

Колоквиум по Хемометрия

В часовете на последната лекция се провежда колоквиум по дисциплината. Студентите имат право да ползват всички учебни материали, калкулатор и собствената си тетрадка със записки (ако имат такава). **Не се разрешава използването на ксерокс копие от тетрадката на състудент!**

Колоквиума се попълва в дадената от преподавателя форма. На следващите две страници е даден примерен колоквиум - със син цвят са дадени решенията, така както се очаква студентите да ги попълнят. Не се признава за решена задача, за която е даден директно численият отговор!

Оценката се сформира по следния начин:

$$\text{Оценка} = 2 + (\text{брой точки} / 36) * 4$$

Задачите имат следния брой точки, който сумарно е **36**. Една точка от колоквиума носи 0.11 единици от оценката. Оценка под 2.90 се закръгля на 2.00, т.е. за да изкарате тройка трябва да имате поне 9 точки от колоквиума.

Въпроси	Брой точки
1.1	1
1.2	1
1.3	1
1.4	1
1.5	1
1.6	2
2.1	2
2.2	2
2.3	3
2.4	2
2.5	2
2.6	2
3.1	2
3.2	2
3.3	3
4.1	2
4.2	4
4.3	3
Общо	36

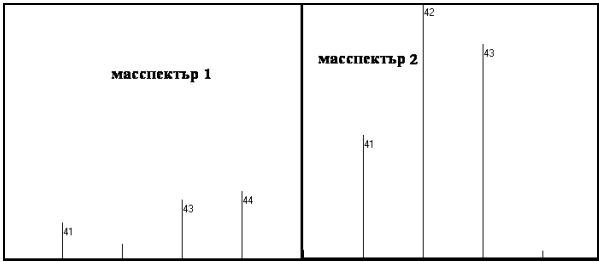
Студенти изкарали над оценка над 4.75 (25 точки и нагоре) се освобождават от изпит!

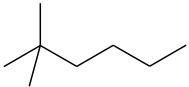
Колоквиум по Хемометрия

Иван Петров Станков			0149876543
име, презиме и фамилия			Факултетен №
Компютърна химия, 3	1	22/01/2015	Отличен (6)
специалност, курс	ВАРИАНТ	ДАТА	Крайна оценка

Имате следното двоично изображение (image)	
Въпроси:	Отговори:
1.1. Каква е размерността на изображението?	3 x 2
1.2. Кодирайте изображението ред по ред в N-мерен двоичен образ. Изберете черният цвят да отговаря на единица.	$X = (0, 0, 1, 0, 1, 0)$ $N = 6$
1.3. Колко е размерността на този образ?	
1.4. Кодирайте изображението колона по колона в N-мерен двоичен образ. Изберете черният цвят да отговаря на нула.	$X = (0, 1, 1, 0, 0, 0)$ $N = 6$
1.5. Колко е размерността на този образ?	
1.6. Превърнете образа (1,0,1,0,1,0) в двумерно изображение с размерност 2x3. Изберете черният цвят да отговаря на единица и кодирайте ред по ред.	Рисунка на изображението:

2.1. Колко е разстоянието по Хеминг между следните два образа? $X_1 = (1, 0, 1, 0)$ и $X_2 = (1, 0, 0, 1)$	$D_H = 1 \text{ xor } 1 + 0 \text{ xor } 0 + 1 \text{ xor } 0 + 0 \text{ xor } 1 =$ $= 0 + 0 + 1 + 1 = 2$
2.2. Колко е разстоянието в Манхатън между следните два образа? $X_1 = (1, 1, 0, 0)$ и $X_2 = (1, 0, 1, 0)$	$D_1 = 1-1 + 1-0 + 0-1 + 0-0 =$ $= 0 + 1 + -1 + 0 = 0 + 1 + 1 + 0 = 2$
2.3. Колко е подобие между следните два образа по мярката на Танимото? $X_1 = (1, 0, 1, 0)$ и $X_2 = (0, 1, 1, 0)$	Числител = 1 and 0 + 0 and 1 + 1 and 1 + 0 and 0 = $= 0 + 0 + 1 + 0 = 1$ Знаменател = 1 or 0 + 0 or 1 + 1 or 1 + 0 or 0 = $= 1 + 1 + 1 + 0 = 3$ $D_T = 1 - 1/3 = 1 - 0.33 = 0.67$
2.4. Изчислете скаларното произведение между векторите от т. 2.3.	$X_1 \cdot X_2 = 1 \cdot 0 + 0 \cdot 1 + 1 \cdot 1 + 0 \cdot 0 = 0 + 0 + 0 + 1 = 1$
2.5. Изчислете големината на първия вектор от т. 2.3.	$ X_1 = \sqrt{1^2 + 0^2 + 1^2 + 0^2} = \sqrt{1 + 0 + 1 + 0} =$ $= \sqrt{2} = 1.414$
2.6. Умножете този четиримерния образ $X = (1.2, -1.1, 0.1, 0.0)$ по -2.	$(-2)X = (-2)(1.2, -1.1, 0.1, 0.0) =$ $= [(-2)1.2, (-2)(-1.1), (-2)0.1, (-2)0.0] =$ $= (-2.4, 2.2, -0.2, 0.0)$

<p>За двата маспектъра в дясно, 3.1. Кодирайте двоично двата спектъра с праг Abundance = 10% в интервала $m/e = (42 - 44)$</p> <p>3.2. Изчислете разстоянието по Хеминг</p> <p>3.3. Изчислете разстоянието по Танимото между тях.</p>	 <p>(пиковите с показани m/e позиции имат Abundance $\geq 10\%$)</p>
<p>3.1.</p> <p>$Sp_1 = (1, 0, 1, 1)$)</p> <p>$Sp_1 = (1, 1, 1, 0)$)</p>	<p>3.2.</p> <p>$D_H = 1 \text{ xor } 1 + 0 \text{ xor } 1 + 1 \text{ xor } 1 + 1 \text{ xor } 0 =$ $= 0 + 1 + 0 + 1 = 2$</p>
<p>3.3.</p> <p>Числител = $1 \text{ and } 1 + 0 \text{ and } 1 + 1 \text{ and } 1 + 1 \text{ and } 0 = 1 + 0 + 1 + 0 = 2$</p> <p>Знаменател = $1 \text{ or } 1 + 0 \text{ or } 1 + 1 \text{ or } 1 + 1 \text{ or } 0 = 4$</p> <p>$D_T = 1 - 2/4 = 1 - 0.5 = 0.5$</p>	

<p>4.1. Умножете двете матрици на ръка.</p> $A = \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} \text{ и } B = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix}$	<p>Решение:</p> $A \cdot B = \begin{pmatrix} 1 \times 2 + (-2) \times (-1) \\ 2 \times 2 + 2 \times (-1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix}$										
<p>4.2. Ако инкрементите за изчисляване на стандартната топлина на образуване по адитивната схема са следните:</p> <table border="1" data-bbox="193 1422 746 1541"> <thead> <tr> <th>Група</th> <th>-CH₃</th> <th>-CH₂-</th> <th>>CH-</th> <th>>C<</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Инкремент Kcall/mol</td> <td>-10.21</td> <td>-4.81</td> <td>-0.559</td> <td>1.865</td> </tr> </tbody> </table> <p>То изчислете топлината на образуване на</p> 	Група	-CH ₃	-CH ₂ -	>CH-	>C<	Инкремент Kcall/mol	-10.21	-4.81	-0.559	1.865	<p>Изчисления:</p> $\Delta H_f = h_{CH_3} n(CH_3) + h_{CH_2} n(CH_2) + h_{CH} n(CH) + h_C n(C) =$ $= (-10.21) \times 4 + (-4.81) \times 3 + (-0.559) \times 0 + 1.865 \times 1 =$ $= (-40.84) + (-14.43) + 0.000 + 1.865 =$ -53.41 Kcall/mol
Група	-CH ₃	-CH ₂ -	>CH-	>C<							
Инкремент Kcall/mol	-10.21	-4.81	-0.559	1.865							
<p>4.3. Ако уравнението в матричен вид за абсорбцията на M стандарта от N компонента на L дължини на вълните е следното: $A_{M,L} = C_{M,N} K_{N,L}$, то какво означават следните матрични елементи:</p> <p>(съответните елементи на матриците са дадени с малки букви!)</p>	<p>Отговори:</p> <p>$a_{m,l}$ - абсорбцията на m-тия стандарт на l-тата дължина на вълната.</p> <p>$c_{m,n}$ - концентрацията на n-тия компонент в m-тия стандарт.</p>										