

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Косенок Сергей Михайлович
Должность: ректор
Дата подписания: 01.07.2025 14:50:58
Уникальный программный ключ:
e3a68f3eaa1e62674b54f4998099d3d6bfdcf836

Оценочные материалы для текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

Компьютерные технологии в химии

Код, направление подготовки	04.03.01 ХИМИЯ
Направленность (профиль)	Инфохимия
Форма обучения	Очная
Кафедра-разработчик	Химии
Выпускающая кафедра	Химии

Типовые задания для контрольной работы:

1. Анализ спектральных данных для определения химических соединений:
Исследование возможностей применения методов машинного обучения для анализа спектральных данных с целью идентификации химических соединений.
2. Прогнозирование свойств химических соединений на основе молекулярных дескрипторов: Разработка и применение моделей машинного обучения для прогнозирования физико-химических свойств новых химических соединений на основе их молекулярных дескрипторов.
3. Оптимизация химического синтеза с использованием методов оптимизации и машинного обучения: Применение методов оптимизации и машинного обучения для оптимизации условий химического синтеза с целью повышения эффективности и снижения затрат.
4. Анализ данных хроматографии для выявления примесей в химических соединениях: Использование методов Data Science для анализа данных хроматографии с целью обнаружения и идентификации примесей в химических соединениях.
5. Разработка системы поддержки принятия решений для выбора оптимальных условий химического эксперимента: Создание системы на основе методов Data Science, способной анализировать данные предыдущих экспериментов и предлагать оптимальные условия для проведения нового эксперимента.

Типовые вопросы к зачету:

1. Виды данных в химии: количественные, порядковые и номинальные.
2. Задачи анализа данных в химии: классификация, группировка, прогнозирование, нахождение ассоциаций и зависимостей, визуализация.
3. Основные разделы, на которых базируется анализ данных в химии.
4. Классификация методов анализа данных в химии.
5. Этапы анализа данных в химии.
6. Сферы применения анализа данных в химии.
7. Наиболее важные законы распределения в химии, их свойства.
8. Законы распределения в химии: равномерное, нормальное (гауссово), Стьюдента, «хи-квадрат», экспоненциальное, Фишера.
9. Числовые характеристики случайных величин в химии.
10. Характеристики центра группирования и вариации в химии.

11. Основные определения и понятия выборочного метода в химии.
12. Представления о генеральной совокупности и выборке в химии.
13. Понятие репрезентативной выборки в химии.
14. Повторные и бесповторные выборки в химии.
15. Первичный анализ данных в химии, группировка.
16. Дискретные и интервальные вариационные ряды в химии.
17. Формула Стерджеса в химии.
18. Генеральные характеристики в химии: среднее, дисперсия, моменты высших порядков (асимметрия, эксцесс).
19. Математическое ожидание и дисперсия выборочного среднего и доли для повторной и бесповторной выборки в химии.
20. Мода и медиана в химии.
21. Эмпирическая функция распределения, полигон и гистограмма в химии.
22. Точечные оценки в химии.
23. Несмещённость, состоятельность и эффективность точечных оценок в химии.
24. Оценка неизвестной вероятности по частоте в химии.
25. Точечные оценки для математического ожидания и дисперсии в химии.
26. Оценивание параметров функции распределения в химии.
27. Метод моментов в химии.
28. Метод максимального правдоподобия в химии.
29. Интервальные оценки в химии.
30. Точность и надёжность выборочных оценок в химии.