

ΧΗΜΕΙΑ ΚΑΙ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗ (ΧΑ131)

Σαράντος Μαρινάκης
s.marinakis@upatras.gr

Εισαγωγή στο μάθημα – 1^ο Μάθημα

Παρασκευή 4 Οκτωβρίου 2024
Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Πατρών

Περίγραμμα ομιλίας

- Καλωσόρισμα στο Χημικό Τμήμα και στο ΧΑ131
- Πως δουλεύουν οι υπολογιστές
- Μνήμη και επεξεργαστές σε υπολογιστές και κινητά
- Θεωρίες, δεδομένα και υπολογισμοί στη Χημεία

1^ο Μέρος: Καλώς ήλθατε στο Χημικό Τμήμα



Συγχαρητήρια!

- Καλώς ήλθατε στο Χημικό Τμήμα της Πάτρας.
(Και αν έρχεστε από άλλη περιοχή, καλώς ήλθατε στην Πάτρα)
- Η Χημεία ως καριέρα: δεν υπάρχει όριο (Μάργκαρετ Θάτσερ, 'Αγκελα Μέρκελ, James Ratcliffe)
- 4 (και πιθανότατα παραπάνω!) χρόνια είναι πολλά! Μην νοιάζεστε μόνον να περάσετε τα μαθήματα. Καλοί βαθμοί ίσως να χρειαστούν για ...
- Χρησιμοποιήστε τις γνώσεις (και εμπειρίες) που θα μαζέψετε για προσωπική και οικογενειακή προκοπή, αλλά και για το καλό όλου του κόσμου.
- Οι Χημικοί στην Αγγλία ζουν παραπάνω από το μέσο όρο. Γιατί; Χημικές ουσίες ...

Τι γνωρίζετε από (Χημεία &) Πληροφορική;

- Operation system – Λειτουργικά συστήματα
- Proprietary and free software - ιδιοταγές και ελεύθερο λογισμικό
- Επιδεξιότητες (περιήγηση στο internet, συγγραφή κειμένου / λογιστικού φύλλου, παρουσίασης)
- Social media
- Προγραμματισμός σε κάποια γλώσσα (C, Fortran, C++, Python, κλπ)
- Πιστοποιητικά γνώσεων; – θα λάβετε και από εμάς!

Τι προσβλέπετε να μάθετε στη Χ & Π;


- Μπορούμε να συζητήσουμε για θέματα που θα επιλέξετε
- Αλλά η ύλη είναι όπως περιγράφεται στον Οδηγό Σπουδών

Τι μπορεί να κάνει το Παν/μιο για εσάς;

https://www.upnet.gr

f X

Ιδιότητα ▾ Εγχειρίδια Συχνές Ερωτήσεις Αιτήσεις [Σύνδεση σε ...](#)

 UPnet
Πανεπιστήμιο Πατρών


Υπηρεσίες ▾ Υποστήριξη ▾ Ανακοινώσεις Επικοινωνία 🔍


Βρείτε την ψηφιακή υπηρεσία του Πανεπιστημίου Πατρών που σας ενδιαφέρει, **εύκολα** και **γρήγορα**.


Αναζητήστε εδώ... 🔍


Δημοφιλείς Υπηρεσίες

- 👤 Ιδρυματικός λογαριασμός - Upnet ID
- ✉️ Ηλεκτρονικό Ταχυδρομείο - Email
- 📁 Ηλεκτρονική Γραμματεία - Progress
- 📶 Ασύρματο Δίκτυο - Eduroam
- 🏢 Microsoft Office 365 Education
- 🗣️ Zoom Meetings
- 📊 IBM SPSS Statistics
- 🔑 Ψηφιακά Πιστοποιητικά - ΚΣΗΔΕ - Υπουργείο Ψηφιακής Διακυβέρνησης

 Υπηρεσίες

 Εγχειρίδια

 Συχνές Ερωτήσεις

 Αιτήσεις

Τι μπορεί να κάνει το Παν/μιο για εσάς;


https://www.upnet.gr/software/

f X

Ιδιότητα ▾ Εγχειρίδια Συχνές Ερωτήσεις Αιτήσεις [Σύνδεση σε ...](#)


UPnet
Πανεπιστήμιο Πατρών

Υπηρεσίες ▾ Υποστήριξη ▾ Ανακοινώσεις Επικοινωνία 🔍

 **Mathematica**


Λογισμικό συμβολικών υπολογισμών

[Περισσότερα](#)

 **Ansys**


Λογισμικό συμβολικών υπολογισμών

[Περισσότερα](#)

 **Microsoft Volume Licensing**


Λογισμικό Microsoft

[Περισσότερα](#)

 **Microsoft 365 Education**


Υπηρεσίες Cloud της Microsoft για εκπαιδευτικά ιδρύματα

[Περισσότερα](#)

 **Microsoft Azure Dev Tools for Teaching**


Λογισμικό Microsoft για έρευνα και εκπαίδευση

[Περισσότερα](#)

 **Matlab**


Λογισμικό για την επίλυση μαθηματικών προβλημάτων

[Περισσότερα](#)

 **IBM SPSS Statistics**


Προγράμματα στατιστικής επεξεργασία

[Περισσότερα](#)

 **Autodesk**

Λογισμικά Σχεδίασης από την Autodesk

[Περισσότερα](#)

 **ArcGIS**

Ολοκληρωμένη συλλογή από προϊόντα λογισμικού GIS

[Περισσότερα](#)

Τι μπορεί να κάνει το Παν/μιο για εσάς;

https://www.originlab.com/index.aspx?go=PRODUCTS/OriginStudentVersion



30+ years serving the scientific and engineering community

Buy Now

Try Origin for Free

Products ▾

Apps ▾

Purchase ▾

Support ▾

Communities ▾

About Us ▾

Contact Us

Products ▸ Student Version

Student

We are dedicated to supporting the academic community. Explore our flexible and cost-effective licensing options.

All Academic Licenses



For undergraduate and graduate students
(Post-docs or other academic staff not eligible)

Licensing Option*:

Node-locked (fixed-seat, computer-specific)

*Must be on a student-owned computer, not a University-owned computer

Student

Student Version

\$69

- License Term : 1-year
- Window Limit* : 30
- Eligible for latest version within license term

Online Store

Learning Edition

Free

- License Term : 6-month
- Window Limit* : 12
- Eligible for latest version within license term
- Valid **University email** required during registration

Request Learning Edition

* Window Limit means the number of accessible windows in an Origin project, including all kinds of windows - WorkBook, Matrix, Graph, Notes, Layout, etc., is limited to n in total. Windows beyond the first n will not be accessible, but will be saved with the project.

The information provided is for US and Canada only. For other countries, please [contact your local distributor](#).

[Origin and OriginPro system requirements](#)

Τι μπορεί να κάνει το Παν/μιο για εσάς;

The screenshot shows an email client interface with the following details:

- From:** "s.marinakis" <s.marinakis@upatras.gr>
- Subject:** Προσθήκη Παραλήπτη Κοινοποίησης | Προσθήκη Παραλήπτη
- Delivery Status:** Αναφορά Παράδοσης: Κατάσταση αναφοράς παράδοσης: Προτεραιότητα: Υψηλή
- Storage:** Αποθήκευση απεσταλμένου στο φάκελο: Απεσταλμένα
- Text Content:**

--
 Με τις καλύτερες ευχές / *Best wishes*,
 Σαράντος MARINAKIS / *Sarantos MARINAKIS MSc, DPhil (Oxon), MRSC, FHEA*
<https://www.support.chem.upatras.gr/en/faculty/marinakis.html>

Παρακαλώ σημειώστε ότι μερικές φορές χρειάζεται να στέλνω και να απαντώ σε email εκτός ωραρίου γραφείου. Δεν περιμένω μια άμεση απάντηση από εσάς και είμαι ευχαριστημένος να περιμένω μέχρι οι δικές σας ώρες γραφείου να επιτρέψουν.

Please note that I sometimes need to send and respond to email outside office hours.
I do not expect a response from you immediately and am happy to wait until your own office hours allow.

Χρησιμοποιήστε
το ιδρυματικό σας
Email!

Περιήγηση στην ιστοσελίδα του Τμήματος Χημείας

- Οδηγός σπουδών ...
- Ωρολόγιο πρόγραμμα ...
- Ανακοινώσεις ...
- Αιτήσεις – Ηλεκτρονική Γραμματεία

Περιήγηση στην ιστοσελίδα του Τμήματος Χημείας

https://www.chem.upatras.gr/el/



[ΤΜΗΜΑ](#)
[ΠΡΟΣΩΠΙΚΟ](#)
[ΣΠΟΥΔΕΣ](#)
[ΕΡΕΥΝΑ](#)
[ΑΝΑΚΟΙΝΩΣΕΙΣ](#)



Καλώς ήρθατε στον ιστότοπο του Τμήματος Χημείας του Πανεπιστημίου Πατρών

Το Τμήμα Χημείας, από την ίδρυσή του το 1966 και μέχρι σήμερα, αποτελεί ένα από τα σημαντικότερα εκπαιδευτικά και ερευνητικά κέντρα του Πανεπιστημίου Πατρών. Στελεχώνεται με υψηλού επιπέδου επιστημονικό προσωπικό, βελτιώνει διαρκώς τις υποδομές του και συνεχίζει τη δυναμική πορεία ανάπτυξής του έχοντας ως πρώτες προτεραιότητες την παροχή προπτυχιακής και μεταπτυχιακής εκπαίδευσης υψηλού επιπέδου, καθώς και την παραγωγή ποιοτικού και καινοτόμου ερευνητικού έργου υψηλής στάθμης. Οι πτυχιούχοι, οι κάτοχοι μεταπτυχιακού διπλώματος ειδίκευσης (MSc) και οι διδάκτορες (PhD) του Τμήματος Χημείας έχουν δυναμική και επιτυχημένη σταδιοδρομία σε εθνικό και διεθνές επίπεδο.

Η έρευνα στο Τμήμα της Χημείας είναι στην πρώτη γραμμή της μοντέρνας επιστήμης, τόσο στα βασικά της επιστημονικά πεδία (Ανόργανη, Οργανική, Φυσικοχημεία και Αναλυτική Χημεία) όσο και σε πεδία πολύ σημαντικά για τη βελτίωση της ποιότητας της ζωής και τη βιώσιμη ανάπτυξη (Βιοχημεία, Παθοβιοχημεία και Βιοχημική Ανάλυση, Συνθετική Οργανική και Ιατρική Χημεία, Βιοανοργανική Χημεία, Κατάλυση και Χημεία Διεπιφανειών, Χημεία και Βιοτεχνολογία Τροφίμων, Επιστήμη των πολυμερών, Δομική και Χημεία Περιβαλλοντική). Τα μέλη του διδακτικού και ερευνητικού προσωπικού συνεργάζονται στενά με Πανεπιστήμια, Ερευνητικά Κέντρα και Βιομηχανίες στην Ευρώπη, την Ασία και τις ΗΠΑ.

Το Πρόγραμμα Προπτυχιακών Σπουδών (ΠΠΣ) του Τμήματος Χημείας πιστοποιήθηκε πρόσφατα (08/04/2019) από την Αρχή Διασφάλισης και Πιστοποίησης της Ποιότητας στην Ανώτατη Εκπαίδευση. Το ΠΠΣ ικανοποιεί τις αρχές του Προτύπου Ποιότητας ΠΠΣ της ΑΔΙΠ και τις Αρχές Διασφάλισης Ποιότητας του Ευρωπαϊκού Χώρου Ανώτατης Εκπαίδευσης (ESG 2015) για το επίπεδο σπουδών 6 του Εθνικού και Ευρωπαϊκού Πλαισίου Προσόντων.

Στην ιστοσελίδα του Τμήματος θα βρείτε πληροφορίες για τα προ- και μεταπτυχιακά προγράμματα σπουδών, τις ερευνητικές δραστηριότητες των μελών του, χρήσιμες ανακοινώσεις, καθώς και συνδέσμους με ιστοσελίδες με ενδιαφέρουσα θεματολογία.

Από το 1982 το Τμήμα Χημείας, σύμφωνα με το Νόμο 1268/82 και σχετική απόφαση της Γενικής του Συνέλευσης, αποτελείται από τρεις Τομείς:

- Τομέας Α: *Οργανικής Χημείας, Βιοχημείας και Φυσικών Προϊόντων*
- Τομέας Β: *Φυσικοχημείας, Ανόργανης και Πυρηνικής Χημείας*
- Τομέας Γ: *Χημικών Εφαρμογών, Χημικής Ανάλυσης και Χημείας Περιβάλλοντος*

Περισσότερες πληροφορίες για τη διοικητική δομή, την οργάνωση και τα προγράμματα σπουδών δίνονται στον [Οδηγό Σπουδών](#) του τμήματος



- > [Αρχική](#)
- > [Erasmus-ECTS](#)
- > [Επικοινωνία](#)
- > [Οδηγός Σπουδών](#)
- > [Ωρολόγιο Πρόγραμμα](#)
- > [Πρόγραμμα εξετάσεων](#)
- > [Αιθουσιολόγιο](#)
- > [Κράτηση αιθουσών εκδηλώσεων](#)
- > [Υγιεινή και Ασφάλεια](#)
- > [Πράσινη Χημεία](#)
- > [Πρακτική Άσκηση](#)
- > [Απόφοιτοι Τμήματος](#)
- > [Σύνδεσμοι](#)
- > [Αναζήτηση](#)
- > [Λήψεις](#)
- > [Πολιτική Cookies](#)

Περιήγηση στην ιστοσελίδα του Τμήματος Χημείας

https://www.chem.upatras.gr/el/



ΧΗΜΕΙΑ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΠΑΤΡΩΝ
UNIVERSITY OF PATRAS
CHEMISTRY

ΤΜΗΜΑ

ΠΡΟΣΩΠΙΚΟ

ΣΠΟΥΔΕΣ

ΕΡΕΥΝΑ

ΑΝΑΚΟΙΝΩΣΕΙΣ



Πρόσφατες ανακοινώσεις

Πρέπει να το διαβάσω!

Πρωτοετείς 2024-25

04 ΩΡΟΛΟΓΙΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ Χ.Ε.2024-25 : ΓΕΡΜΑΝΙΚΑ & ΓΑΛΛΙΚΑ

Ο Κ Τ
2 0 2 4

Περισσότερες πληροφορίες στα επισυναπτόμενα έγγραφα. Πρόγραμμα ΓΕΡΜΑΝΙΚΑ Χ.Ε. 2024-25 Πρόγραμμα ΓΑΛΛΙΚΑ Χ.Ε. 2024-25

09:30 Προπτυχιακά

03 Απαιτούμενα δικαιολογητικά για την εγγραφή των εισαγομένων στην Τριτοβάθμια Εκπαίδευση Ελλήν...

Ο Κ Τ
2 0 2 4

Περισσότερες πληροφορίες στα επισυναπτόμενα έγγραφα. Εγκύκλιος δικαιολογητικών για εγγραφή Ομογενών 2024-25 ΚΥΡΩΣΗ ΠΙΝΑΚΩΝ ΟΜΟΓΕ...

13:37 Ανακοινώσεις

03 Δελτίο Τύπου 3.10.24 | Welcome to UP 2024: Το Welcome to UP 2024 κάνει στάση σε Αγρίνιο και Μεσολ...

Ο Κ Τ
2 0 2 4

Περισσότερες πληροφορίες στο επισυναπτόμενο έγγραφο. NEWSLETTER 2.10

12:05 Γραμματεία

02 ΠΜΣ "Αναλυτική Χημεία & Νανοτεχνολογία" - Έναρξη μαθημάτων

Ο Κ Τ
2 0 2 4

Αγαπητοί μεταπτυχιακοί φοιτητές, Οι διαλέξεις των μαθημάτων του ΠΜΣ 'Αναλυτική Χημεία & Νανοτεχνολογία' αρχίζουν την Τρίτη 15/1...

16:14 Μεταπτυχιακά

02 Εγγραφή στο εργαστήριο Γενικής Χημείας

Ο Κ Τ
2 0 2 4

Καλούνται οι φοιτητές που επιθυμούν να συμμετέχουν στο εργαστήριο Γενικής Χημείας να εγγραφούν το συντομότερο δυνατόν, στη σε...

16:12 Προπτυχιακά

02 Παράταση 2 ημερών στις εγγραφές πρωτοετών

Ο Κ Τ
2 0 2 4

Περισσότερες πληροφορίες στο επισυναπτόμενο έγγραφο. Παράταση ΔΕΕ - Εγγραφή Πρωτοετών

13:33 Γραμματεία

26 Ανακοίνωση για το μάθημα "Αρχές και Εφαρμογές Πυρηνικής Χημείας"

Σ Ε Π
2 0 2 4

Παρακαλούνται οι φοιτητές που επιθυμούν να παρακολουθήσουν το μάθημα επιλογής του 7ου εξαμήνου "Αρχές και Εφαρμογές Πυρηνικής...

17:24 Προπτυχιακά

26 ΑΝΑΚΟΙΝΩΣΗ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ "ΦΥΣΙΚΕΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΣ ΧΗΜΙΚΗΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ"

Σ Ε Π
2 0 2 4

Αγαπητές/-οί φοιτήτριες/-ές, σας καλωσορίζουμε στο μάθημα ΦΥΣΙΚΕΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΣ ΧΗΜΙΚΗΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ, ευχόμενοι μία καλή νέα ακαδη...

13:42 Προπτυχιακά

26 ΑΝΑΚΟΙΝΩΣΗ ΓΙΑ ΤΟ ΜΑΘΗΜΑ «ΧΗΜΕΙΑ & ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ ΤΡΟΦΙΜΩΝ – ΟΙΝΟΛΟΓΙΑ Ι»

Σ Ε Π
2 0 2 4

Καλούνται οι φοιτητές που θα παρακολουθήσουν το μάθημα ή/και το εργαστήριο του 7ου εξαμήνου, «ΧΗΜΕΙΑ & ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ ΤΡΟΦΙΜΩΝ – ΟΙ...

11:35 Προπτυχιακά

26 Ενζυμολογία

Περιήγηση στην ιστοσελίδα του Τμήματος Χημείας

<https://www.chem.upatras.gr/el/?view=article&id=4864;eservice&catid=2>



+30 2610 996202 & 996205 (προπτυχιακά), 996203 & 996204 (μεταπτυχιακά)

chemsecr@upatras.gr



ΤΜΗΜΑ

ΠΡΟΣΩΠΙΚΟ

ΣΠΟΥΔΕΣ

ΕΡΕΥΝΑ

ΑΝΑΚΟΙΝΩΣΕΙΣ



Ηλεκτρονική πύλη κατάθεσης αιτημάτων προς τη γραμματεία

Η ηλεκτρονική πύλη βρίσκεται στον υπερσύνδεσμο: <https://eservice.upatras.gr/>

Ακολουθεί περιγραφή των ψηφιακών υπηρεσιών:

1. ΑΙΤΗΣΕΙΣ ΓΙΑ ΠΡΟΠΤΥΧΙΑΚΟΥΣ ΦΟΙΤΗΤΕΣ

1.1. Αίτηση αναγνώρισης Μαθημάτων <https://eservice.upatras.gr/case/aitisi-anagnorisis-mathimaton/description/>

- Αντίγραφο αναλυτικής βαθμολογίας των μαθημάτων προς αναγνώριση
- Περιγραφή του μαθήματος ή των μαθημάτων του Τμήματος Προέλευσης με βάση τα οποία ζητείται η αναγνώριση (βλ. Οδηγό Σπουδών Τμ. Προέλευσης)

1.2. Αίτηση αναστολής φοίτησης προπτυχιακών φοιτητών <https://eservice.upatras.gr/case/aitisi-anastolis-foitisis-proptychiakon-foititon/description/>

- Αντίγραφο αστυνομικής ταυτότητας.
- Πρωτότυπη Ακαδημαϊκή Ταυτότητα. Για την ολοκλήρωση της διαδικασίας απαιτείται η προσκόμιση της πρωτότυπης Ακαδημαϊκής Ταυτότητας στη Γραμματεία του Τμήματος.
- Υπεύθυνη Δήλωση Απίστευσης ή Μη έκδοσης Ακαδημαϊκής Ταυτότητας από <https://www.gov.gr>, σε περίπτωση που ο φοιτητής έχει απωλέσει ή δεν έχει εκδώσει Ακαδημαϊκή Ταυτότητα.
- Άλλα απαιτούμενα Δικαιολογητικά που αναγράφονται στις ανακοινώσεις της Γραμματείας.

1.3. Αίτηση βεβαίωσης περάτωσης σπουδών προπτυχιακών φοιτητών <https://eservice.upatras.gr/case/aitisi-vevaiosis-peratosis-spoudon-proptychiakon-foititon/description/>



▶ Αρχική

▶ Erasmus-ECTS

▶ Επικοινωνία

▶ Οδηγός Σπουδών

▶ Ωρολόγιο Πρόγραμμα

▶ Πρόγραμμα εξετάσεων

▶ Αιθουσιολόγιο

▶ Κράτηση αιθουσών εκδηλώσεων

▶ Υγιεινή και Ασφάλεια

▶ Πράσινη Χημεία

▶ Πρακτική Άσκηση

Χρήσιμη βιβλιογραφία (Εύδοξος!)

1. P. Norton, Εισαγωγή στους Υπολογιστές, 6^η έκδοση, Εκδόσεις Τζιόλα, 2018
2. Ι. Θ. Φαμέλης, Υπολογιστικά μαθηματικά – αριθμητικές μέθοδοι και μέθοδοι βελτιστοποίησης με υλοποίηση σε MATLAB (Octave) και Python, Εκδόσεις Έκρικη, 2021
3. Ν. Σαμαράς, Κ. Τσιπλίδης, Το βιβλίο της Python', Εκδόσεις Κρικη, 2019.
4. H. G. Hecht, Mathematics in Chemistry, Prentice Hall, 1990
5. E. Steiner, The Chemistry Maths Book, Oxford, 1996

Περιεχόμενο μαθήματος (1/4)

- Εισαγωγή στη δομή του υπολογιστή.
- Χρήση του υπολογιστή, επικοινωνία μέσω δικτύου.
- Εισαγωγή στο διαδίκτυο.
- Αναζήτηση, άντληση και επεξεργασία επιστημονικής πληροφορίας.
- Βάσεις δεδομένων.
- Προγραμματισμός Η/Υ με έμφαση σε προβλήματα συναφή με θέματα Μαθηματικών για την Φυσική και την Χημεία.

Περιεχόμενο μαθήματος (2/4)

- Υπολογισμοί σειρών.
- Πράξεις με πίνακες.
- Ρίζες εξισώσεων.
- Αριθμητική ολοκλήρωση.
- Παρεμβολή κατά Lagrange.
- Επίλυση συνήθων διαφορικών εξισώσεων, συστήματα διαφορικών εξισώσεων.
- Μήκος καμπυλών.
- Fractals.
- Εισαγωγή στον προγραμματισμό (MATLAB)

Περιεχόμενο μαθήματος (3/4)

- Κειμενογραφία.
- Εισαγωγή στην χρήση βασικού λογισμικού (WORD, EXCEL/OFFICE, POWERPOINT).
- Εισαγωγή στο ORIGIN.
- Σχεδίαση συναρτήσεων, πολυωνυμική προσαρμογή, επεξεργασία γραφικών παραστάσεων.
- Άντληση επιστημονικών δεδομένων από το διαδίκτυο.
- Σύνταξη και παρουσίαση επιστημονικού κειμένου.

Περιεχόμενο μαθήματος (4/4)

- Υποχρεωτική σύνταξη πλήρους επιστημονικής εργασίας (Project) επί δεδομένου θέματος χημικού ενδιαφέροντος με άντληση πληροφορίας και επιστημονικών στοιχείων από το διαδίκτυο.
- Επιλέγεται ένα μόριο/μοριακό οικοδόμημα.
- Ο φοιτητής καλείται να παρουσιάσει αυνοπτικώς την σπουδαιότητα και τις εφαρμογές του μορίου, ιστορικά στοιχεία από την συμβολή του στη Χημεία, φυσικές και χημικές ιδιότητες, τοξικότητα, μεθόδους σύνθεσης.

ΧΑ131: Μαθησιακά αποτελέσματα

Στο τέλος του μαθήματος ο φοιτητής:

- Θα έχει εμπεδώσει βασική ύλη των μαθηματικών, και βασική μεθοδολογία επίλυσης επιστημονικών προβλημάτων
- Θα γνωρίζει το χειρισμό ηλεκτρονικού υπολογιστή για προχωρημένες επιστημονικές εφαρμογές, και χρήση του διαδικτύου

Πρόγραμμα

Ημέρα	Ώρες	Δραστηριότητα	Τόπος
<p>«Επιλογή» 1 ώρα ανάμεσα σε:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Δευτέρα 2-3 μμ - Δευτέρα 3-4 μμ - Δευτέρα 4-5 μμ - Τετάρτη 4-5 μμ - Τετάρτη 5-6 μμ 		Εργαστήριο (υπεύθυνος κ. Κώστας Μακρής)	Υπολογιστικό Κέντρο, Βόρειο Κτήριο Ισόγειο
Παρασκευή	11-1μμ	Διάλεξη (υπεύθυνοι κ. Σαράντος Μαρινάκης για τις εβδομάδες 1-6 κ. Γεώργιος Μαρούλης για τις εβδομάδες 7-12	ΧΗ7 (NNK)

ΧΑ131: Εξετάσεις

- Τελική εξέταση εργαστηρίου (80%)
- Αξιολόγηση της επιστημονικής εργασίας (20%):
Συγγραφή προγράμματος για την επίλυση μαθηματικού προβλήματος

1^ο Μέρος: Υπολογιστές



ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΕΣ

- Ορισμός (από Wikipedia!):

Ο ηλεκτρονικός υπολογιστής (συντ. Η/Υ) είναι μια μηχανή κατασκευασμένη κυρίως από ψηφιακά ηλεκτρονικά κυκλώματα και δευτερευόντως από ηλεκτρικά και μηχανικά συστήματα, και έχει ως σκοπό να επεξεργάζεται πληροφορίες.

Ο ηλεκτρονικός υπολογιστής είναι ένα αυτοματοποιημένο, ηλεκτρονικό, ψηφιακό επαναπρογραμματιζόμενο σύστημα γενικής χρήσης το οποίο μπορεί να επεξεργάζεται δεδομένα βάσει ενός συνόλου προκαθορισμένων οδηγιών, των εντολών που συνολικά ονομάζονται πρόγραμμα.

Μέρη υπολογιστή

- υλικό (hardware) και λογισμικό (software):
- hardware: αποτελείται από:
 - κεντρική μονάδα επεξεργασίας (central processing unit, CPU)
 - κεντρική μνήμη (RAM & ROM-BIOS: read only memory & basic input / output system)
 - μονάδες εισόδου-εξόδου (πληκτρολόγιο, ποντίκι, οθόνη, κλπ)
 - εσωτερικές (ή εξωτερικές) μονάδες ανάγνωσης και αποθήκευσης δεδομένων όπως σκληρός δίσκος π.χ. solid state drive, δισκέτα (!), CD, DVD
 - περιφερειακές συσκευές όπως εκτυπωτής, σαρωτής, μόντεμ, κλπ

Ξεχάσαμε τίποτα;

Χαρακτηριστικά ΣΥΝΗΘΙΣΜΕΝΟΥ κινητού

- Επεξεργαστές ...
- RAM ...
- Μνήμη σκληρού / σκληρών δίσκου / δίσκου ...

Χαρακτηριστικά ΣΥΝΗΘΙΣΜΕΝΟΥ ΚΙΝΗΤΟΥ

3. iPhone 11 Pro Max

Big phone, top price

Weight: 226g | **Dimensions:** 158 x 77.8 x 8.1mm | **OS:** iOS 13 | **Screen size:** 6.5-inch | **Resolution:** 1242 x 2688 | **CPU:** A13 Bionic | **RAM:** 4GB | **Storage:** 64/256/512GB | **Battery:** Unknown | **Rear camera:** 12MP+12MP+12MP | **Front camera:** 12MP

- ⊕ Three rear cameras
- ⊕ Fastest, best iPhone out there
- ⊕ Even more battery
- ⊖ Expensive
- ⊖ Mostly unchanged

\$1,099 [VIEW AT AMAZON](#)

\$1,099 [View at Amazon](#)
See all prices (32 found)

The iPhone 11 Pro Max is not only a confusing shift in naming convention - it's the biggest, fastest, baddest iPhone out there. It's also the most expensive at \$1,099 starting price, which only goes up if you expand storage.

Not much has changed from the iPhone XS Max, aside from the upgraded camera suite - but then again, adding an ultrawide lens is a big upgrade. The photo software has been upgraded, too, and switching between zoom levels is far smoother here than in other phones.

The battery level has been improved a staggering 4 hours over the iPhone XS Max, which holds true in our testing. And if you can get beyond the weird-looking triple-lens rear camera block, this is truly the most powerful iPhone out there.

Χαρακτηριστικά ΣΥΝΗΘΙΣΜΕΝΟΥ υπολογιστή

- Επεξεργαστές ...
- RAM ...
- Μνήμη σκληρού / σκληρών δίσκου / δίσκου ...

Χαρακτηριστικά ΣΥΝΗΘΙΣΜΕΝΟΥ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΗ



1-24 of over 4,000 results for **Electronics : Computers & Accessories : Computers & Tablets : Desktops : Windows**

Sort by: Featured

- Department**
- < Electronics
 - < Computers & Accessories
 - < Computers & Tablets
 - Desktops**
 - All-in-Ones
 - Minis
 - Towers

Avg. Customer Review

- ★★★★★ & Up
- ★★★★☆ & Up
- ★★★☆☆ & Up
- ★★☆☆☆ & Up

Featured Brands

- Dell
- HP
- CyberpowerPC
- iBUYPOWER
- Lenovo
- Acer
- Skytech Gaming

[See more](#)

Price

- Under \$500
- \$500 to \$600
- \$600 to \$800
- \$800 to \$1000
- \$1000 & Above

\$ Min \$ Max Go



CYBERPOWERPC Gamer Xtreme VR Gaming PC, Intel Core i5-9400F 2.9GHz, NVIDIA GeForce GTX 1660 6GB, 8GB DDR4, 240GB SSD, 1TB HDD, WiFi Ready & Win 10 Home (GXiVR8060A8, Black)

★★★★☆ < 3,628

Personal Computers

\$749⁹⁹

Ships to Greece

Only 15 left in stock - order soon.



CyberpowerPC Gamer Supreme Liquid Cool Gaming PC, Intel Core i7-9700K 3.6GHz, NVIDIA GeForce RTX 2070 Super 8GB, 16GB DDR4, 1TB PCI-E NVMe SSD, WiFi Ready & Win 10 Home (SLC8260A2,...)

★★★★☆ < 1,573

Personal Computers

\$1,399⁹⁹

Ships to Greece



iBUYPOWER Gaming PC Computer Desktop Element 9260 (Intel Core i7-9700F 3.0Ghz, NVIDIA GeForce GTX 1660 Ti 6GB, 16GB DDR4, 240GB SSD, 1TB HDD, Wi-Fi & Windows 10 Home) Black

★★★★☆ < 2,602

Personal Computers

\$1,029⁹⁹

Ships to Greece

Χαρακτηριστικά ΥΠΕΡΥΠΟΛΟΓΙΣΤΗ

- Επεξεργαστές ...
- RAM ...
- Μνήμη σκληρού / σκληρών δίσκου / δίσκου ...

Χαρακτηριστικά ΥΠΕΡΥΠΟΛΟΓΙΣΤΗ



https://hpc.grnet.gr/supercomputer/#hardware

120%



Τεχνική Περιγραφή ▾

Πρόσβαση ▾

Υποστήριξη ▾

Εκπαίδευση ▾

Διεθνείς Συνεργασίες ▾

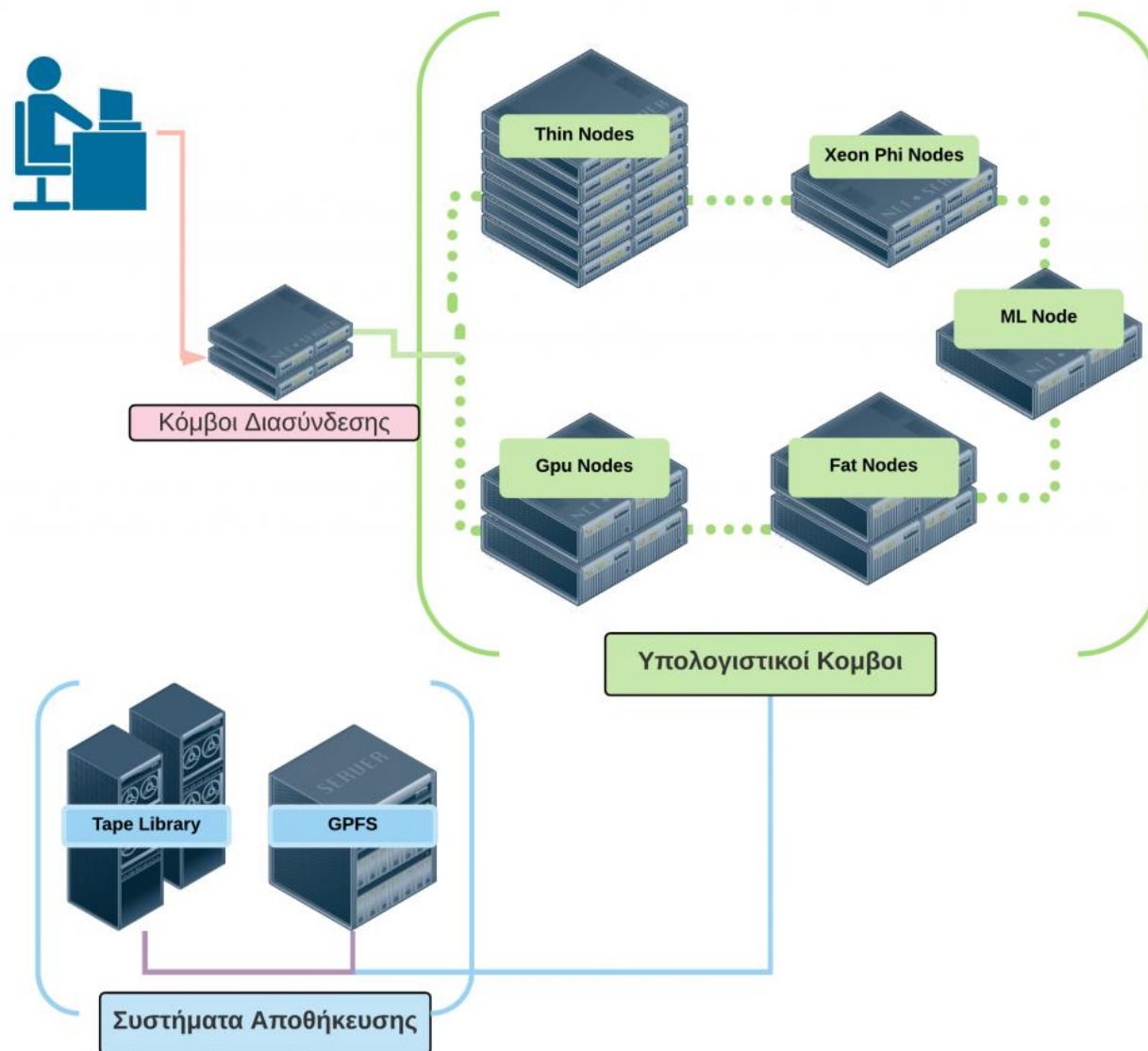
Αρχιτεκτονική του συστήματος

Ο ARIS συνδυάζει 5 διαφορετικές αρχιτεκτονικές διαμοιρασμένες σε αντίστοιχες “νησίδες κόμβων”

Αναλυτικά, η υποδομή αποτελείται από:

- Μία νησίδα η οποία διαθέτει 426 υπολογιστικούς κόμβους (**thin nodes**). Κάθε κόμβος διαθέτει δύο επεξεργαστές και κάθε επεξεργαστής περιέχει 10 επεξεργαστικούς πυρήνες προσφέροντας έτσι συνολικά 8.520 πυρήνες (CPU cores). Οι κόμβοι αυτοί είναι κατάλληλοι για εφαρμογές υψηλής παραλληλίας που μπορούν να σπάσουν τα δεδομένα τους σε πολλά μικρά κομμάτια πριν τα επεξεργαστούν.
- Μια νησίδα κόμβων μεγάλης μνήμης (**fat nodes**) που αποτελείται από 44 κόμβους. Κάθε κόμβος προσφέρει 4 επεξεργαστές, 40 πυρήνες και 512 GB κεντρικής μνήμης ανά κόμβο. Οι κόμβοι αυτοί είναι κατάλληλοι για εφαρμογές που χρειάζονται πολύ μεγάλη κεντρική μνήμη και όχι τόσο για υψηλή κλιμάκωση.
- Μια νησίδα κόμβων επιταχυντών GPU (**gpu nodes**) που αποτελείται από 44 κόμβους. Κάθε κόμβος περιέχει 2 επεξεργαστές με 10 πυρήνες ανά επεξεργαστή, 64 GB μνήμης και 2 κάρτες γραφικών GPU NVidia K40. Οι κόμβοι αυτοί είναι κατάλληλοι για εφαρμογές που υλοποιούν υπολογιστικές πράξεις που μπορούν να αξιοποιήσουν τις κάρτες γραφικών ως συνεπεξεργαστές για επιτάχυνση των υπολογισμών.
- Μια νησίδα κόμβων επιταχυντών Xeon Phi (**phi nodes**) που αποτελείται από 18 κόμβους, καθένας εκ των οποίων περιέχει 2 επεξεργαστές με 10 πυρήνες, 64 GB μνήμης και 2 συνεπεξεργαστές Intel Xeon Phi 7120P. Είναι κατάλληλη για παράλληλες εφαρμογές που αξιοποιούν την τεχνολογία συνεπεξεργαστών της Intel Xeon Phi.
- Μια νησίδα κόμβου μηχανικής μάθησης (**ml node**) που αποτελείται από 1 εξυπηρετητή, ο οποίος περιέχει 2 επεξεργαστές Intel E5-2698v4, 512 GB κεντρικής μνήμης και 8 κάρτες GPU NVIDIA V100.

Χαρακτηριστικά ΥΠΕΡΥΠΟΛΟΓΙΣΤΗ



Διαδίκτυο

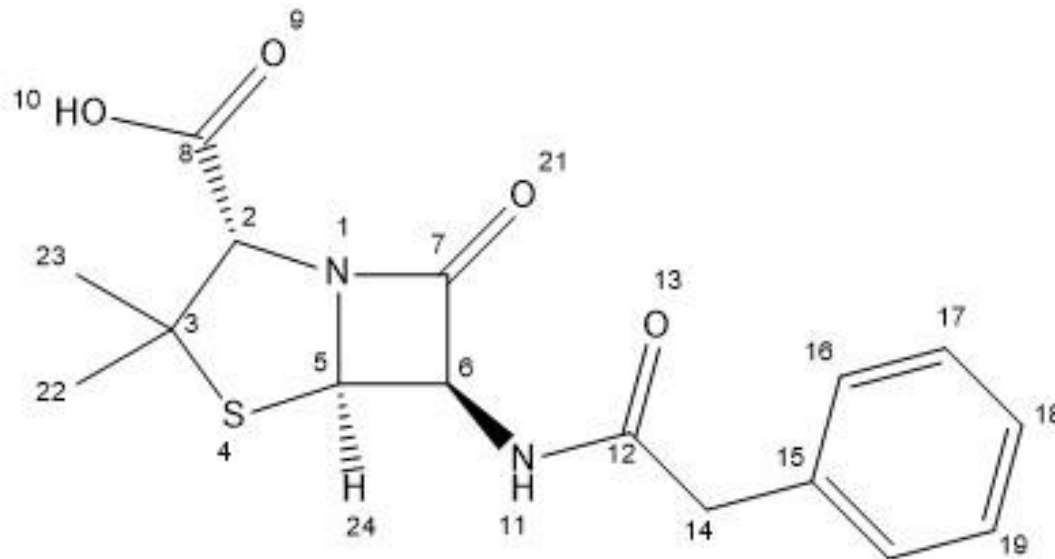
- Θα μπορούσαμε να γράψουμε πολλά αλλά όλοι έχετε γνώση του διαδικτύου για απλές εφαρμογές
- Όσο και αν ακούγεται παλιομοδίτικο, το διαδίκτυο και ιδιαίτερα τα social media έχουν πολλούς κινδύνους
- Μπορείτε να αναφέρετε ορισμένους;
- Προσέχετε την ψυχική σας υγεία! Αν χρειαστείτε βοήθεια, το Παν/μιο μπορεί να βοηθήσει

Θεωρίες και υπολογισμοί στη Χημεία

- Τι είδους θεωρίες και υπολογισμούς πιστεύετε ότι μπορεί να είναι σχετικοί και χρήσιμοι στη Χημεία;

Θεωρίες και υπολογισμοί στη Χημεία

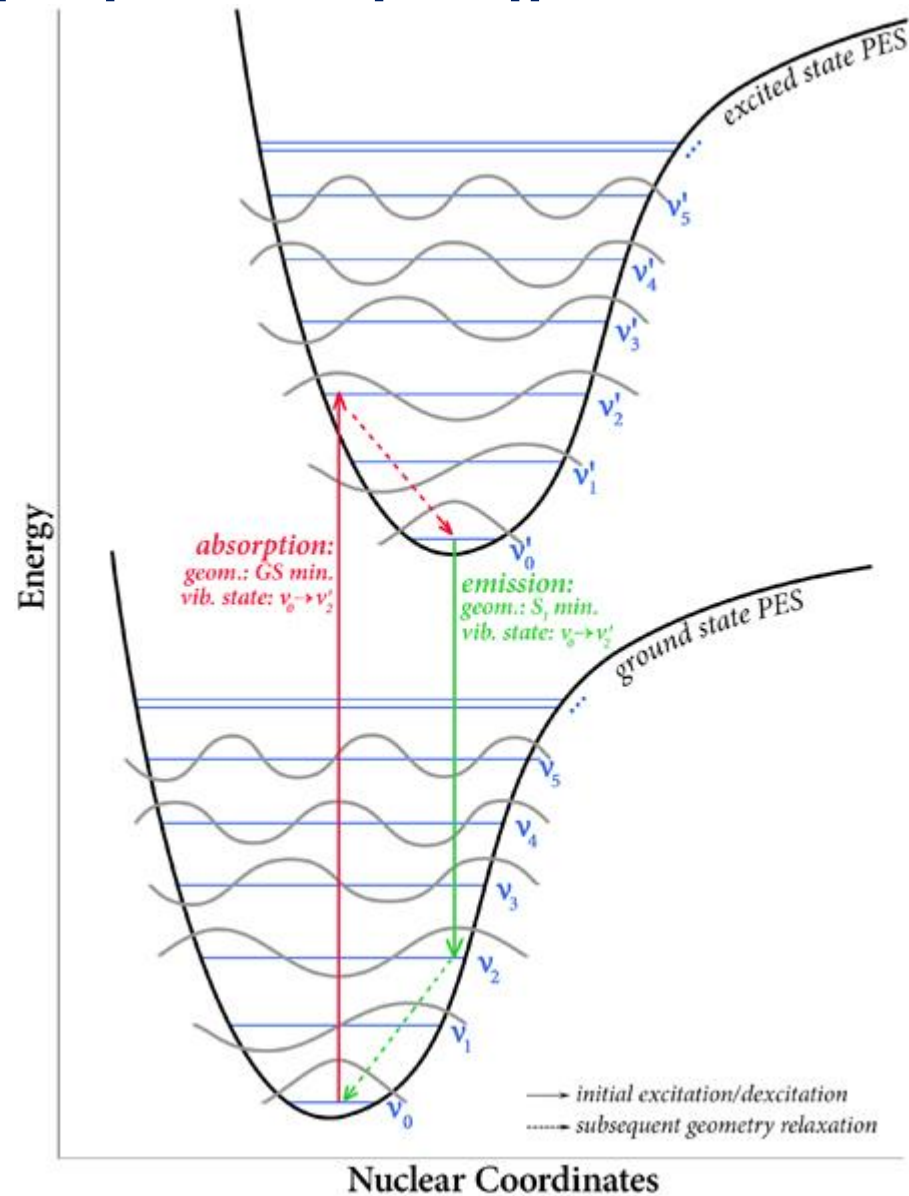
- Μοριακή γεωμετρία (στην ισορροπία): μήκη δεσμών, γωνίες, κλπ)



(2S,5R,6R)-3,3-dimethyl-7-oxo-6-[(2-phenylacetyl)amino]-4-thia-1-azabicyclo[3.2.0]heptane-2-carboxylic acid

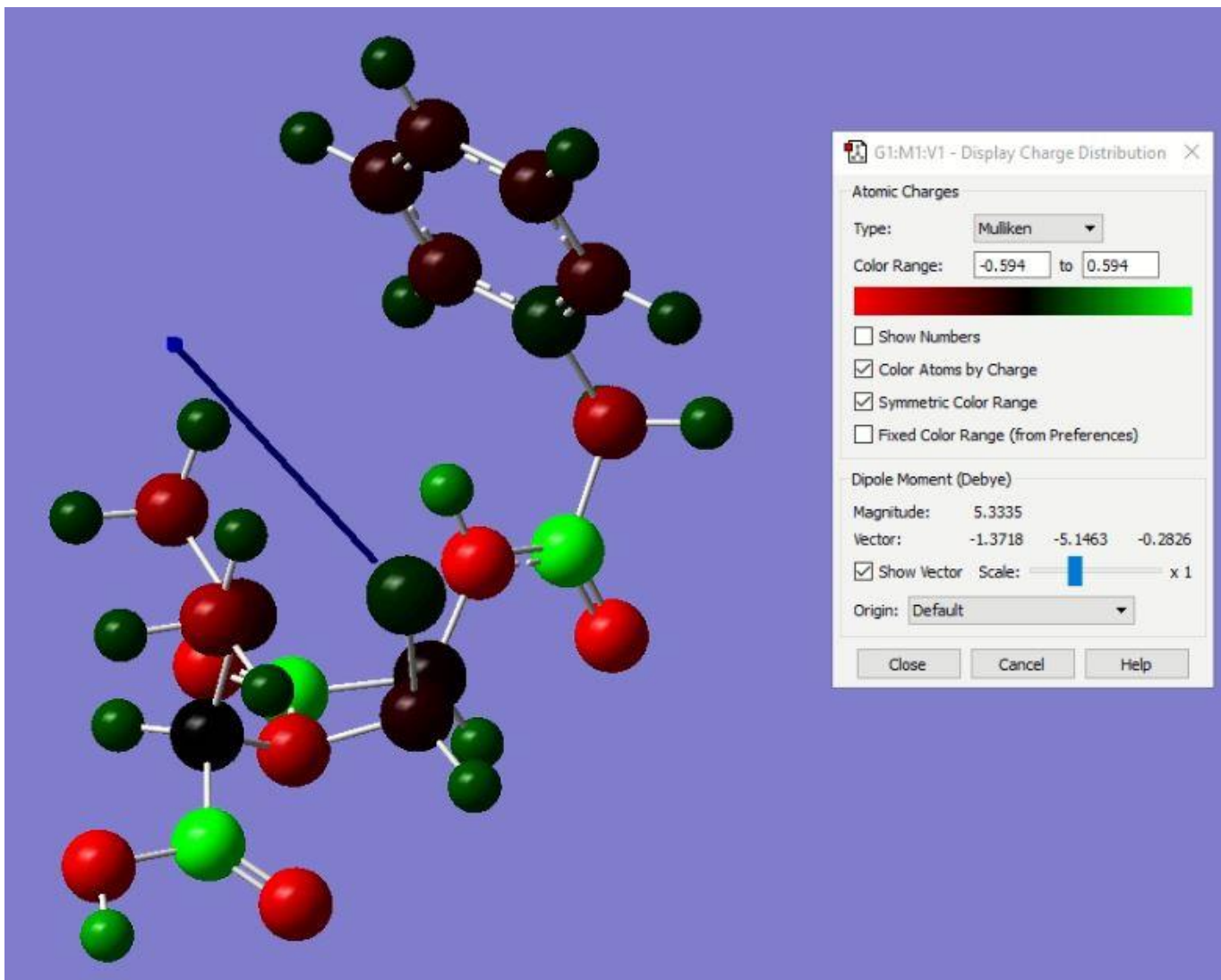
Θεωρίες και υπολογισμοί στη Χημεία

- Απόλυτες τιμές ενέργειας



Θεωρίες και υπολογισμοί στη Χημεία

- Μοριακές ιδιότητες (κατανομή φορτίων, δίπολα, ...)

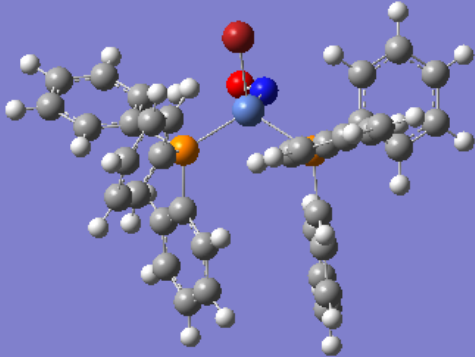


Θεωρίες και υπολογισμοί στη Χημεία

- Μοριακά τροχιακά

G1:M1 - MOs

Current Surface: None



199 (a)	0.06654
198 (a)	0.05978
197 (a)	0.05654
196 (a)	0.04628
195 (a)	0.04165
194 (a)	0.03287
193 (a)	0.01765
192 (a)	0.00401
191 (a)	-0.00360
190 (a)	-0.02670
189 (a)	-0.03354
188 (a)	-0.03796
187 (a)	-0.04206
186 (a)	-0.04762
185 (a)	-0.05068
184 (a)	-0.05414

Charge: 0 Spin: Singlet Gaussian MOs from: D:/nickel/gaussian-new/tddft/2ndtry/a.log

New MOs Visualize Calculation Diagram

Wavefunction: Restricted Adjust Occupancy

Permutation List:

Occupancy (Alpha) 1-734

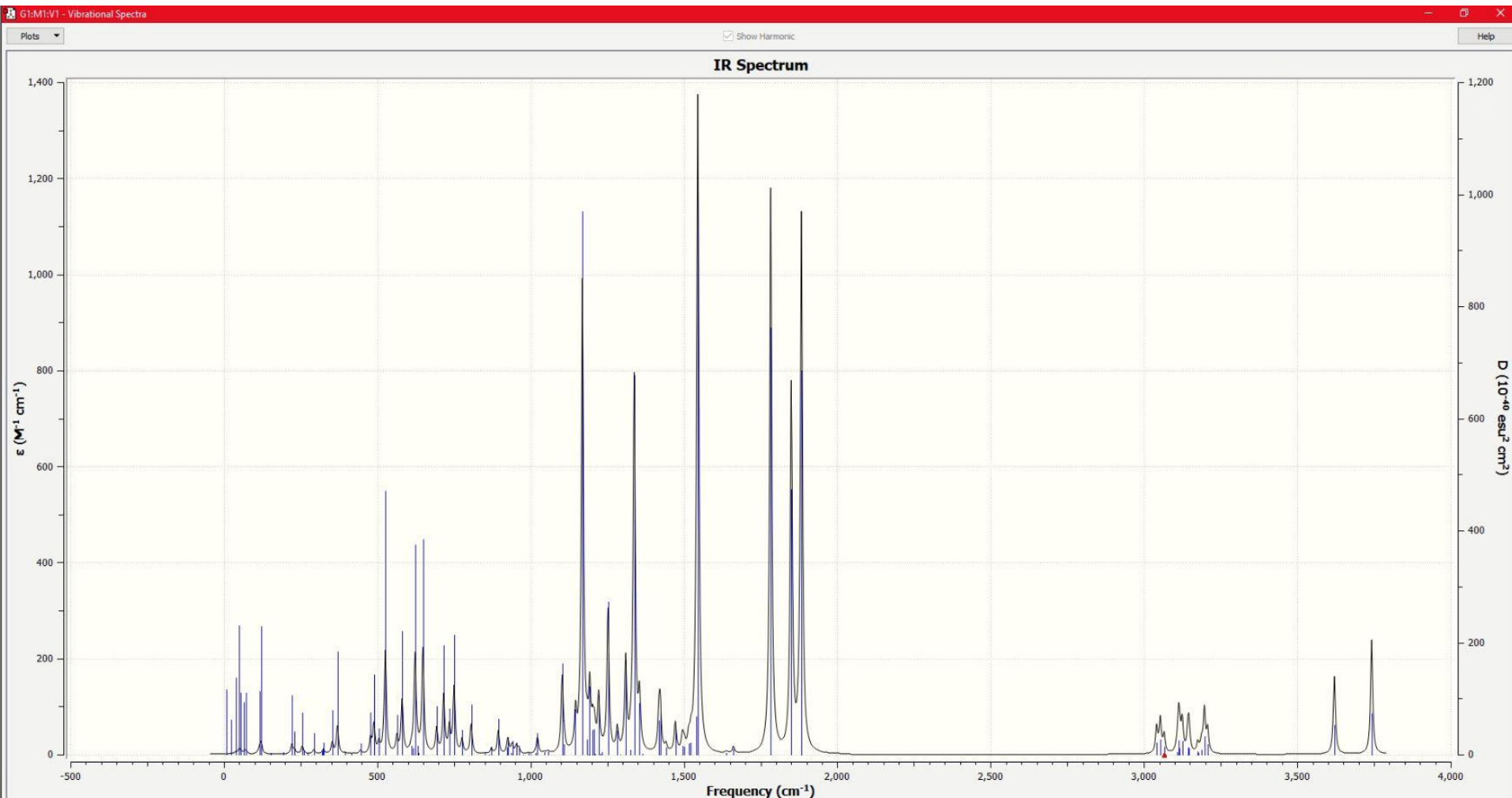
Ok Cancel Help

Θεωρίες και υπολογισμοί στη Χημεία

- Διάφορα φάσματα ...

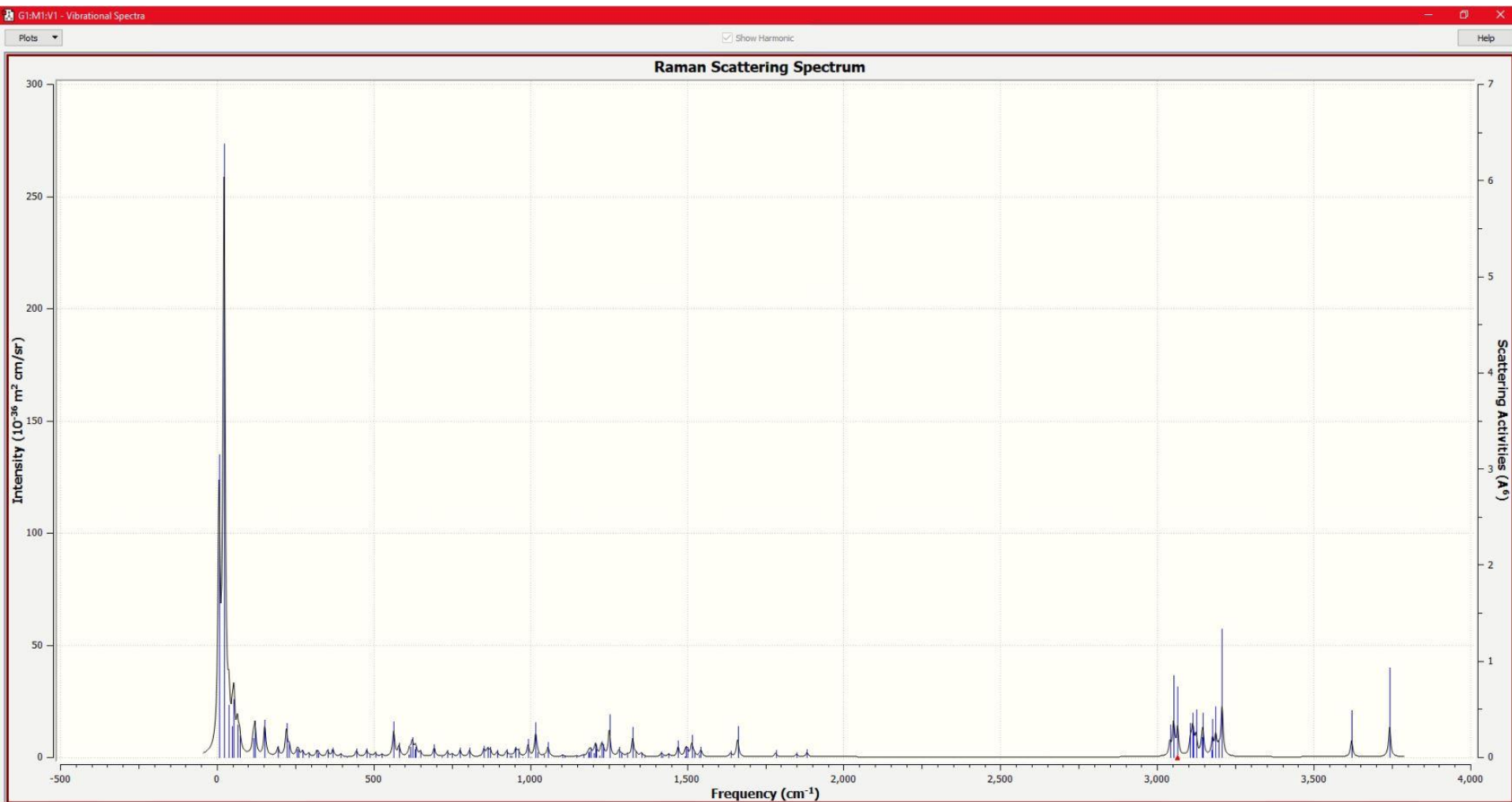
Θεωρίες και υπολογισμοί στη Χημεία

- Δονητική φασματοσκοπία



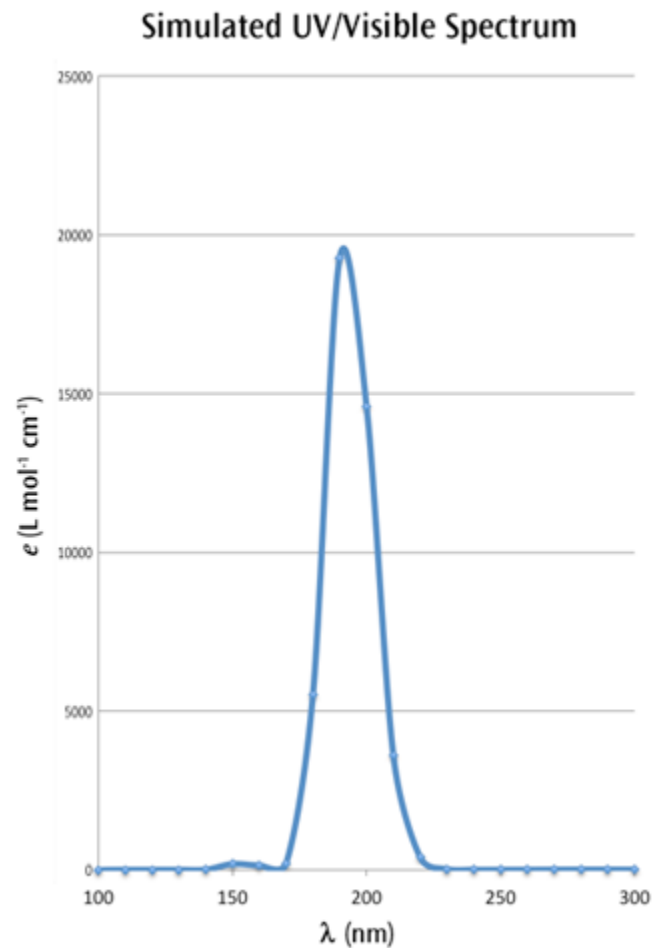
Θεωρίες και υπολογισμοί στη Χημεία

- Δονητική φασματοσκοπία



Θεωρίες και υπολογισμοί στη Χημεία

- Ηλεκτρονική φασματοσκοπία



Αναζήτηση, άντληση και επεξεργασία επιστημονικής πληροφορίας

- Η πληροφορία είναι δύναμη και πλούτος
- Το λακωνίζειν εστί φιλοσοφείν
- Η υπερβολικά πολλή πληροφορία είναι ...

Αναζήτηση, άντληση και επεξεργασία επιστημονικής πληροφορίας

- Τα google και το bing είναι γενικά χρήσιμα

Αναζήτηση, άντληση και επεξεργασία επιστημονικής πληροφορίας

- Chemical Abstracts ... SciFinder

Αναζήτηση, άντληση και επεξεργασία επιστημονικής πληροφορίας

← → ↻ 🏠 <https://scifinder.cas.org/scifinder/view/scifinder/scifinderExplore.jsf> 120% ⋮ 📄 🌐 🗨️

CAS Solutions **SCIFINDER** A CAS SOLUTION Preferences | SciFinder Help **Sign Out** Welcome Sarantos Marinakis

SciFinderⁿ is here! Learn more about the power of n. Participating customers can access using their existing SciFinder credentials by clicking here: <https://scifinder-n.cas.org>

Explore ▾ Saved Searches ▾ SciPlanner Save Print Export

Research Topic "Penicillin G" > references (33596)

REFERENCES

Analyze Refine Categorize Sort by: Accession Number ▾

0 of 33596 References Selected Page: 1 of 336

Sample Analysis:

Author Name ▾

Anonymous ≥ 56

Fernandez Lafuente Roberto ≥ 43

Guisan Jose M ≥ 43

Appelbaum Peter C ≥ 41

Jacobs M R ≥ 37

Appelbaum P C ≥ 32

Unemo Magnus ≥ 29

Jacobs Michael R ≥ 27

Reinert Ralf Rene ≥ 27

Jones Ronald N ≥ 25

Show More

1. **Comparative genomics of Alexander Fleming's original Penicillium isolate (IMI 15378) reveals sequence divergence of penicillin synthesis genes**

 By Pathak, Ayush; Nowell, Reuben W.; Wilson, Christopher G.; Ryan, Matthew J.; Barracough, Timothy G.
 From Scientific Reports (2020), 10(1), 15705. | Language: English, Database: CAPLUS

2. **Bacterial isolation and identification test of canine otitis media in Kunming**

 By Zhang, Hai-yan; Yang, Fa-gen; Zhao, Zhen-jiang; Ye, Yan-lin; Yang, Zi-jiang; Fu, Si; Dai, Fei-yan
 From Zhongshouyi Yiyao Zazhi (2016), 35(4), 49-51. | Language: Chinese, Database: CAPLUS

3. **Isolation, identification and drug sensitivity test on fecal bacteria in porcupine suffering from diarrhea**

 By Yang, Fa-gen; Zhang, Hai-yan; Ye, Yan-lin; Yang, Zi-jiang; Fu, Si; Zhang, Bin; Dai, Fei-yan; Xiao, Xiao
 From Zhongshouyi Yiyao Zazhi (2016), 35(2), 40-42. | Language: Chinese, Database: CAPLUS

4. **Method for extracting penicillin g residue from avian tissues, avian eggs or pork and derivatizing penicillin g residue [Machine Translation].**

 By Xie, Kaizhou; Liu, Chujun; Pang, Maoda; Xie, Xing; Wang, Bo; Yan, Zuhao; Wang, Xutang; Diao, Zhixiang; Zhang, Peliang; Guo, Yawen; et al
 From Faming Zhuanli Shenqing (2020), CN 111707762 A 20200925. | Language: Chinese, Database: CAPLUS

5. **A novel screening test to predict the developmental toxicity of drugs using human induced pluripotent stem cells**

 By Aikawa, Nobuo
 From Journal of Toxicological Sciences (2020), 45(4), 187-199. | Language: English, Database: CAPLUS

6. **Enterotoxin genes and antimicrobial resistance in Staphylococcus aureus isolated from food products in Algeria**

Αναζήτηση, άντληση και επεξεργασία επιστημονικής πληροφορίας

- Web of knowledge

Results: 9,848

(from Web of Science Core Collection)

You searched for: TOPIC: (penicillin G) ...More

Create an alert

Refine Results

Search within results for...



Filter results by:

- Highly Cited in Field (38)
- Open Access (2,905)
- Associated Data (71)

Refine

Publication Years

- 2021 (1)
- 2020 (289)
- 2019 (428)
- 2018 (387)
- 2017 (371)

more options / values...

Sort by: Date Times Cited Usage Count Relevance More

1 of 985

 Select Page [Export...](#) [Add to Marked List](#)

-
- 1.
- Characterization of antimicrobial-resistant Staphylococcus aureus from retail foods in Beijing, China**

By: Li, Heng; Tang, Taya; Stegger, Marc; et al.

FOOD MICROBIOLOGY Volume: 93 Article Number: 103603 Published: FEB 2021

[Find it Oxford](#) [View Abstract](#)

-
- 2.
- Multi-class analysis of 46 antimicrobial drug residues in pond water using UHPLC-Orbitrap-HRMS and application to freshwater ponds in Flanders, Belgium**

By: Goessens, T.; Huysman, S.; De Troyer, N.; et al.

TALANTA Volume: 220 Article Number: 121326 Published: DEC 1 2020

[Find it Oxford](#) [Free Full Text from Publisher](#) [View Abstract](#)

-
- 3.
- Simultaneous extraction and determination of 45 veterinary antibiotics in swine manure by liquid chromatography-tandem mass spectrometry**

By: Zhi, Suli; Zhou, Jing; Liu, Haixue; et al.

JOURNAL OF CHROMATOGRAPHY B-ANALYTICAL TECHNOLOGIES IN THE BIOMEDICAL AND LIFE SCIENCES

Volume: 1154 Article Number: 122286 Published: OCT 1 2020

[Find it Oxford](#) [View Abstract](#)

-
- 4.
- Vonoprazan-containing Helicobacter pylori triple therapies contribution to global antimicrobial resistance**

[Analyze Results](#)[Create Citation Report](#)Times Cited: 0
(from Web of Science Core Collection)

Usage Count

Times Cited: 0
(from Web of Science Core Collection)

Usage Count

Times Cited: 0
(from Web of Science Core Collection)

Usage Count

Times Cited: 0
(from Web of Science Core Collection)

Αναζήτηση, άντληση και επεξεργασία επιστημονικής πληροφορίας

- Scopus

91,554 document results

TITLE-ABS-KEY (penicillin AND g)

[✎ Edit](#) [📄 Save](#) [🔔 Set alert](#) [📡 Set feed](#)

Search within results...



Refine results

Limit to

Exclude

Access type ⓘ

Open Access (15,589) >

Other (75,965) >

Year

2021 (4) >

2020 (742) >

2019 (1,141) >

Documents Secondary documents Patents

[View Mendeley Data \(8823\)](#)

Analyze search results

[Show all abstracts](#) Sort on: [Date \(newest\)](#) [v](#)

All [v](#) [Export](#) [Download](#) [View citation overview](#) [View cited by](#) [Add to List](#) [...](#) [🖨️](#) [✉️](#) [📄](#)

	Document title	Authors	Year	Source	Cited by
<input type="checkbox"/> 1	Prevalence, toxigenic profiles, multidrug resistance, and biofilm formation of <i>Bacillus cereus</i> isolated from ready-to eat cooked rice in Penang, Malaysia	Navaneethan, Y., Effarizah, M.E.	2021	Food Control 121,107553	0
	View abstract Find it @ Oxford Related documents				
<input type="checkbox"/> 2	Characterization of antimicrobial-resistant <i>Staphylococcus aureus</i> from retail foods in Beijing, China	Li, H., Tang, T., Stegger, M., (...), Liu, T., Leisner, J.J.	2021	Food Microbiology 93,103603	0

Αναζήτηση, άντληση και επεξεργασία επιστημονικής πληροφορίας

- ORCID & PUBLONS

[https://publons.com/researcher/2800454/sarantos-marinakis/
orcid.com/0000-0002-9367-4527](https://publons.com/researcher/2800454/sarantos-marinakis/orcid.com/0000-0002-9367-4527)

COVID-19: add an open review or score for a COVID-19 paper now to ensure the latest research gets the extra scrutiny it needs.



Sarantos Marinakis

Faculty - Queen Mary University of London

PUBLICATIONS

30

TOTAL TIMES CITED

634

H-INDEX

15[®]

Web of Science ResearcherID[®]

C-7216-2011

 [Summary](#)

 [Metrics](#)

 [Publications](#)

Research Fields

Sarantos Marinakis has not yet added any research fields to their profile.

[+ VIEW FULL BIO & INSTITUTIONS](#)

Most cited publications

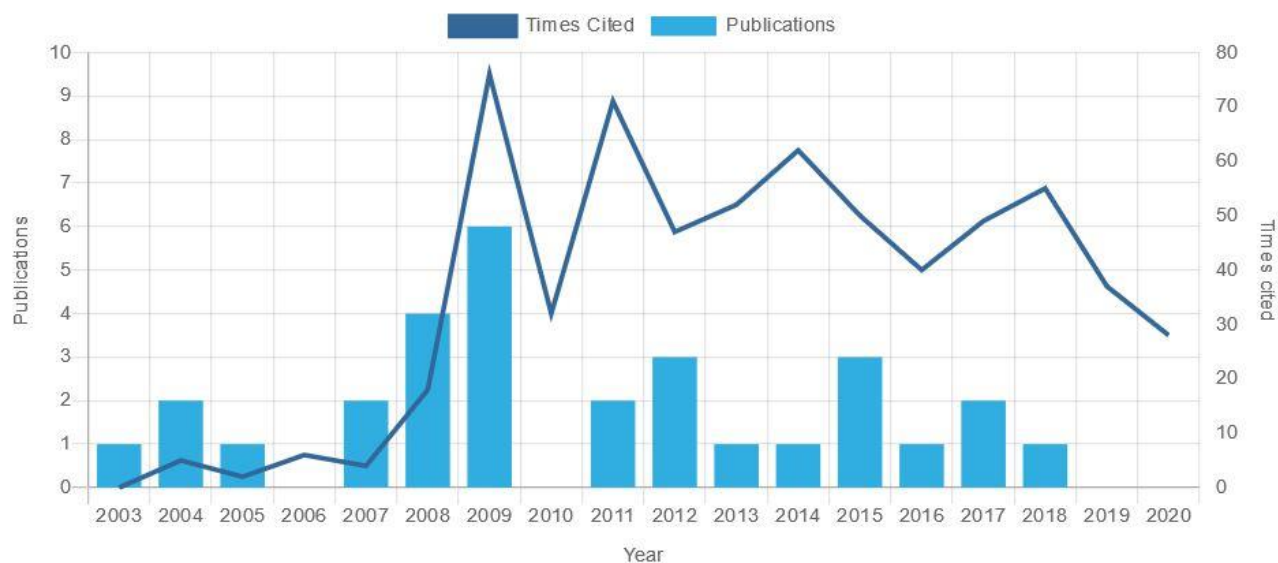
TIMES CITED

BASECOL2012: A collisional database repository and web service within the Virtual Atomic

COVID-19: add an open review or score for a COVID-19 paper now to ensure the latest research gets the extra scrutiny it needs.

-  Summary
-  Metrics
-  Publications

Sarantos Marinakis's impact over time



Statistics are calculated based only on information which has been submitted to Publons.
[Read more about them here.](#)

Αναζήτηση, άντληση και επεξεργασία επιστημονικής πληροφορίας

Statistics are calculated based only on information which has been submitted to Publons.
[Read more about them here.](#)

Publication metrics

PUBLICATIONS IN WEB OF SCIENCE	SUM OF TIMES CITED	H-INDEX	AVERAGE CITATIONS PER ITEM	AVERAGE CITATIONS PER YEAR
30	634	15 [?]	21.1	37.3

Citations are from articles indexed in the Web of Science Core Collection.
[Read more about the Web of Science Core Collection here.](#)

Βάσεις δεδομένων

<https://basecol.vamdc.eu/>

Collisions

Target Element



Collider Element



Choose a collision (Put your mouse over to expand)

Rotational Excitation of ortho-cyclopropendyle by He (Chandra & al., 2000)

Presentation

The work of Green et al, 1987 has been extended by Chandra et al, 2000 in order to give more state-to-state rate coefficients at the same temperatures. Chandra, 2000 provided excitation IOS rate coefficients among the ortho 47 lowest levels and the para 48 lowest levels of C_3H_2 with He, for $T = 30, 60, 90, 120K$. In the present database, the de-excitation rate coefficients are provided, they have been obtained by detailed balance using the energy levels from JPL database. The calculations have been redone for the present database, it is clear that Chandra, 2000 don't provide rate coefficients of C_3H_2 with H_2 , but with He. Therefore to get the rate coefficients with H_2 , the usual scaling should be used as an approximation. Avery, 1989 provided CS rates among the ortho 16 levels and the para 17 levels (those lying below 30 cm^{-1} for $T = 10, 20, 30\text{ K}$. They use same PES as Green, 1987.

Software

- Ιδέες;
- gaussian.com

Ανασκόπηση (cont'd)

- Θαυμαστός ο κόσμος της υπολογιστικής χημείας
- Hardware, software, βάσεις δεδομένων
- Ερωτήσεις;