

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Косенок Сергей Михайлович
Должность: ректор
Дата подписания: 02.07.2026 14:41:05
Уникальный программный ключ:
e3a68f3eaa1e62674b54f4998099d3d6bfdfcf836

Оценочные материалы для текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

Компьютерные технологии в химии, 3 семестр

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

Типовые оценочные средства или иные материалы, с описанием шкал оценивания и методическими материалами, определяющими процедуру проведения и оценивания достижения результатов обучения

Текущий контроль по дисциплине проводится во время проведения практических занятий в форме защиты отчета по практическим работам по каждой теме.

Итоговым контролем по данной дисциплине является зачет. Условия для получения оценки «зачтено»:

1. Выполнены все 9 практических заданий
 2. Средний балл по ним составляет не менее 4,5
- Если средний балл менее, чем 4,5, то необходимо пройти дополнительный Тест и ответить на вопросы к зачету.

1. Типовое практическое задание

Средство контроля, организованное в виде практической работы, с целью усвоения знаний и получения практических навыков по теме «Обработка и анализ химических данных с использованием регрессионного анализа и инструментов Python» раздела 5. Цель работы: сформировать у обучающегося навыки полного цикла работы с данными с использованием языка Python и ИИ-ассистента: генерация синтетических данных, применение методов аппроксимации (МНК, ЛАССО), оценка точности прогнозов, интерпретация результатов и сравнение моделей различной сложности.

Формулировка задания:

В практикуме необходимо выполнить последовательные этапы работы с данными. На каждом этапе студент самостоятельно формулирует промпт (запрос) для ИИ-ассистента (например, DeepSeek), получает код на Python, запускает его в среде Google Colab (или локальном Jupyter Notebook), анализирует результаты и фиксирует выводы. Все шаги должны быть отражены в отчёте.

1. Генерация исходных данных:

С помощью ИИ-ассистента сгенерировать код, который:

- Создает вектор X из 200 значений, равномерно распределённых на отрезке $[0, 10]$.
- Создает вектор RND из 200 случайных чисел в диапазоне от -5 до 5 .
- Формирует вектор $Y = X^2 - 0.5 \cdot X + 2 + RND$.
- Сохраняет оба вектора (X и Y) в файл **Data.xlsx** (два столбца).

2. Аппроксимация полиномом 2-й степени (МНК)

С помощью ИИ-ассистента создать программу, которая:

- Загружает данные из файла **Data.xlsx**.
- Строит точечный график исходных данных $Y(X)$.
- Выполняет аппроксимацию данных полиномом $y = a \cdot x^2 + b \cdot x + c$ методом МНК (например, через `numpy.polyfit` или `sklearn.linear_model.LinearRegression`).
- Выводит найденные коэффициенты a , b , c .
- Вычисляет и выводит значение MAE (Mean Absolute Error) между исходными Y и предсказанными моделью значениями.
- Строит совмещённый график: точки исходных данных и линия полученной модели.

3. Применить регрессию ЛАССО к имеющимся данным

Требования к отчету:

Отчёт должен быть оформлен в текстовом редакторе и содержать:

1. Введение – краткое описание цели работы и используемых методов (ИИ-ассистент, Python, МНК, ЛАССО, MAE).
2. Ход работы – по каждому этапу:
 - Использованный промпт (запрос к ИИ) или его краткая формулировка.
 - Скриншоты рабочей среды (Google Colab) с выполненным кодом и полученными выводами (коэффициенты, MAE, графики).
 - *Допускается замена скриншотов качественным текстовым/табличным представлением результатов.*
 - Анализ полученных результатов (ответы на вопросы, указанные в задании).
3. Заключение – резюме и выводы по проделанной работе.

Контрольные вопросы:

1. Почему в задании при аппроксимации полиномом 4-й степени методом МНК может получиться более низкая ошибка MAE, чем при использовании полинома 2-й степени, но при этом модель 4-й степени может быть менее пригодна для прогнозирования на новых данных? Как регрессия ЛАССО помогает решить эту проблему?

2. В задании используется метрика MAE (Mean Absolute Error). Что она показывает? Если после аппроксимации полиномом 2-й степени $MAE = 2.3$, а после полинома 4-й степени $MAE = 1.8$, можно ли гарантировать, что модель 4-й степени лучше? Почему?

Критерии оценивания:

Максимальная оценка ставится если корректно выполнены все задания, отчет

содержит теоретическое описание, цели и задачи практической работы, полученные результаты, содержательные выводы по каждому заданию, отчет оформлен в соответствии с требованиями, а также студент ответил на контрольные вопросы по теме.

2. Тестовое задание

Средство контроля, организованное в виде теста, с целью проверки усвоенных знаний и представлений по теме «Теоретические основы молекулярного моделирования. Методы оптимизации геометрии, силовые поля и квантово-химические подходы» раздела 2. Тестовое задание состоит из нескольких вопросов, включающих задания с выбором единственного правильного ответа, с несколькими возможными правильными ответами, задание на завершение предложений, задание на соответствие.

1.1 Пример задания с выбором единственного правильного ответа:

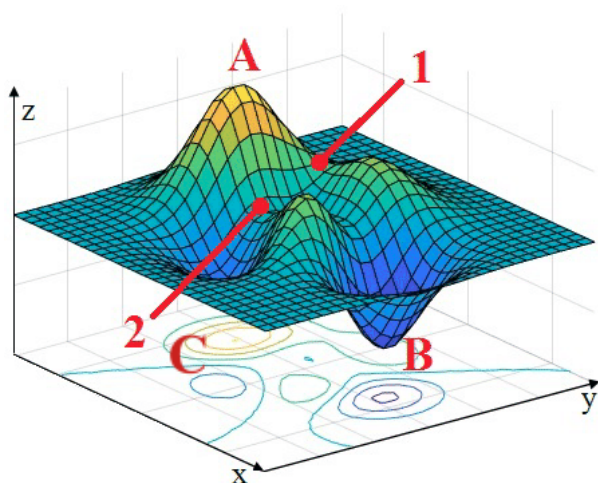


Рис. 1 - Поверхность потенциальной энергии

Верно или Неверно: Конформация С на Рис. 1 (локальный минимум) имеет большее число доступных микросостояний, чем конформация В. При высокой температуре вероятность того, что система находится в В, будет выше, чем вероятность для С.

1.2 Пример задания на соответствие:

Установите соответствие между характеристикой и методом конформационного поиска:

1. Систематический поиск
2. Метод Монте-Карло

- А. Обеспечивает полный перебор при достаточно малом шаге
- Б. Использует случайные изменения структуры на каждом шаге
- В. Результат имеет детерминированную природу
- Г. Число конформаций можно рассчитать по формуле заранее
- Д. Эффективность поиска новых конформаций падает со временем

3. 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.