

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Хімічний факультет

Спеціальність хімія

Семестр 3

Відділення деннеОКР: бакалаврНавчальна дисципліна : **Хемоінформатика та інформаційні технології для хіміків****ЕКЗАМЕНАЦІЙНИЙ БІЛЕТ №1****[усі етапи розрахунків мають бути описані]**1) Розрахуйте величину: $y(A^+ - B)^{-1}Cx$, якщо

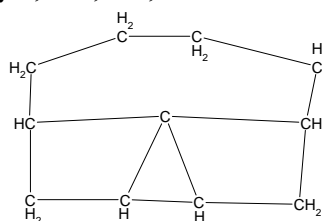
$$A = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 3 & 3 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 3 & 3 \end{pmatrix}, \quad x = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \end{pmatrix}. \quad y = 1/3 \quad (10 \text{ балів})$$

2) В реакційній суміші присутні наступні реагенти: H_2 , HO , H_2O_2 , HO_2 , H_2O , O_2 . Розрахуйте кількість лінійно-незалежних реакцій. Розрахуйте та запишіть можливі рівняння цих реакцій. Які речовини можуть бути обрані в якості ключових? Запишіть алгебраїчні рівняння що пов'язують концентрації ключових та не ключових речовин.

(10 балів)

3) Отримайте формулу для коефіцієнта регресії $y = a_1/x$. Для даних наведених в таблиці розрахуйте цей коефіцієнт. Розрахуйте дисперсію y . (10 балів)

x	y
1	5
2	4
3	3
4	1

4) Розрахуйте топологічні індекси $\chi^{(1)}$, IC_1 , M_1 , M_2 для молекули вуглеводню. (10 балів)

Затверджено на засіданні кафедри хімічного матеріалознавства
протокол № 7 від " 15 " грудня 2015 р.

зав. Кафедри

проф. Холін Ю.В.

Екзаменатори

проф. Іванов В. В.,

доц. Пантелеймонов А. В.