódó matematikai és természettudományos elméleti és gyakorlati ismereteket feladatai megoldása során. - Képes a vegyész-mérnöki, kémiai és kémiai technológiai területen alkalmazott elemzések és anyagvizsgálatok elvégzésére, értékelésére és dokumentálására, szükség esetén a vizsgálati mód-szerek továbbfejlesztésére, és új módszerek bevezetésére. - Képes eredeti ötletekkel és eredményekkel gazdagítani a vegyész-mérnöki és kémiai szakterület tudásbázisát. - Képes a vegyipari és kémiai technológiai rendszerek és folyamatok tervezésében, szervezésében és működtetésében használatos eljárások, modellek, információs technológiák alkalmazására és azok továbbfejlesztésére. attitűd: - Munkája során vizsgálja a kutatási, fejlesztési és innovációs célok kitűzésének lehetőségét és törekszik azok elérésére, elkötelezett a szakterület új ismeretekkel, tudományos és műszaki eredményekkel való gyarapítására. - Ismeretei és készségei fejlesztésére folyamatosan törekszik. autonómia és felelősség: - Szakmai problémák megoldása során önállóan és kezdeményezően lép fel. - Döntéseit körültekintően, megfelelő önállósággal, szükség szerint más (nemcsak műszaki) szak-területek képviselőivel konzultálva hozza, azokért felelősséget vállal.	
Tantárgy tematikus leírása:	
A modern, kvantummechanikai alapú anyagszerkezeti értelmezés elengedhetetlen a hatékony anyagtervezéshez. A kurzus egyik fő feladata, hogy elősegítse az alapvető fizikai-kémiai mennyiségek mélyebb megértését, valamint megismertesse ezek kvantumkémiai számítások lehetőségeit, amelyhez a primer adatok sűrűségfüggvény-elméleten (DFT) alapuló kvantumkémiai számításokból származnak.	

A kurzus során a hallgatók megtanulják szabad hozzáférésű kvantumkémiai programok önálló használatát, a számításokból nyert adatok feldolgozását és értelmezését. A kvantumkémiai eredményekből nyerhető nagymennyiségű adat lehetőséget teremt az adatelemzési technikák megismerésére, valamint a modern, prediktív mesterséges intelligencia modellek alkalmazásának elsajátítására.

A projektalapú számonkérés minden hallgató számára lehetőséget biztosít arra, hogy a témában elmélyüljön, és gyakorlati tapasztalatot szerezzen az elemi kémiai reakciók mechanizmusának elméleti vizsgálati módszereiről.

Félévközi számonkérés módja:

A félév során két beadandó dolgozatot és az eredményeket bemutató diasort kell hallgatóknak elkészíteniük és ebből az önálló munkavégzésből származó hallgatói előadás kell bemutatniuk.

Kollokvium teljesítésének módja, értékelése:

A kollokvium teljesítésének feltétele:

- a gyakorlatokon való aktív részvétel,
- mindkét beadandó dolgozat és a diasor beadása a megadott határidőig,
- az önálló hallgatói előadás megtartása.

Értékelési rendszer (összesen 100 pont)

Értékelési elem	Pontszám	Szemponatok
Beadandó dolgozatok	2×20	Szakmai tartalom, világos felépítés, önálló munka, hivatkozások. Aláíráshoz szükséges minimum pontszám a beadandó dolgozathoz: 2×10
Prezentáció (diasor)	2×20	Áttekinthetőség, vizualizáció, tömörség, tudományos nyelvezet Aláíráshoz szükséges minimum pontszám a beadandó diasorból: 2×10
Előadás	2×10	Előadói készség, időkeret betartása, kérdések kezelése, órai munka. Aláíráshoz szükséges minimum pontszám az előadásból: 2×5

Érdemjegyek:

Pontszám	Érdemjegy
0–59	Elégtelen (1)
60–69	Elégséges (2)
70–79	Közepes (3)
80–89	Jó (4)
90–100	Jeles (5)

Késedelmes leadás szabályozása:

- Ha a leadás legfeljebb 1 hetet késik, akkor az adott feladatra kapott pontszám feleződik.
- 1 hétnél nagyobb késés esetén a feladat nem értékelhető, és arra 0 pont jár (a kurzus nem került teljesítésre).
- Késedelmet kizárólag előzetesen bejelentett és dokumentált indokkal lehet elfogadtatni.

Hiányzások szabályozása:

- A gyakorlatokon való részvétel kötelező. A megengedett hiányzás maximum két alkalom lehet, ami orvosi igazolással elfogadható.
- Rendkívüli családi esemény esetén a távollétet legalább 4 órával az óra előtt e-mail kell jelezni a gyakorlatvezető felé, indoklással együtt.
- Az igazolást a hallgatónak önkéntesen, a következő alkalommal be kell mutatnia.

Javítási lehetőség:

- A gyakorlatvezető az előadás után adhat lehetőséget egyszeri javításra, ahol az egyik projekthez tartozó diasort, illetve a beadandó dolgozatot lehet javítani.

Kötelező irodalom:

1. Höltzl Tibor, Veszprémi Tamás: Kémiai szimulációk az atomoktól a vegyipari reaktorokig Akadémiai Kiadó 2019 (ISBN: 9789630599726)
2. Békés Gábor, Kézdi Gábor: Adatelemzés, Alinea Kiadó 2024 (ISBN: 978-615-5669-71-2)
3. Peter Norvig, Stuart J. Russell: Mesterséges intelligencia I.-II. kötet - Modern megközelítésben Taramix Kiadó Kft. 2023 (ISBN: 9786155186943, 9786155186769)
4. Frank Neese: ORCA An ab initio, DFT and semiempirical SCF-MO package - Version 5.0.4 (https://www.orcasoftware.de/tutorials_orca/)
5. Steven M. Bachrach: Computational Organic Chemistry, (2 ed) Wiley 2014 (ISBN: 9781118291924).

Ajánlott irodalom:

1. Frank Jensen: Introduction to Computational Chemistry (3 ed.) John Wiley & Sons 2017 (ISBN: 9781118825983).
2. Tasi Gyula: Számítógépes kémia JATEPress 2010 (ISBN: 9789633150191)

Egyéb: