



## ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

<b>Název:</b>	Virtuální laboratoř pro podporu výuky chemie na střední škole
<b>Student:</b>	Patrik Nikl
<b>Vedoucí:</b>	Mgr. Petr Matyáš
<b>Studijní program:</b>	Informatika
<b>Studijní obor:</b>	Softwarové inženýrství
<b>Katedra:</b>	Katedra softwarového inženýrství
<b>Platnost zadání:</b>	Do konce letního semestru 2017/18

### Pokyny pro vypracování

- Navrhněte a implementujte aplikaci simulující středněškolskou laboratoř umožňující provádět základní chemické reakce.
- Aplikace bude pracovat s předem zadanými látkami a roztoky, bude rozlišovat, zda jsou reaktanty zahrnuty či nikoliv.
- U reakcí bude aplikace brát v úvahu poměry reaktantů a produktů na základě stechiometrie.
- Bude zohledněna rozpustitelnost a mísitelnost látek.
- Aplikace umožní poskytnout zprávu o provedených úkonech.
- Data o možných reakcích budou načítána z předloženého XML souboru. Výsledné softwarové výstupy budou kladně otestovány.

### Seznam odborné literatury

Dodá vedoucí práce.

Ing. Michal Valenta, Ph.D.  
vedoucí katedry

prof. Ing. Pavel Tvrdík, CSc.  
děkan

V Praze dne 20. prosince 2016



ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE  
FAKULTA INFORMAČNÍCH TECHNOLOGIÍ  
KATEDRA SOFTWAROVÉHO INŽENÝRSTVÍ



Bakalářská práce

## **Virtuální laboratoř pro podporu výuky chemie na střední škole**

***Patrik Nikl***

Vedoucí práce: Mgr. Petr Matyáš

16. května 2017



---

## Poděkování

Tímto bych chtěl poděkovat svému vedoucímu práce Mgr. Petru Matyášovi za konzultace, cenné rady a připomínky. Dále Ing. Jiřímu Mikešovi za téma této práce, rady k teoretické části této práce a připomínky ke vzhledu a funkčnosti vytvořené aplikace.



---

# Prohlášení

Prohlašuji, že jsem předloženou práci vypracoval(a) samostatně a že jsem uvedl(a) veškeré použité informační zdroje v souladu s Metodickým pokynem o etické přípravě vysokoškolských závěrečných prací.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona, ve znění pozdějších předpisů. V souladu s ust. § 46 odst. 6 tohoto zákona tímto uděluji nevýhradní oprávnění (licenci) k užití této mé práce, a to včetně všech počítačových programů, jež jsou její součástí či přílohou a veškeré jejich dokumentace (dále souhrnně jen „Dílo“), a to všem osobám, které si přejí Dílo užít. Tyto osoby jsou oprávněny Dílo užít jakýmkoli způsobem, který nesnižuje hodnotu Díla, avšak pouze k nevýdělečným účelům. Toto oprávnění je časově, teritoriálně i množstevně neomezené.

V Praze dne 16. května 2017

.....

České vysoké učení technické v Praze  
Fakulta informačních technologií

© 2017 Patrik Nikl. Všechna práva vyhrazena.

*Tato práce vznikla jako školní dílo na Českém vysokém učení technickém v Praze, Fakultě informačních technologií. Práce je chráněna právními předpisy a mezinárodními úmluvami o právu autorském a právech souvisejících s právem autorským. K jejímu užití, s výjimkou bezúplatných zákonných licencí, je nezbytný souhlas autora.*

### **Odkaz na tuto práci**

Nikl, Patrik. *Virtuální laboratoř pro podporu výuky chemie na střední škole*. Bakalářská práce. Praha: České vysoké učení technické v Praze, Fakulta informačních technologií, 2017.



---

## Abstrakt

Práce se zabývá usnadněním výuky středoškolské chemie. Jejím cílem je navrhnout a implementovat mobilní aplikaci pro Android v jazyce Java simulující laboratoř, která umožňuje provádět základní chemické reakce, bude brát v potaz poměry látek, jejich rozpustitelnost ve vodě a zda jsou zahřívány, za pomoci dat načtených z příloženého xml souboru. Práce obsahuje srovnání s jinými chemickými aplikacemi. Aplikace dále umožňuje vyčíslit zadané chemické rovnice a případně je uložit pro použití v simulované laboratoři. Z ní lze také pořídit záznam o provedených úkonech. Práce obsahuje popis chemické teorie nutné pro tuto aplikaci, srovnání s jinými mobilními aplikacemi s tematikou chemie a popis aplikace samotné.

**Klíčová slova** Chemické reakce, mobilní aplikace, Android, podpora výuky, středoškoláci, laboratoř, vyčíslení reakcí.

---

## Abstract

This work deals with simplification of teaching high school level chemistry. Its goal is to design and implement an Android application in the Java language simulating a laboratory, which enables to carry out basic chemical reactions, takes into account ratios of substances, their solubility in water and whether

they are being heated, using data read from an enclosed XML file. The work contains a comparison with other chemical applications. Furthermore the application enables balancing of entered chemical reactions and eventually saving them for use in the simulated Laboratory, which can be used to acquire a log of performed operations. The work contains a description of chemical theory required for the application, comparison with other chemistry themed phone applications and a description of the application itself.

**Keywords** Chemical reactions, phone application, Android, supporting teaching, high school students, laboratory, balancing reactions.

---

# Obsah

Úvod	1
<b>1 Základy chemické teorie</b>	<b>3</b>
1.1 Stechiometrie . . . . .	3
1.2 Vyčíslení reakcí . . . . .	6
1.3 Vyčíslení oxidačních čísel . . . . .	10
<b>2 Analýza a návrh</b>	<b>11</b>
2.1 Současný stav řešení problematiky . . . . .	11
2.2 Požadavky . . . . .	17
2.3 Uživatelsky přívětivé rozhraní . . . . .	18
2.4 Případy užití . . . . .	18
2.5 Úvod k aplikacím pro Android . . . . .	19
<b>3 Realizace</b>	<b>21</b>
3.1 Načítání dat . . . . .	21
3.2 Vyčíslení reakcí a jejich přidání v aplikaci . . . . .	23
3.3 Virtuální laboratoř . . . . .	23
<b>4 Testování</b>	<b>29</b>
4.1 Testování vyčíslení rovnic . . . . .	29
4.2 Testování počtů s poměry reaktantů a produktů . . . . .	29
4.3 Testování uživatelského rozhraní s uživatelem . . . . .	29
<b>Závěr</b>	<b>31</b>
<b>Literatura</b>	<b>33</b>
<b>A Seznam použitých zkratk</b>	<b>35</b>
<b>B Instalační příručka</b>	<b>37</b>



---

## Seznam obrázků

1.1	Zobrazení výsledků rovnice 1.2 v aplikaci. K výpočtům jsou užity přesnější $A_r$ , následně je ale výsledek zaokrouhlen. . . . .	5
2.1	Ukázka jednoduché reakce v aplikaci Chemist. Obrázek převzat z [1]. . . . .	12
2.2	Ukázka nápovědy v aplikaci goReact. Obrázek převzat z [2]. . . . .	13
2.3	Aplikace Chemical Balance, která je hlavní inspirací pro přidávání reakcí ve vytvořené aplikaci. Obrázek převzat z [3]. . . . .	14
2.4	Aplikace Chemical Equation Balancer. Obrázek převzat z [4]. . . . .	15
2.5	Diagram případů užití . . . . .	19
3.1	Ukázka obsahu přiloženého XML souboru. . . . .	22
3.2	Diagram tříd vytvářených z načtených informací. . . . .	22
3.3	Obrazovka pro zadání reakce chemické rovnice. . . . .	24
3.4	Diagram tříd vytvářených z načtených informací. . . . .	25
3.5	Třída kontrolující reakce a starající se o vizuální podobu. . . . .	26
3.6	Záznam o provedených úkonech vytvořené aplikací. . . . .	28



---

# Úvod

Určitě nebudu jediný, kdo z vlastní zkušenosti ví, že se najdou tací, pro které je středoškolská chemie nepřekonatelným problémem. Vyčíslení chemických rovnic a počty s látkovým množstvím mnohým nic neříkají, je tím pádem dobré mít po ruce aplikaci, na které si lze výsledek „pouze“ zkontrolovat. Mnoho lidí také určitě docení možnost provádět laboratorní experimenty v bezpečí a pouhým pohybem palce.

Práce je určena hlavně pro středoškolské studenty, kteří se ve škole právě tímto tématem zabývají a chtějí si ověřit, že tématice dobře rozumí, nebo kohokoliv jiného se zájmem o chemii a zařízením s operačním systémem Android.

Androidových aplikací, které se zabývají chemií, se jistě množství najde, ale žádná není ideální nebo plně zdarma. Případně je na různé funkcionality potřeba několik různých aplikací. Z těchto důvodů jsem se rozhodl pro volbu tématu.

Cílem práce je navrhnout a implementovat mobilní aplikaci pro operační systém Android simulující chemickou laboratoř. Ta by měla umožňovat provádět základní chemické reakce podle přiloženého konfiguračního souboru ve formátu XML, který s pomocí aplikace zvládne editovat každý středoškolský učitel. Bude brát v potaz poměry látek zadané uživatelem jako váha, jejich mísitelnost, dále zda jsou zahřívány v závislosti na tom, jestli je reakce exotermní nebo endotermní, tedy pokud uvolňuje nebo přijímá teplo.

V případě, že reakce proběhne, je třeba zjistit, kolik reaktantů vstupujících do reakce se spotřebovalo, jaké množství produktů vzniklo a současný stav názorně vizualizovat. Aplikace půjde ovládat jednoduchým uživatelským rozhraním. Provedené reakce a jejich výsledky lze vytisknout do souboru v externí paměti daného zařízení. Aplikace také vyčísluje chemické rovnice a užívá k tomu Gaussovu eliminační metodu řešící soustavu rovnic vzniklou z této reakce nebo algoritimizovaný klasický postup užívající změny oxidačních čísel.

Následující kapitoly se věnují srovnání vytvořené aplikace s jinými aplikacemi s tematikou chemie. Přibližují téma chemie s důrazem na počítání kvantit

## ÚVOD

---

látek v chemických reakcích a poté vyčíslování chemických rovnic s tím, jak moje aplikace toto téma řeší jinak než srovnávané. Dále se věnuji návrhu a implementaci mé aplikace. Tomu, jaká data potřebuje, jak vypadá, ovládá se a co se děje na pozadí.



---

# Základy chemické teorie

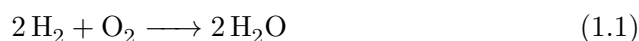
Následující části se věnují chemické teorii nutné pro realizaci aplikace.

## 1.1 Stechiometrie

Stechiometrie<sup>1</sup> definována jako část chemie studující kvantitativní zákonitosti při chemických reakcích pomocí výpočtů založených na chemických vzorcích a rovnicích.

Při řešení příkladů z chemických rovnic vycházíme z poměru stechiometrických koeficientů látek zapsaných v chemické rovnici. Stechiometrické koeficienty v chemické rovnici vyjadřují poměr látkových množství reagujících látek [5].

Například v rovnici



jsou stechiometrické koeficienty čísla 2, 1 a 2. A vzhledem k tomu, že jde o poměr, ve kterém látky reagují, nezáleží na tom, zda si za nimi představíme jednotlivé molekuly nebo rovnou moly.

1 mol je množina, která má stejný počet prvků, jako je ve 12 g nuklidu uhlíku <sup>12</sup>C. Velikost tohoto čísla je určena Avogadrovou konstantou -  $N_A$ .

$$N_A = 6.022 * 10^{23} \text{mol}^{-1}$$

Praktický význam jednotky látkového množství spočívá v tom, že dává do přímé souvislosti važitelné množství látky s počtem částic, které jsou v tomto množství obsaženy. 12 g uhlíku, zvolených

---

<sup>1</sup><http://slovník-cizích-slov.abz.cz/web.php/slovo/stechiometrie>

pro definování látkového množství, je totiž číselně rovno relativní atomové hmotnosti uhlíku. Pokud tedy navážíme takové množství libovolného prvku, že hmotnost navážky vyjádřená v gramech bude číselně rovna jeho relativní atomové hmotnosti, bude v tomto množství právě 1 mol atomů [6].

Z poměru látkových množství získáme snadno poměr hmotností reagujících látek dosazením  $\frac{m}{M_r}$  za látkové množství  $n$ .  $m$  je hmotnost a  $M_r$  relativní molekulová hmotnost [7].

Relativní atomová hmotnost je definována takto:  $A_r = \frac{m_a}{m_u}$ , kde  $m_a$  je klidová hmotnost atomu a  $m_u$  atomová hmotnostní konstanta.

Atomová hmotnostní konstanta je hmotnost  $\frac{1}{12}$  atomu uhlíku  $^{12}_6\text{C}$ :  $m_u = 1.66 * 10^{-27} \text{kg}$ .

V tabulkách jsou uváděny střední hodnoty  $A_r$ , neboť prvky se v přírodě vyskytují ve formě směsi izotopů.

Relativní molekulová hmotnost  $M_r$  se zavádí analogicky:  $M_r = \frac{m_m}{m_u}$ , kde  $m_m$  je klidová hmotnost molekuly. Z definice relativní molekulové hmotnosti vyplývá, že je rovna součtu relativních atomových hmotností atomů, která danou molekulu tvoří [8].

Důležité tedy je, že pro jednotlivé prvky lze relativní atomové hmotnosti nalézt v periodické soustavě prvků a pro získání relativní molekulové hmotnosti molekuly složené z těchto atomů je sečteme. Uchování relativní atomové hmotnosti v aplikaci je popsáno dále.

Víme, v jakém poměru látky musí v reakci zreagovat a vzniknout, víme jejich  $M_r$  a v aplikaci uživatel zadá váhu jednotlivých reaktantů rovnice, kterou chce uskutečnit. Ze vzorce

$$n = \frac{m}{M_r}$$

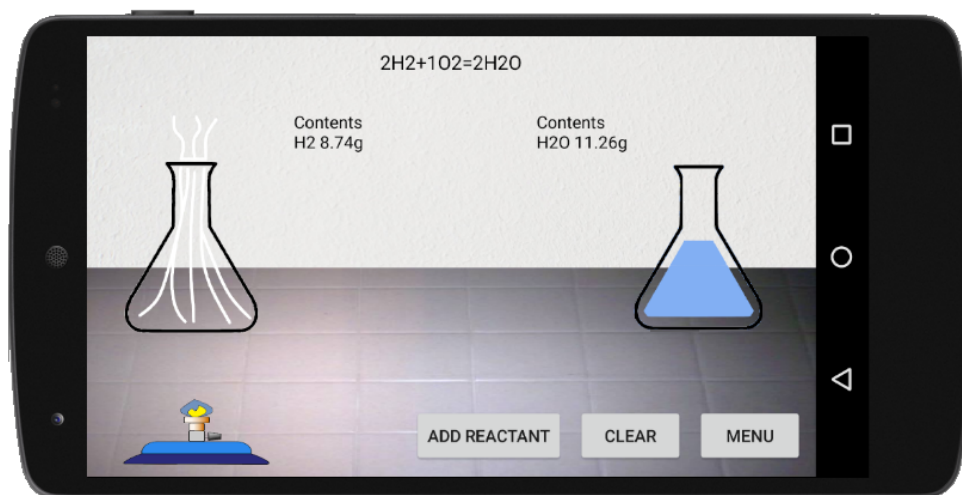
můžeme tedy spočítat látkové množství reaktantů na vstupu. Toto  $n$  poté podělíme stechiometrickým koeficientem daného reaktantu v dané reakci. Nejmenší z těchto poměrů patří reaktantu, který v této reakci zreaguje všechen. Tímto poměrem vynásobíme ostatní stechiometrické koeficienty a dostaneme pro jednotlivé reaktanty a produkty látkové množství, které se spotřebuje nebo vznikne touto reakcí. Přenásobením  $M_r$  dostaneme jednotlivé váhy a odečtením příslušných vah od zadaných vah reaktantů vyjde váha vstupních látek, která po reakci zbyla.

Například v reakci:



bylo zadáno, že vodíku i kyslíku je 10 gramů.

$$M_r(\text{H}_2) = 2 * A_r(\text{H}) = 2 * 1 = 2$$



Obrázek 1.1: Zobrazení výsledků rovnice 1.2 v aplikaci. K výpočtům jsou užity přesnější  $A_r$ , následně je ale výsledek zaokrouhlen.

$$M_r(O_2) = 2 * A_r(O) = 2 * 16 = 32$$

$$M_r(H_2O) = 2 * A_r(H) + A_r(O) = 2 * 1 + 16 = 18$$

$$n(H_2) = \frac{m(H_2)}{M_r(H_2)} = \frac{10}{2} = 5$$

$$n(O_2) = \frac{m(O_2)}{M_r(O_2)} = \frac{10}{32} = \frac{5}{16}$$

Vodíku je tedy 2,5-krát více, než v je stechiometrický koeficient v rovnici reakce 1.2 a kyslíku je  $\frac{5}{16}$ . Zreaguje tedy všechen kyslík. Vodíku zreaguje  $\frac{5}{16} * 2 = \frac{10}{16}$  molu a zbude  $5 - \frac{10}{16} = \frac{70}{16}$  molů, což je  $\frac{70}{16} * 2 = 8,75$  gramů vodíku.

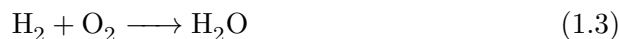
Vody vznikne  $\frac{5}{16} * 2$  molů, tedy  $\frac{10}{16} * 18 = 11,25$  gramů.

$8,75 + 11,25$  dá zpět zase 20 gramů stejně jako součet zadaných vah reaktantů. Je tedy dodržen zákon zachování hmotnosti.

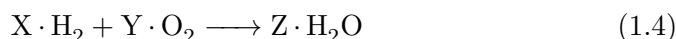
Chemické rovnice vycházejí ze zákona zachování hmotnosti - to znamená, že součet hmotností reaktantů se rovná součtu hmotností produktů. Pro chemické rovnice zároveň platí, že počty atomů určitého druhu musí být na obou stranách stejné [6].

## 1.2 Vyčíslení reakcí

Nejjednodušší metodou, jak chemické reakce vyčíslit, je sestavit z nich soustavu rovnic a tu vyřešit Gaussovou eliminací. Například pro již zmíněnou reakci



si jako proměnné označíme počty jednotlivých sloučenin.



Následně sestavíme matici, kde jednotlivé řádky odpovídají jednotlivým prvkům a sloupce proměnným.

$$\left( \begin{array}{ccc|c} 2 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \end{array} \right)$$

Tato matice má nekonečně mnoho řešení, my ale hledáme nejmenší násobek celých kladných čísel. Vyrovnáme hodnoty posledního řádku s dvěma nenulovými čísly tak, aby vyšla nula, poté postupně dopočítáme hodnoty ostatních pivotů, v případě potřeby dosavadní řešení vynásobíme, aby vyšla celá čísla. Matici tedy upravíme na

$$\left( \begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \end{array} \right)$$

Za  $Z$  dosadíme 2, za  $Y$  1 a  $X$  poté vyjde bez úpravy celočíselně 2. Výsledkem je tedy rovnice



Takto vyčísľují rovnice i další aplikace. Zdrojový kód jedné z aplikací zmíněných dále je totiž dostupný z githubu<sup>2</sup>. Žádná z aplikací zmíněných v literární rešerši ale nezvládla vyčísľit rovnici



Vzniklá matice

$$\left( \begin{array}{cccccc|c} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 4 & 0 & -4 & -4 & -1 & 0 \\ 0 & 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 \end{array} \right)$$

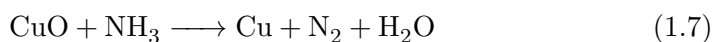
---

<sup>2</sup><https://github.com/1461748123/Chemical-Equation-Balancer>

je již moc široká, aby z ní vyšlo jedno jednoznačně správné řešení, jelikož by bylo nutné jednu proměnnou parametrizovat. Jako důvod lze v tomto případě uvést, že síra z  $\text{H}_2\text{S}$  skončí jako čistá síra a síra obsažená v  $\text{SO}_4$  skupině v ní beze změny zůstane. Vznikne z ní  $\text{MnSO}_4$  a  $\text{K}_2\text{SO}_4$ . Kdyby se síra rozdělila na dvě různé proměnné, jedna, která by udávala, že počet  $\text{H}_2\text{S}$  se rovná počtu S a druhá vyjadřující, že množství  $\text{H}_2\text{SO}_4$  se rovná součtu množství  $\text{MnSO}_4$  a  $\text{K}_2\text{SO}_4$ , vznikla by rovnice navíc a soustava by šla vyřešit. Proto je potřeba tuto rovnici vyčíslit stejně jako se to vyučuje na středních školách – pomocí změny oxidačních čísel, které si aplikace u jednotlivých sloučenin eviduje.

Pokud například chceme zjistit, kolik produktu vzniklo reakcí sto gramů látky X se sto gramy látky Y, potřebujeme nejdříve zjistit, u kterých prvků se změnilo oxidační číslo a jak. V [9] je oxidační číslo definované jako elektrický náboj, který by se nacházel na atomu prvku, kdybychom elektrony v každé vazbě, které vycházejí z daného atomu, přidělili elektronegativnějšímu atomu. A dále že ho lze nalézt v periodické soustavě prvků. Ze změn oxidačních čísel se určí kolik elektronů muselo být prvkem přijato nebo uvolněno. Podle [7] se musí počet přijatých a uvolněných elektronů rovnat, tím pádem se počty molekul obsahujících prvek mění své oxidační číslo upraví, aby se rovnaly počty elektronů a poté se určí počty všeho ostatního tak, aby se nic neztratilo ani nepřibýlo.

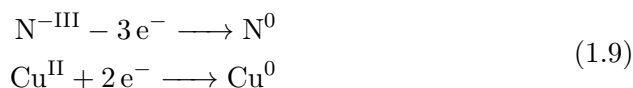
Nejprve zjistíme, které prvky mění své oxidační číslo a určíme kolik elektronů muselo přibýt nebo ubýt, aby se dosáhlo této změny. Počty prvků, které mění oxidační číslo, určíme jako nejmenší společný násobek úbytku a příbytku elektronů, dosadíme do reakce a zbytek opět dopočítáme rovnicemi. Například pro rovnici



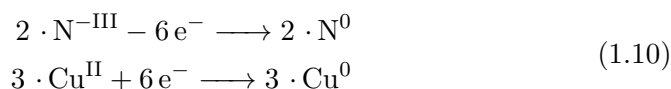
je postup následovný. Nalezneme prvky, které mění své oxidační číslo.



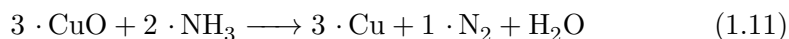
Zjistíme, kolik elektronů musí přibýt nebo ubýt, aby se oxidační číslo takto změnilo.



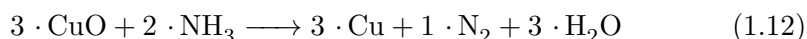
Počty elektronů upravíme na nejmenší společný násobek.



Dosadíme koeficienty prvků do rovnic s ohledem na to, že prvek může být v molekule obsažen vícekrát. V případě, že vyšlý koeficient je nesoudělný s počtem atomů daného prvku v molekule, koeficienty je nutné vynásobit.



Nyní se vypočítá koeficient u zbylých molekul - v tomto případě u vody. K tomuto je opět nutná Gaussova eliminace. Může být nutné koeficienty opět vynásobit, aby vše vyšlo celočíselně.

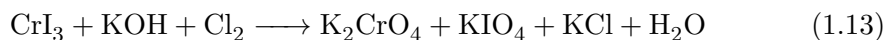


### 1.2.1 Speciální případy

Zde jsou uvedené dva příklady, u kterých je třeba postup upravit.

#### 1.2.1.1 Více prvků obsažených v jedné molekule

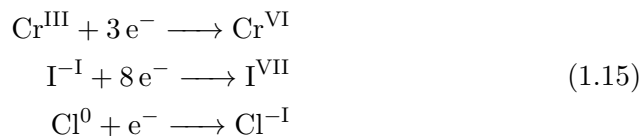
Prvků, které mění své oxidační, může být více. Pokud ale jsou na jedné straně obsaženy ve stejné sloučenině, tak je dán jejich poměr.



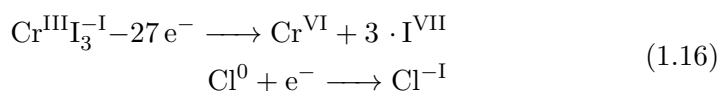
Nalezneme prvky měnící své oxidační číslo.



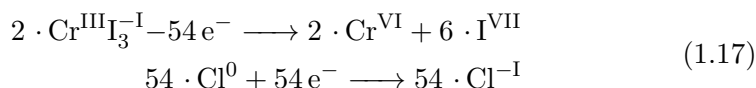
Zjistíme počty elektronů vzhledem k těmto změnám.



Zde si všimneme, že těchto prvků je více než dva. Víme ale, že v rovnici musí být vždy 3 I na jeden Cr.



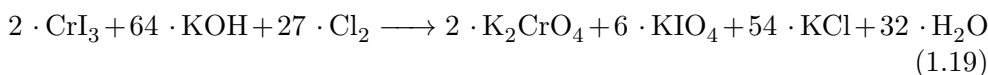
Upravíme počty elektronů. Také si ušetříme práci vynásobením počtu chlorů dvěma, jelikož rovnice obsahuje  $\text{Cl}_2$ . Číslo 27 totiž není dělitelné dvěma.



Doplníme do rovnice.



Vyčíslíme zbylé<sup>3</sup>.



### 1.2.1.2 Více výskytů jednoho prvku

U již zmíněné rovnice



je potřeba rozeznat, že se oxidační číslo síry mění pouze následovně



a ne zároveň



Také může nastat, že se na jedné straně vyskytuje jeden prvek s různými oxidačními čísly a na druhé je zastoupen pouze jednou, buď jedním z oxidačních čísel na levé straně nebo s jiným.



nebo



I tyto případy je třeba ošetřit.

<sup>3</sup>Postup vyčíslení těchto rovnic je dostupný i z [7].

### 1.3 Vyčíslení oxidačních čísel

Jak bylo uvedeno, k vyčíslení některých rovnic jsou potřeba oxidační čísla jednotlivých prvků, aby aplikace mohla zjistit, které prvky své číslo mění. Ta jsou uložena ve vstupním XML souboru zmíněném dále. Nicméně do aplikace lze zadat i nové molekuly v rámci nové reakce. K tomu je potřeba oxidační čísla zjistit.

Některé prvky mají oxidační čísla daná. Pokud jsou samotné nebo navázané samy na sebe a nemají iontový náboj, tedy jim nepřebývá ani nechybí elektron, jejich oxidační číslo je vždy nula. Stejně tak vodík a alkalické kovy mají v molekule vždy oxidační číslo jedna a kyslík, až na některé případy, číslo mínus dvě. Z těchto jasných čísel a znalosti hodnoty celkového součtu jdou často spočítat oxidační čísla i u jiných prvků. Zda by mělo být číslo kladné nebo záporné jde také zjistit podle elektronegativity příslušného prvku a prvků se kterými je vázaný. V poslední řadě se oxidační čísla určují podle slovního názvu molekuly – v češtině například koncovek *-ný*, *-natý*, případně *-nan*, *-natan* atd. Postup určení oxidačních čísel lze také nalézt na [7].

Problémem je, že nutit uživatele správně zadat název molekuly není požadované. Vytvoření algoritmu, který zvládne tyto koncovky a předpony určit včetně prvků, kterých se týkají, je rozsáhlý problém sám o sobě. Elektronegativita také není užitečná aniž by byla zřejmá struktura molekuly, jejíž zadání do aplikace by bylo pro uživatele mnohem komplikovanější než vyplnit oxidační čísla. A i u na první pohled zřejmých prvků, jako je kyslík, existují výjimky. Příkladem je peroxid vodíku  $\text{H}_2\text{O}_2$ , kde má kyslík oxidační číslo  $-I$ .

Aplikace u neznámých molekul sama vyčíslí jednoprvkové s nábojem i bez něj a na zbytek se doptá uživatele.



---

# Analýza a návrh

Tato kapitola se věnuje přiblížení jiných aplikací s tematikou chemie a jejich srovnáním s vypracovanou aplikací.

## 2.1 Současný stav řešení problematiky

V této sekci jsou představeny aplikace dostupné na Google Play<sup>4</sup>, které se také věnují chemii.

### 2.1.1 Chemist

Velice blízko je aplikace jménem Chemist [1], která je původní inspirací pro toto zadání. Je provedená po vizuální stránce, obsahuje velké množství nastavení, v plné verzi má mnoho možností reaktantů, ale ve verzi zdarma je poměrně omezená a v rohu má nevhodně malá, těžko viditelná tlačítka. Ovládá se výběrem nádoby, kahanu, stojanů reprezentovaných obrázkem z panelu skrytého za tlačítkem v horní části obrazovky a jejich následným přetažením takzvaným „drag and drop“ na pracovní plochu. Do nich poté identickým postupem lze umístit reaktanty, v panelu rozříděné podle skupenství.

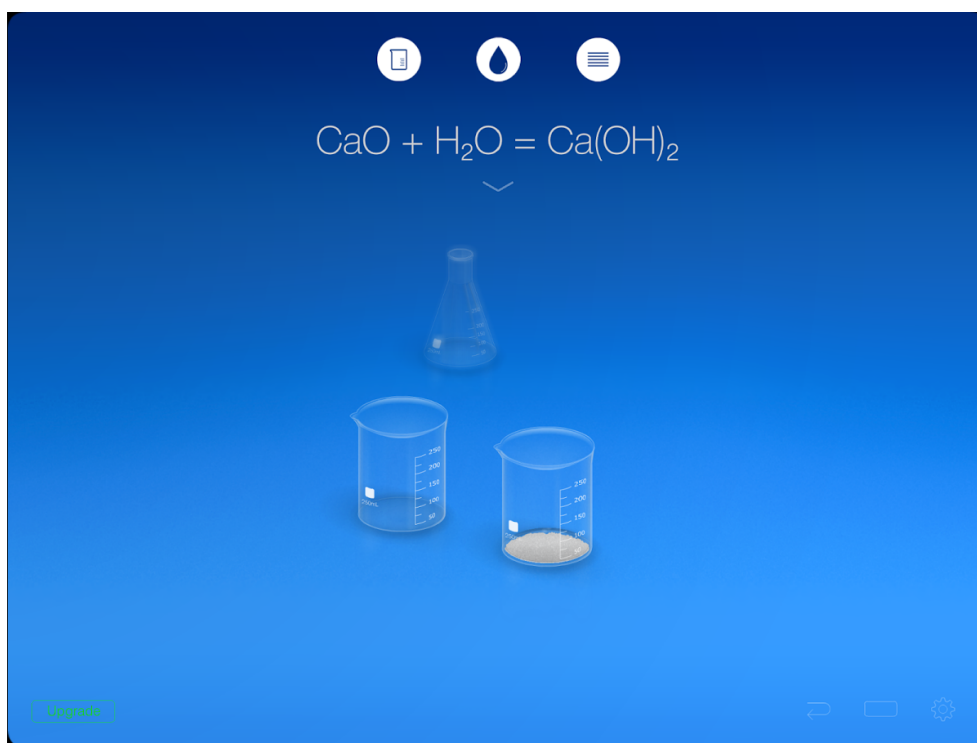
Průběh lze sledovat i ovlivňovat pomocí dostupných nástrojů jako teploměr, indikátor pH, zápalka nebo byreta. Je možné nastavit různé parametry, jako je složení atmosféry, teplota, rychlost průběhu reakce a další. Aplikace posoudí, zda by reaktanty již měly zreagovat a případně reakci uskutečnit.

Výsledky lze následně exportovat do textového souboru nebo sdílet na sociálních médiích. Nicméně tlačítka této funkcionality umístěná v pravém dolním rohu jsou velice těžko viditelná.

Aplikace je vidět na obrázku 2.1.

---

<sup>4</sup><https://play.google.com/store?hl=cs>



Obrázek 2.1: Ukázka jednoduché reakce v aplikaci Chemist. Obrázek převzat z [1].

### 2.1.2 goReact

Druhou aplikací je goReact [2], která nabízí alternativu k výběru reaktantů z menu. Tou je zadání jednotlivých prvků pomocí periodické soustavy přizpůsobené jako klávesnice. Existuje několik různých možností, co by soustava měla obsahovat, mezi kterými lze přepínat.

Prvky se po stisknutí objevují ve spodní části obrazovky a pokud existuje molekula, která je všechny obsahuje, prvky se do ní zkombinují. Přesný počet prvků v molekule není po uživateli vyžadován. Molekuly lze dále kombinovat chemickými reakcemi, kde opět poměry molekul potřebných k reakci ani vzniklých molekul není řešen.

Aplikace obsahuje nápovědu o tom, který prvek by se mohl s již vybranými zkombinovat, což lze vidět na obrázku 2.2.

### 2.1.3 Chemical Balance

Ve svém hlavním rozšíření oproti zadání, vyčíslování reaktantů a produktů zadaných rovnic, se práce inspirovala hlavně z aplikace Chemical Balance [3].

Uživatelské rozhraní připomínající kalkulačku obsahuje tlačítka s jednot-



Obrázek 2.2: Ukázka nápovědy v aplikaci goReact. Obrázek převzat z [2].

livými prvky z tabulky, které jsou nadvakrát přes sebe překryté a lze mezi nimi přepínat tlačítkem označeným „#1“ nebo „#2“. Poté obsahuje jednotlivé číslice, závorky, tlačítka „DEL“ a „AC“ známé z klasické kalkulačky. Po zmáčknutí tlačítka „Balance“ na displeji přibudou stechiometrické koeficienty k jednotlivým molekulám. Aplikace lze vidět na obrázku 2.3.

#### 2.1.4 Chemical Equation Balancer

Další aplikací, která vyčísluje chemické reakce, je Chemical Equation Balancer [4]. Oproti Chemical Balance se rovnice zadávají na klasické klávesnici se všemi znaky a periodická tabulka prvků obsažená ve spodní části obrazovky je pouze vizuálním prvkem. Vzhledem k tomu je potřeba více kontrolovat uživatelem zadaný vstup. Samotná zpráva o tom, že vstup není validní, je strohá a pouze jedna pro jakoukoliv chybu.

#### 2.1.5 Další aplikace

Chemik.io [10] umí také vyčíslit zadané reakce, ale jinak se svou hlavní náplní, hledáním prvků v tabulce na čas, podstatně liší od požadavků. Samotné vyčís-



Obrázek 2.3: Aplikace Chemical Balance, která je hlavní inspirací pro přidávání reakcí ve vytvořené aplikaci. Obrázek převzat z [3].

1 8:34

**Chemical Equation Balancer**

Enter an equation below. Make sure elements are capitalized and type = to show the other side. For additional instructions, go to "Help" in Menu.

Sample Equation: C6H12O6+O2=CO2+H2O

C6H12O6 + O2 = CO2 + H2O

Balance Clear

C6H12O6 + 6O2 → 6CO2 + 6H2O

1																	
H																	
1.0079																	
3	4																
Li	Be																
6.941	9.0122																
11	12																
Na	Mg																
22.990	24.305																
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30						
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn						
39.098	40.078	44.956	47.867	50.942	51.996	54.938	55.845	58.933	58.693	63.546	65.38						
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48						
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd						
85.468	87.62	88.906	91.224	92.906	95.96	-	101.07	102.91	106.42	107.87	112.41						
55	56		72	73	74	75	76	77	78	79	80						
Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg						

Obrázek 2.4: Aplikace Chemical Equation Balancer. Obrázek převzat z [4].

lení reakcí není mezi aplikacemi zvláště ojedinělé, také ho zvládnou například Balance Chemical Equation Pro [11] nebo Chemistry Helper [12].

Další zkoumaná aplikace se jmenuje LabTools [13]. Ta může být velice užitečná chemikům i studentům zabírajícími se různými příklady. Kromě zobrazení velkého množství konstant a informací umožňuje snadný výpočet mnohých rovnic souvisejících s chemií zadáním několika hodnot.

Existuje celá řada aplikací, které umí počítat molární hmotnost, koncentraci a tak dále, ale nelze v nich provádět jakékoliv reakce. Příkladem je Chemistry Calculator [14] nebo CMM | Molar Mass Calculator [15].

### 2.1.6 Shrnutí

Navržená a implementovaná aplikace se aplikaci Chemist snaží, místy zjednodušeně, přiblížit, ale nabídne uživatelům mnohem více možností v základní a jediné verzi. Přidání předmětů a sloučenin na pracovní plochu přetažením je dobré řešení. Není ale nutné pro aplikaci, u které byl rozhodnuto, že bude obsahovat jedinou reakční nádobu, do které lze přidávat reaktanty. Různé objemy nádob by mohly donutit uživatele přemýšlet nad zvoleným objemem vzhledem k tomu, že se objem produktů nemusí rovnat objemu reaktantů. Aplikace už nyní eviduje hustotu, takže výpočet objemu by nebyl problém. Není nicméně jasné, co by uživateli bránilo zvolit vždy největší nádobu. Oproti Chemist bude uživatel moci reaktanty a rovnice sám přidat i do příštích běhů aplikace a nebo se bude moci vrátit k základnímu nastavení. Aplikace také má lépe vyřešený kontrast GUI.

goReact je vizuálně velice příjemná, ale periodická soustava prvků je svým rozložením poměrně náročná na místo. Z přiloženého obrázku nemusí být na první pohled zřejmé, že tabulka je na mobilním zařízení velice přiblížená. Je tím pádem nutné se po ní neustále pohybovat a hledat prvky, u kterých uživatel nezná přesnou polohu v soustavě, nemusí být snadné. Místo by bylo nutné dále zabrat tlačítka pro číslice a speciální znaky, jelikož ve vypracované aplikaci jsou brány v potaz poměry látek a molekuly jsou zadávány přesně svým stechiometrickým vzorcem. Je tedy nutné pro tento účel uzpůsobit i ovládání.

Práce zároveň bude plnit funkcionalitu jiných aplikací - vyčíslování chemických rovnic / a to lépe než aplikace dostupné na Google Play. Uživatelské rozhraní aplikace Chemical Balance je pro tento záměr velice povedené a pro zadávání rovnic aplikaci k vyčíslení je využito. Uspořádání prvků po velké části obrazovky a přepínání mezi dvěma sadami je povedené řešení vzhledem k prostoru.

Oproti tomu v aplikaci Chemical Equation Balacer je nutné rovnice reakce zadávat s pomocí vestavěné klávesnice, u které je nutné neustále přepínat mezi velkými, malými a speciálními znaky. Je tím pádem nutné se ujistit, že nebyly zadány žádné nevalidní a také nastává problém s velkými a malými písmeny. Uživatel si musí ověřit, že zadal písmena správně, například uhlík s kyslíkem,

psané jako CO, by si mohlo jít vyložit jako kobalt - Co. Obrázek soustavy prvků ve spodní části slouží pravděpodobně jen pro inspiraci při zadávání molekul.

LabTools nejsou blízké požadavkům zadání, ale o některé výpočty by práce šla v budoucnu také rozšířit. Pro chemiky mohou totiž být velice praktické.

## 2.2 Požadavky

Aplikace by měla splňovat předepsané funkční a nefunkční požadavky.

Mezi funkční požadavky jsou zařazeny:

- Možnost provést chemické reakce se zadanými látkami.
- Rozeznat, zda jsou reaktanty zahřívány.
- Rozeznat, zda jsou látky mísitelné s vodou.
- Možnost pořídit zprávu o provedených úkonech.
- Brát ohled na poměr reaktantů a produktů.
- Názorně zobrazit reakce uživateli.

Mezi nefunkční jsou zařazeny:

- Uživatelsky přívětivé rozhraní.
- Data načítána z XML souboru, který je součástí aplikace.
- Důkladně otestované softwarové výstupy.

### 2.2.1 V aplikaci lze provádět chemické reakce.

Aplikace bude umožňovat provádět základní chemické reakce výběrem reaktantů a jejich množství. Uživatel si může sám zadat, které látky by mohou být užity.

### 2.2.2 Rozeznat zda jsou reaktanty zahřívány

Aplikace musí jednoduše rozlišovat endotermní a exotermní reakce. Endotermní reakce je nutné zahřívát, aby proběhly.

### 2.2.3 Rozeznat zda jsou látky mísitelné s vodou

Aplikace musí jednoduše rozeznat, zda se jiné kapaliny mohou smíchat s vodou. Příkladem opačného případu je například olej a voda.

### 2.2.4 Možnost pořídit zprávu o provedených úkonech

Aplikace musí umožnit si provedené úkony uložit do souboru, který bude uživateli přístupný.

### 2.2.5 Ohled na poměr reaktantů a produktů

Při reakcích budou zohledněny poměry zadaných reaktantů a vzniklých produktů na základě stechiometrie.

### 2.2.6 Názorné zobrazení reakce uživateli

Uživatel uvidí jaké produkty reakcí vznikly. Ty budou vizuálně rozlišené a bude zobrazena informace o jejich množstvích.

## 2.3 Uživatelsky přívětivé rozhraní

Aplikace by měla být přehledná a uživatel by se v ní neměl snadno ztratit.

### 2.3.1 Data načítány ze XML souboru, který je součástí aplikace

Data by aplikace měla načíst z příloženého XML souboru. Původně se předpokládalo, že formát XML bude snadno srozumitelný a upravitelný pro jakékoli uživatele. Možnost tyto data upravit byla ale přidána do aplikace a data již nejsou uživateli jakkoliv přístupná.

### 2.3.2 Důkladně otestované softwarové výstupy

U výstupů aplikace by měla být zaručena jejich korektnost.

## 2.4 Případy užití

Případy užití jsou ukázány na obrázku 2.5.

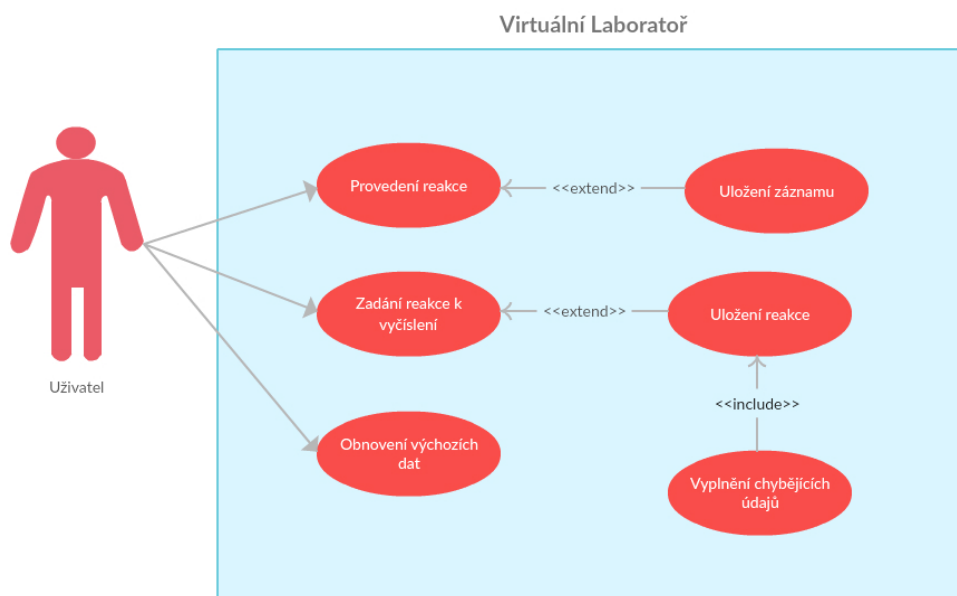
Z hlavního menu se uživatel může dostat k laboratoři, kde lze provádět chemické reakce, nebo ke kalkulačce pro zadání rovnice reakce.

Z laboratoře se lze také dostat k vytvořenému záznamu, který lze vytisknout do souboru.

Kalkulačka umožňuje zadanou rovnici vyčíslit. Poté lze zadanou a úspěšně vyčíslenou reakci přidat k užití v laboratoři. Za tímto účelem se aplikace doptá na neznámé údaje.

Uživatel může také obnovit výchozí data. Tím smaže veškeré provedené a uložené změny.





Obrázek 2.5: Diagram případů užití

## 2.5 Úvod k aplikacím pro Android

Aplikace určené pro Android se píše v jazyce Java. V této aplikaci jsou důležité takzvané aktivity. Aktivita je jedna obrazovka s prvky, které uživatel může ovládat nebo přes ně být informován. Rozložení a vzhled těchto prvků jsou obsaženy v příslušných XML souborech. Kód na pozadí mezitím udává, co se stane při vytvoření nebo zániku aktivity apod. Také obsahuje funkce volané při interakci uživatele s GUI dané aktivity.

Aplikace také obsahuje různé další soubory, kromě zmíněných XML, jako obrázky, audio, konfigurační soubory nebo jakékoliv jiné soubory s daty užitečnými aplikaci. Důležitým souborem je manifest. Definiuje použité styly - jednotný vzhled mezi více aktivitami, knihovny, oprávnění, které aplikace vyžaduje nebo minimální verze API.

Informace v této sekci jsou čerpány z [16].

### 2.5.1 Intent

Intent je asynchronní zpráva určena pro spuštění jiných komponent - například aktivit. Spuštěné aktivitě lze předat data a stejně tak může vracet výsledek. Delší popis lze nalézt na [17].



---

## Realizace

### 3.1 Načítání dat

Při prvním spuštění aplikace jsou načteny data z XML souboru ve složce Assets a vytvoří si kopii souboru v interní paměti, kde je možné obsah souboru upravovat. Uživatel má tím pádem možnost, přidat vlastní reakce a sloučeniny pro použití v laboratoři, a to i pro příští spuštění aplikace. Dále aplikace umožňuje přidané informace smazat – přepsat soubor v interní paměti původním souborem ze složky Assets.

Soubor `elements.xml` obsahuje informace o jednotlivých prvcích, sloučeninách a reakcích. Jeho strukturu lze vidět na obrázku 3.1. U prvků je potřeba symbol pro jejich identifikaci, relativní atomová hmotnost, ze které jde spočítat molární hmotnost sloučeniny v aplikaci užitečná pro výpočet váhy vzniklých produktů a zbylých reaktantů, a slovní název prvku, který v současné podobě aplikace není využit. Mohl by ale být užitečný při rozšíření aplikace o drobné informace o jednotlivých prvcích.

U sloučenin je opět důležitý symbol. Jejich jméno také není nutně využito. V případě chemie je jednodušší vyhledávat a rozeznávat sloučeniny podle takzvaného stechiometrického zápisu a v případě, že uživatel chce přidat sloučeninu pro užití v laboratoři, nemusí zadávat její název. Atribut `mixable` udává, zda se v případě kapaliny sloučenina smíchá s vodou nebo jako olej zůstane oddělená ve vlastní vrstvě. Pořadí, ve kterém se nesmíchané vrstvy zobrazí, je udáno atributem `density`. Hustota by také byla užitečná, pokud by se například množství kapaliny zadávalo jako objem místo hmotnosti. Další je skupenství, které je pevné, kapalné nebo plynné. Kapaliny a pevné látky oproti plynům aplikace zobrazuje stejně, pouze kapaliny se smíchají. Aplikace rozeznává 11 základních barev, v případě smíchaných kapalin nebo plynů se zprůměruje červená, zelená a modrá složka jejich RGB zápisu jejich barev. U jednotlivých složek je uvedeno oxidační číslo, počet a symbol prvku. Jde tedy o prvky obsažené v dané sloučenině se stejným oxidačním číslem, které je nutné, pokud bude třeba vyčíslit rovnici s jejich užitím.

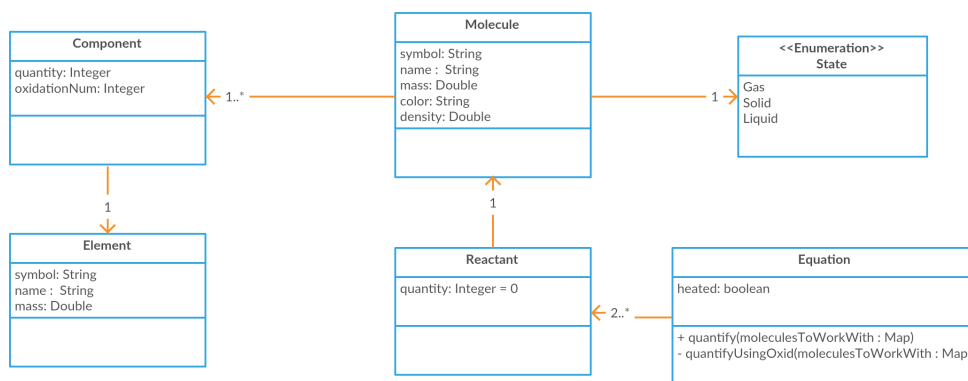
### 3. REALIZACE

```

<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
- <all>
  <!-- List of available elements: -->
  - <elements>
    <element symbol="H" mass="1.008" name="Hydrogen"/>
    <element symbol="He" mass="4.003" name="Helium"/>
    <element symbol="Li" mass="6.941" name="Lithium"/>
    <element symbol="Be" mass="9.012" name="Beryllium"/>
    <element symbol="B" mass="10.811" name="Boron"/>
  </elements>
  <!-- List of available reactants and products: -->
  - <molecules>
    - <molecule symbol="H2" name="Hydrogen" mixable="false" density="0.0899" state="gas" color="white">
      <part symbol="H" oxidation_number="0" number="2"/>
    </molecule>
    - <molecule symbol="O2" name="Oxygen" mixable="false" density="1.331" state="gas" color="grey">
      <part symbol="O" oxidation_number="0" number="2"/>
    </molecule>
    - <molecule symbol="H2O" name="Water" mixable="true" density="1000" state="liquid" color="blue">
      <part symbol="H" oxidation_number="1" number="2"/>
      <part symbol="O" oxidation_number="-2" number="1"/>
    </molecule>
  </molecules>
  <!-- List of reactions: -->
  - <reactions>
    - <reaction heated="yes">
      <reactant symbol="H2"/>
      <reactant symbol="O2"/>
      <product symbol="H2O"/>
    </reaction>
  </reactions>
</all>

```

Obrázek 3.1: Ukázka obsahu příloženého XML souboru.



Obrázek 3.2: Diagram tříd vytvářených z načtených informací.

U chemických rovnic jsou na základě zaznamenány symboly jednotlivé reaktanty a produkty a booleanovská hodnota heated, udávající zda je nutné reaktanty zahřívát, aby zreagovali. Zjednodušeně je tak simulován rozdíl mezi exotermní a endotermní reakcí.

Při spuštění aplikace jsou tyto hodnoty načteny z příloženého souboru a jsou vytvořeny jim odpovídající třídy zobrazené na obrázku 3.2. Ty jsou v případě prvků a sloučenin vloženy do mapy, v případě reakcí do vektoru, protože u nich není jednoznačný vhodný klíč. Tyto proměnné jsou přístupné z kteréhokoliv místa v kódu.

## 3.2 Vyčíslení reakcí a jejich přidání v aplikaci

Pro zadání reakcí byla připravena obrazovka, která lze vidět v obrázku 3.3. V horní části obsahuje displej a pod ním tlačítka pro jednotlivé prvky, které jsou přes sebe vloženy ve dvou vrstvách, které se střídají stisknutím tlačítka označeného „1st“, případně „2nd“. Prvky jsou seřazené abecedně dle chemických symbolů a barevně rozlišené podle periodické soustavy prvků na alkalické kovy, kovy alkalických zemin, vzácné plyny a tak dále. V pravém dolním rohu se nachází číslice a speciální znaky, tlačítko pro smazání znaku nebo v případě některých prvků dvou znaků a tlačítko pro smazání displeje. Zadaná reakce se potvrdí tlačítkem „GO“.

Obsah displeje je předán třídě nazvané Parser, která ho nejdříve začne validovat a poté rozdělovat na jednotlivé reaktanty, produkty a v nich obsažené prvky. V případě špatně zformátované reakce je vyhozena výjimka a její obsah je zobrazen uživateli. Pokud je v reakci alespoň o dva více reaktantů a produktů, než jednotlivých prvků, tak se aplikace dotáže uživatele na jednotlivá oxidační čísla k jednotlivým prvkům molekul, které aplikace nezná. Jinak je vytvořena instance třídy Equation a spuštěna její metoda `quantify`.

Pokud metoda nedokáže reakci vyčísřit, vyhodí výjimku a její obsah je opět zobrazen uživateli. Při úspěšném vyčíslení je zobrazen výsledek a aplikace se zeptá, zda chce uživatel rovnici a v ní obsažené molekuly uložit. Pokud nikoliv, dialog zmizí a uživatel může opět zadat novou reakci. Jinak v případě, že existují oxidační čísla, která dosud nebyla vyplněna, je uživatel ještě vyplní.

Dále u dosud neznámých molekul doplní atributy, jako je barva, hustota, skupenství a případně mísitelnost s vodou. Následně je tato rovnice reakce přidána do vektoru rovnic a v ní obsažené molekuly do mapy molekul pro jejich okamžité užití a dále je přepsán obsah souboru XML v interní paměti pro příští běhy aplikace. Tento postup je znázorněn v obrázku 3.4 diagramu aktivit.

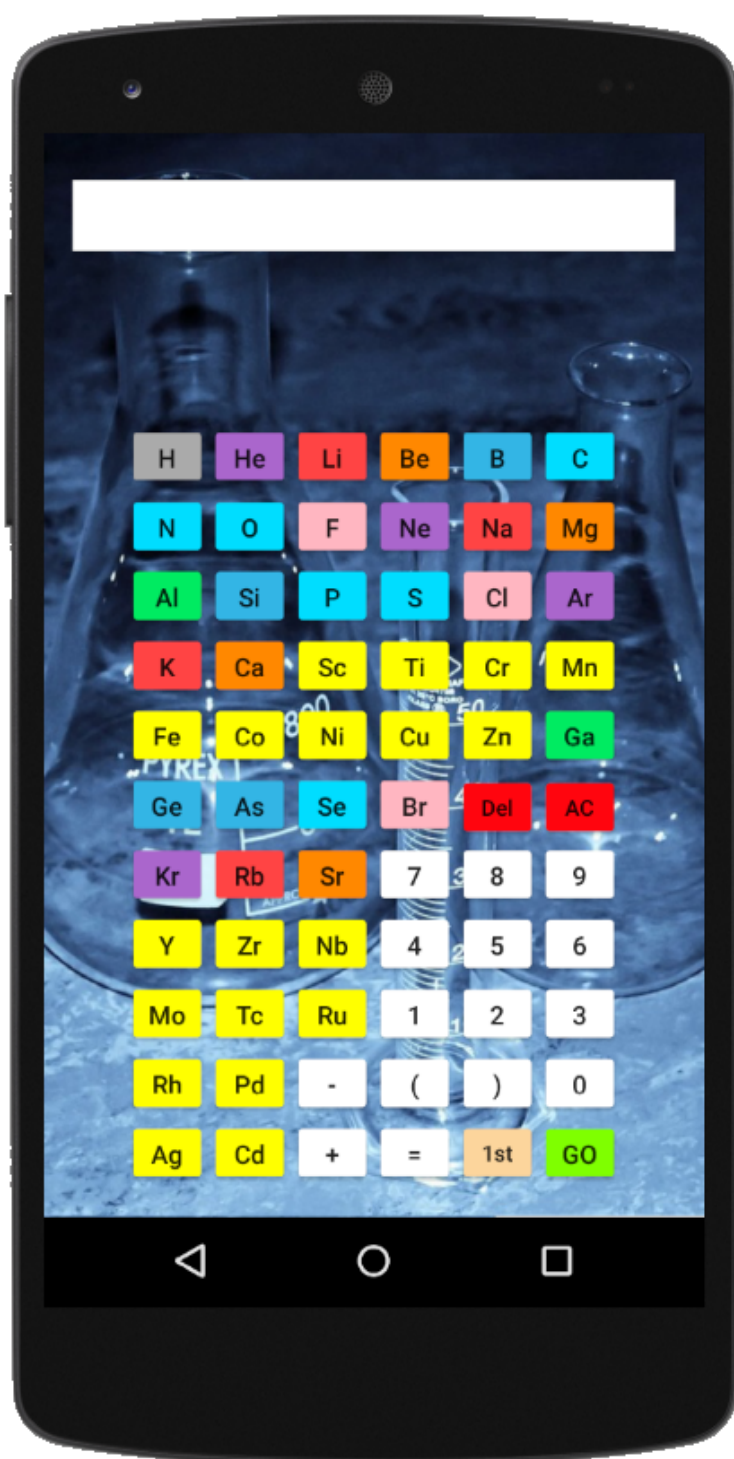
## 3.3 Virtuální laboratoř

V laboratoři lze míchat sloučeniny zadané podle váhy. Kahan, zobrazený pod baňkou pro reaktanty, udává, zda jsou reaktanty zahřívány. V případě, že jsou obsaženy všechny reaktanty jedné z uložených rovnic reakce a jsou příslušně zahřívány, či nikoliv, obsah baňky zreaguje a výsledné produkty se zobrazí v baňce napravo. Obsah baněk spolu s váhou jednotlivých sloučenin je zobrazen vedle nich a nad nimi je zobrazena poslední provedená reakce. Také lze obsah baněk vyčistit a začít znovu. Provedené úkony si aplikace eviduje. Tento záznam lze poté vytisknout do souboru v externím úložišti. Vytvořený log lze vidět na obrázku 3.6.

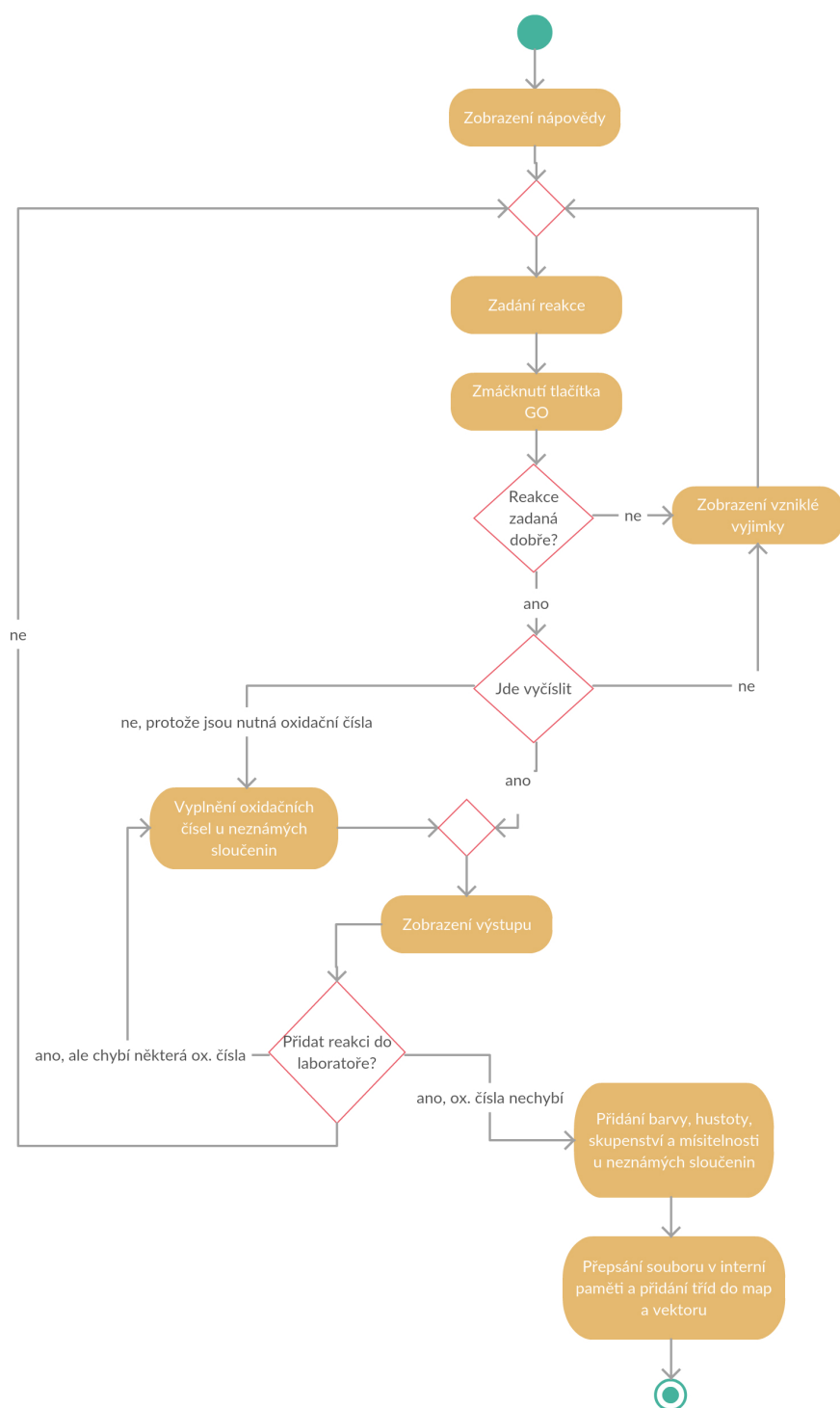
O toto vše se stará třída `Flask` vyobrazená na obrázku 3.5. Veřejné metody nastavující obsah baněk a zda jsou zahřívány vrací zda obsah zreagoval. Záro-

### 3. REALIZACE

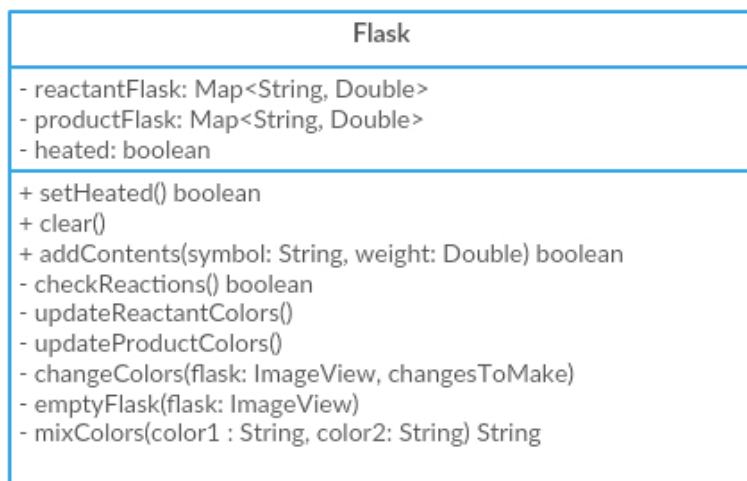
---



Obrázek 3.3: Obrazovka pro zadání reakce chemické rovnice.



Obrázek 3.4: Diagram tříd vytvářených z načtených informací.



Obrázek 3.5: Třída kontrolující reakce a starající se o vizuální podobu.

veň volají privátní metody `updateReactantColors` a `updateProductColors`, které vizuálně upraví obsah baněk, stejně jako text zobrazený vedle nich a nad nimi.

O vizuální změnu se stará metoda `changeColors`, kterou volají. Pro zobrazení baňky je užito několik vektorových obrázků v závislosti na tom, zda obsahuje nějakou plynnou látku, a nějaké kapalné nebo pevné. Plynné látky se barevně smíchají, pevné ne a kapalné podle příslušného atributu. Obrázky pro baňku obsahující plynné a kapalné látky mají tři barevné vrstvy. Metody určí, jak tyto vrstvy obarvit podle toho, kolik těchto látek mají obsahovat, jejich barev a hustot. V případě dvou je prostřední vrstva přidělena látce, které je více. Zavolaná metoda `changeColors` načte příslušný vektorový obrázek do stringu, změní v něm barvy podle svého vstupního parametru a tento upravený obrázek zobrazí. K práci s vektorovými obrázky formátu svg je užita knihovna `svg-android`<sup>5</sup>.

V následujícím kódu lze vidět postup úpravy reaktantů v případě, že metoda `checkReactions` zjistila, že reaktanty opravdu mají zreagovat. Nejdříve je nalezen reaktant, který zreaguje všechen, a poté jsou upraveny váhy reaktantů v mapě `reactantFlask`, která simuluje reakční nádobu.

---

```

//actual number of moles (based on selected weight)
//divided by stoichiometric coefficient of given molecule
Double minRelativeN = Double.MAX_VALUE;
int minIndex = 0; //index of this reactant
double supposedReacweight=0; //how much the n moles weigh
double actualReacWeight=0; //how much of it there is

```

<sup>5</sup><https://github.com/bigfishcat/svg-android>



```
//find reactant with lowest relativeN
for (int j = 0; j < eq.getReactants().size(); j++) {
    Molecule molec =
        MainActivity.molecMap.get(eq.getReactants().get(j));
    int quantity = eq.getReactants().get(j).quantity;
    double M = molec.getMass();
    double m = reactantFlask.get(molec.molecSymb);
    double relativeN = (m / M) / quantity;
    double n = m / M;

    //checking if the value is lowest so far
    if (relativeN < minRelativeN) {
        minRelativeN = relativeN;
        minIndex = j;
        supposedReacweight = M *molec.quantity;
        actualReacWeight = reactantFlask.get(molec.molecSymb);
    }
}

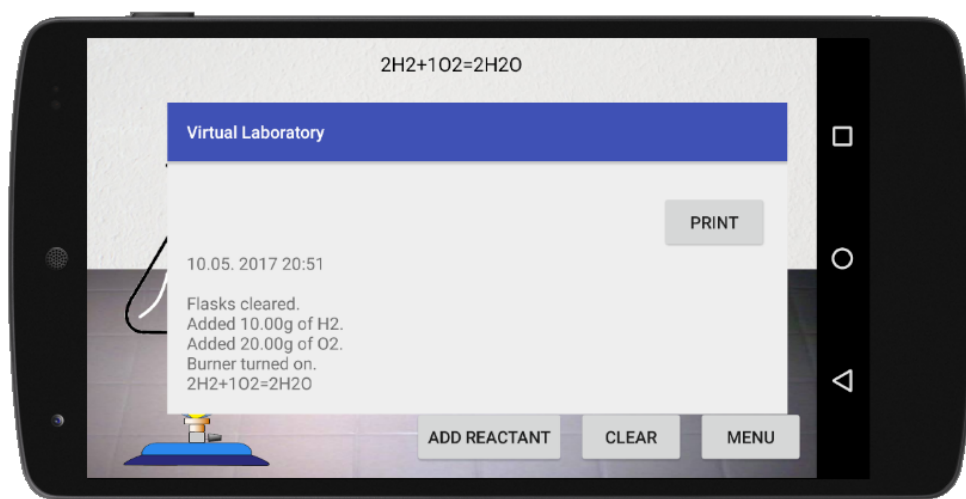
//change the weights for the rest of reactants
for (int j = 0; j < eq.getReactants().size(); j++) {
    Molecule molec =
        MainActivity.molecMap.get(eq.getReactants().get(j));
    //this is just to make sure there isn't one millionth of a gram
    left over
    if (j == minIndex) {
        reactantFlask.remove(molec.molecSymb);
        continue;
    }
    double n = minRelativeN * eq.getReactants().elementAt(j).quantity;
    double M = molec.getMass();
    double usedWeight = n * M;
    double unusedWeight = reactantFlask.get(molec.molecSymb) -
        usedWeight;

    //whether to change the weight or delete it completely
    if (unusedWeight > 0.0000001) reactantFlask.put(molec.molecSymb,
        unusedWeight);
    else reactantFlask.remove(molec.molecSymb);
}
//change the reactant flask and textview displaying its contents
updateReactantColors();
```

---

### 3. REALIZACE

---



Obrázek 3.6: Záznam o provedených úkonech vytvořený aplikací.

---

# Testování

Aplikace byla testována primárně manuálně. Hlavní důraz byl kladen na vyčíslování chemických rovnic a správné počítání poměrů reaktantů a produktů.

## 4.1 Testování vyčíslení rovnic

Vyčíslení rovnic lze vzhledem ke způsobu fungování programu snadno testovat úpravou zdrojového XML souboru, který obsahuje mimo jiné rovnice, které aplikace při spuštění vyčíslí. Z výpisů lze snadno rozeznat, u kterých selhala. Testování by v tomto případě šlo považovat za automatizované.

U vyčíslování chemických rovnic zadaných uživatelem je nejdříve důležité správně rozpoznat obsah displeje. Kromě toho, že dokáže správně rozdělit rovnici reakce na levou a pravou stranu a jednotlivé reaktanty a produkty, musí umět rozeznat i iontové náboje. Zároveň aplikace validuje, zda reakce byla zadána správně. Po testování i s provizorními uživateli byly testy rozšířeny a přidány nové chybové hlášky pro přesnější informování uživatele.

## 4.2 Testování počtů s poměry reaktantů a produktů

Tato funkce byla testována manuálně. Vzhledem k tomu, že jednotlivé vstupy se od sebe zásadně neliší a kód starající se o tuto funkcionalitu není zásadně rozvětvený, nebylo automatizované testování využito. Výstup metody byl zkontrolován Ing. Jiřím Mikešem z Vysoké školy chemicko-technologické v Praze a přijat jako správný.

## 4.3 Testování uživatelského rozhraní s uživatelem

Uživatelské rozhraní bylo opět testováno s Ing. Mikešem a na základě jeho připomínek upraveno. Řazení prvků na „kalkulačce“ pro zadání reakce bylo

#### 4. TESTOVÁNÍ

---

změněno na abecední místo původního řazení podle periodické soustavy prvků. Změnily se některé vizuální prvky, jako je pozadí virtuální laboratoře. Na základě připomínek jiných uživatelů dostala zobrazená baňka stejný efekt, který se stane po kliknutí, jako má tlačítko „Add Reactant“.

Tito čtyři uživatelé zároveň dostali za úkol projít případy užití. Na základě nich byly upraveny barvy pro snadnější orientaci.

---

## Závěr

Cílem práce bylo navrhnout a implementovat aplikaci simulující chemickou laboratoř pro operační systém Android. Zabýval jsem se v ní základy chemie, srovnáním s jinými aplikacemi a rozбором vytvořené aplikace. Aplikace umožňuje provádět chemické reakce na základě dat načtených ze XML souboru. Dále rozlišuje, zda jsou reaktanty zahřívány a zda jsou rozpustné ve vodě. Také jsou zohledněny poměry reaktantů a produktů na základě stechiometrie. O provedených úkonech lze pořídit zpráva.

Nad rámec zadání aplikace vyčísľuje rovnice chemických reakcí. Oproti ostatním zkoumaným aplikacím dokáže s užitím změn oxidačních čísel vyřešit i rovnice, které tyto aplikace nedokázaly.

Aplikace má velký potenciál pro rozšíření. Šla by rozšířit o více nástrojů, různých nádob a ovládání ve stylu „drag and drop“, poté o funkcionalitu jiných aplikací s tématem chemie, které se liší od požadavků. Dostupné molekuly by šly rozdělit na viditelné uživateli a ty, které musí sám nejdříve vytvořit, aby s nimi mohl dále pracovat.

S přidáním síťové komunikace by mohla umožňovat vytvořit nebo přidat se ke skupině, kde by existovaly dvě úrovně pravomocí – učitel a student. Učitel by mohl skupině zadat, co mají vytvořit a zároveň pro skupinu vytvořit specifický soubor obsahující dostupné reakce a molekuly. Ostatní až k cílové by bylo nutné postupně vytvořit reakcemi. Vytvořený záznam by aplikace sama zpracovala a ohodnotila, zda splňuje zadání. S tím by se evidoval i žebříček nejlepších studentů v rámci skupiny.



---

## Literatura

- [1] Thix: Chemist - Virtual Chem Lab. [cit. 2016-12-11]. Dostupné z: <https://play.google.com/store/apps/details?id=air.thix.sciencesense.chemist>
- [2] of Science, M.; Industry, C.: goReact. [cit. 2016-12-11]. Dostupné z: <https://play.google.com/store/apps/details?id=com.goReact>
- [3] Always, A.: Chemical Balance. [cit. 2017-04-15]. Dostupné z: <https://play.google.com/store/apps/details?id=com.amazingalways.chemicalbalance>
- [4] Narayan, U.: Chemical Equation Balancer. [cit. 2016-12-17]. Dostupné z: <https://play.google.com/store/apps/details?id=com.upas.eqbalancer>
- [5] Kajzar, A.: Výpočty z chemických rovnic. [cit. 2017-05-10]. Dostupné z: <http://chemicke-vypocty.cz/Vypocty-z-chemickyh-rovnic.html>
- [6] Aleš Mareček, J. H.: *Chemie pro čtyřletá gymnázia, 1.díl*. Nakladatelství Olomouc s.r.o., třetí vydání, 2005, ISBN 80-7182-055-5.
- [7] Kos, V.: Moje škola – škola hrou a pro každého a nonstop. [cit. 2016-12-11]. Dostupné z: [http://www.mojeskola.cz/Vyuka/Php/Learning/Chemie/chemie\\_krokiem4.php](http://www.mojeskola.cz/Vyuka/Php/Learning/Chemie/chemie_krokiem4.php)
- [8] Jaroslav Reichl, M. V.: Encyklopedie fyziky. [cit. 2017-04-10]. Dostupné z: <http://fyzika.jreichl.com/main.article/view/573-relativni-atomova-hmotnost-latkove-mnozstvi>
- [9] Michaela Jánková, M. S.: Procvič si názvosloví. [cit. 2016-12-11]. Dostupné z: <http://www.nazvoslovi.cz/studium>

## LITERATURA

---

- [10] Advance, B.: Chemik - super chemie nástroj. [cit. 2016-12-11]. Dostupné z: <https://play.google.com/store/apps/details?id=com.bk.advance.chemik>
- [11] SudoApps: Balance Chemical Equation Pro. [cit. 2016-12-17]. Dostupné z: <https://play.google.com/store/apps/details?id=com.chemistry.equation.balancer.pro>
- [12] E-Learning: Chemistry Helper. [cit. 2016-12-17]. Dostupné z: <https://play.google.com/store/apps/details?id=com.qkstudio.chemistry>
- [13] Schutzzeichel, C.: LabTools. [cit. 2017-05-05]. Dostupné z: <https://play.google.com/store/apps/details?id=pollux.de.labtools>
- [14] Teach.RS: Chemistry Calculator. [cit. 2016-12-17]. Dostupné z: <https://play.google.com/store/apps/details?id=rs.teach.simplecalc>
- [15] Perez, A.: CMM | Molar Mass Calculator. [cit. 2016-12-18]. Dostupné z: <https://play.google.com/store/apps/details?id=com.alexandreperex.cmm>
- [16] Introduction to Android. [cit. 2017-05-12]. Dostupné z: <https://developer.android.com/guide/index.html>
- [17] Intents and Intent Filters. [cit. 2017-05-12]. Dostupné z: <https://developer.android.com/guide/components/intents-filters.html>



## Seznam použitých zkratk

**API** Application programming interface

**GUI** Graphical user interface

**OS** Operační systém

**XML** Extensible markup language

**RGB** Red green blue



## Instalační příručka

Aplikaci je nutné nainstalovat z priloženého CD.

- Nakopírujte přiložený app-release.apk do vnější paměti telefonu s operačním systémem Android.
- V nastavení Nastavení->Zabezpečení->Správa Zařízení zatrhněte Neznámé zdroje.
- Najděte app-release.apk v paměti telefonu s pomocí libovolného Správce souborů.
- Nainstalujte.
- Spusťte přes ikonu Virtual Laboratory.



---

## Obsah přiloženého CD

	readme.txt.....	stručný popis obsahu CD
	exe .....	adresář se spustitelnou formou implementace
	app-release.apk .....	spustitelná forma implementace
	src	
	impl .....	zdrojové kódy implementace
	thesis .....	zdrojová forma práce ve formátu $\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$
	text .....	text práce
	BP_Nikl_Patrik_2017.pdf .....	text práce ve formátu PDF