НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ЗАГАЛЬНОЇ ТА НЕОРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ ім.В.І.ВЕРНАДСЬКОГО

ЗАТВЕРДЖЕНО
Вченою радою Інституту загальної та неорганічної хімії
ім. В.І. Вернадського НАН України
протокол № 8
від « 04 » вересня 2025 року

Голова Вченої ради Інституту

Сергій СОЛОПАН

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ (СИЛАБУС)
АНАЛІЗ І ВІЗУАЛІЗАЦІЯ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ РЕЗУЛЬТАТІВ НАУКОВИХ ДОСЛІДЖЕНЬ

(назва навчальної дисципліни)

Рівень вищої освіти: **Третій (освітньо-науковий)**
Галузь знань: **10 Природничі науки**
Спеціальність: **102 Хімія**
Освітньо- наукова програма: **Неорганічна і координаційна хімія, фізична хімія, електрохімія**

Київ
2025

Робоча програма навчальної дисципліни **«Аналіз і візуалізація експериментальних результатів наукових досліджень» -** Київ, 2025. – 11 с.

РОЗРОБНИКИ РОБОЧОЇ ПРОГРАМИ:

Науковий співробітник відділу хімії твердого тіла
ІЗНХ ім. В.І. Вернадського НАН України,
доктор філософії
Іван ЛІСОВСЬКИЙ

(підпис)

Погоджено із гарантом ОНП _____Анатолій ОМЕЛЬЧУК

Програму затверджено на засіданні Вченої ради
Інституту загальної та неорганічної хімії ім. В.І. Вернадського НАН України
протокол № 8
від «04» вересня 2025 року

Вчений секретар Інституту _____Людмила ЛИСЮК

1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	*Характеристика навчальної дисципліни*
Загальна кількість: кредитів – 2 годин – 60 змістовних модулів – 1	*Дисципліна вільного вибору*
	Рік підготовки другий
	Лекції – 8 годин
	Практичні – 10 годин
	Консультації – 4 год
	Самостійна робота – 38 год
	Форма підсумкового контролю: залік

Комп'ютерна обробка та аналіз наукових даних – це ключовий інструмент сучасної науки і техніки, який забезпечує можливість ефективного опрацювання великих масивів експериментальної та теоретичної інформації з метою отримання нових знань і створення високотехнологічних рішень. Ця дисципліна охоплює широкий спектр методів і підходів, що застосовуються в найрізноманітніших галузях — від фундаментальних досліджень у фізиці та хімії до інженерії, біомедицини, екології та аерокосмічної промисловості.

Для глибокого розуміння природи явищ, що досліджуються, необхідно не лише збирати дані, а й грамотно їх обробляти, виявляючи закономірності, приховані залежності та статистично значущі ефекти. Оптимальний аналіз даних передбачає застосування алгоритмів фільтрації шуму, побудови математичних моделей, візуалізації результатів та перевірки гіпотез.

Створення ефективної системи обробки наукових даних вимагає гнучкого поєднання сучасних програмних засобів, статистичних методів, машинного навчання та засобів візуалізації, що дозволяє підвищувати точність і достовірність отриманих результатів.

Актуальним завданням є опанування сучасних підходів до аналізу теоретичних та експериментальних даних, що включає роботу з числовою, текстовою та графічною інформацією, використання спеціалізованих програмних пакетів, а також розуміння методології перевірки результатів і оцінки похибок.

2. Мета навчальної дисципліни:

• Формування знань та вмінь у сфері сучасних методів комп'ютерної обробки, аналізу та інтерпретації наукових даних, отриманих експериментальними та теоретичними методами у різних галузях науки і техніки.

• Освоєння програмних інструментів, математичних підходів та алгоритмів, необхідних для обробки, візуалізації та статистичного аналізу даних.

• Формування навичок практичного використання сучасних засобів обчислювальної аналітики для вирішення наукових та прикладних задач.

Завдання навчальної дисципліни:

Освоїти методи збору, структуризації та попередньої обробки даних; розвинути вміння застосовувати сучасні програмні комплекси для аналізу результатів; сформувати компетенції у використанні статистичних і чисельних методів, машинного навчання та візуалізації інформації для отримання обґрунтованих наукових висновків.

Предмет дисципліни:

Методи та інструменти сучасної комп'ютерної обробки наукових даних. Основні поняття та алгоритми аналізу, статистичної обробки та моделювання. Використання спеціалізованих програмних засобів (Origin, Excel) для обробки експериментальних та теоретичних даних. Методи фільтрації шуму, апроксимації, регресійного аналізу, обробки зображень та спектрів. Засоби візуалізації даних і підготовки наукових графіків.

Процес вивчення дисципліни спрямований на формування елементів наступних **компетентностей**:

а) Загальні компетенції:

ЗК 8

б) спеціальні компетенції:

СК 9, СК 10.

Програмні результати навчання (ПРН): ПРН 17.

Для успішного засвоєння даної дисципліни аспірант повинен мати базові знання з вищої математики, інформатики та статистики. Для вивчення дисципліни бажано володіти початковими навичками роботи з комп'ютерними

програмами обробки даних і мати досвід виконання лабораторних чи розрахункових робіт.

Очікувані результати навчання:

Після засвоєння дисципліни аспірант повинен:

Знати: основні принципи статистичного аналізу, методи виявлення закономірностей у наукових даних, інструменти візуалізації та методи перевірки гіпотез;

Вміти: обробляти дані різного формату, застосовувати методи математичного моделювання, аналізу часових рядів, обробки спектральної та графічної інформації;

Володіти: сучасними інформаційними ресурсами та базами даних (Scopus, Web of Science, SpringerLink тощо) для пошуку, систематизації та аналізу наукової інформації.

Міждисциплінарні зв'язки:

Дисципліна «Комп'ютерна обробка та аналіз наукових даних» належить до циклу дисциплін професійної підготовки та інтегрує знання з математики, інформатики, фізики, хімії та інженерних наук. Вона є теоретичною та практичною базою для виконання дослідницьких робіт, розробки прикладних рішень, а також підготовки якісних наукових результатів.

3. Зміст навчальної дисципліни

Змістовий модуль

Тема 1. Основні завдання аналізу даних та інструменти Excel для їх реалізації. Способи введення та отримання даних у Excel: ручне введення, копіювання, імпорт. Використання умовного форматування та діаграм для візуалізації інформації.

Тема 2. Обчислювальні можливості Excel: вбудовані функції та принципи організації розрахунків. Створення моделей даних та інструменти прогнозування.

Тема 3. Ознайомлення з Origin: призначення, робоче середовище та структура проєкту. Імпорт даних, налаштування фільтрів імпорту. Методи побудови графіків, у тому числі з використанням даних із кількох таблиць.

Тема 4. Створення тривимірних і контурних графіків. Підготовка матричних даних. Лінійна та нелінійна апроксимація результатів. Оформлення графічних матеріалів для публікацій та презентацій.

4. Теми лекційних занять

№, з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Основні завдання аналізу даних та інструменти Excel для їх реалізації. Способи введення та отримання даних у Excel: ручне введення, копіювання, імпорт. Використання умовного форматування та діаграм для візуалізації інформації.	2
2	Обчислювальні можливості Excel: вбудовані функції та принципи організації розрахунків. Створення моделей даних та інструменти прогнозування.	2
3	Ознайомлення з Origin: призначення, робоче середовище та структура проєкту. Імпорт даних, налаштування фільтрів імпорту. Методи побудови графіків, у тому числі з використанням даних із кількох таблиць.	2
4	Створення тривимірних і контурних графіків. Підготовка матричних даних. Лінійна та нелінійна апроксимація результатів. Оформлення графічних матеріалів для публікацій та презентацій.	2

5. Теми семінарських занять

Семінарські заняття не передбачені.

6. Теми практичних занять

№, з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Введення та підготовка даних в Excel: ручне введення, копіювання, імпорт з різних джерел.	1
2	Візуалізація даних у Excel: використання умовного форматування та побудова різних типів діаграм.	1
3	Розрахунки та аналіз у Excel: застосування вбудованих функцій, формул і засобів прогнозування.	1
4	Створення та налаштування моделей даних у Excel.	1

5	Основи роботи в Origin: огляд інтерфейсу, створення та організація проєктів.	1
6	Імпорт даних та фільтрація в Origin.	1
7	Побудова графіків у Origin з використанням даних з кількох таблиць.	1
8	Створення тривимірних та контурних графіків у Origin.	1
9	Лінійна та нелінійна апроксимація даних.	1
10	Підготовка графічних матеріалів для публікацій і презентацій.	1

7. Теми лабораторних занять

Лабораторні заняття не передбачені.

8. Самостійна робота

№, з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Пошук та підготовка наукових даних з відкритих та комерційних баз даних (Scopus, Web of Science, CCDC).	2
2	Використання Power Query для автоматизації імпорту та обробки даних в Excel.	2
3	Розширене використання умовного форматування для аналізу великих масивів даних.	2
4	Застосування математичних і статистичних функцій Excel у наукових розрахунках.	2
5	Створення та оптимізація моделей даних у Excel для прогнозування наукових результатів.	2
6	Розробка динамічних діаграм та панелей моніторингу (dashboards) у Excel.	2
7	Використання макросів і VBA для автоматизації наукових обчислень.	2
8	Підготовка та імпорт експериментальних даних в Origin з різних форматів.	2
9	Налаштування та застосування фільтрів імпорту даних в Origin для попередньої обробки.	2
10	Створення графіків з кількома наборами даних і накладення різних типів графічних відображень.	2
11	Аналіз та візуалізація багатовимірних даних у Origin.	2
12	Побудова 3D поверхонь, контурних графіків і теплових карт у Origin.	2
13	Проведення лінійної та нелінійної апроксимації з оцінкою точності моделі.	2
14	Використання статистичних інструментів Origin для аналізу експериментальних даних.	2

15	Опрацювання результатів обчислень та підготовка їх до публікації.	2
16	Оптимізація графічних матеріалів під вимоги наукових журналів.	2
17	Розробка єдиного стилю графіків і діаграм для наукової роботи та презентацій.	2
18	Використання Origin для підготовки ілюстрацій у форматах високої роздільної здатності.	2
19	Порівняльний аналіз можливостей Excel і Origin у наукових дослідженнях.	2

9. Форми контролю і методи оцінювання
(у т.ч. критерії оцінювання результатів навчання)

Поточний контроль здійснюється під час проведення практичних занять і спрямований на перевірку рівня засвоєння аспірантами навчального матеріалу. Основні **форми поточного контролю**:

- **Усне опитування**: індивідуальні відповіді та співбесіди.
- **Ситуаційні задачі**: розв’язання типових прикладних завдань за темою заняття.
- **Оцінка практичних навичок**: перевірка правильності та повноти виконання експериментальних або аналітичних дій.

Критерії оцінювання:

- **«Відмінно»** – правильно виконано не менше 90% завдань.
- **«Добре»** – правильно виконано не менше 80% завдань.
- **«Задовільно»** – правильно виконано не менше 60% завдань.
- **«Незадовільно»** – виконано менше 60% завдань.

Наприкінці кожного заняття викладач фіксує суму набраних балів і виставляє традиційну оцінку у журнал успішності.

Оцінювання самостійної роботи здійснюється на практичних заняттях та враховується як складова підсумкової оцінки.

Підсумковий контроль проводиться після завершення вивчення дисципліни у формі **заліку**.

Оцінювання здійснюється за **національною шкалою** та шкалою **ECTS**.

10. Питання для підсумкового контролю

1. Теоретичні основи

1. Що таке обробка та аналіз наукових даних?
2. Які основні етапи підготовки наукових даних до аналізу?
3. Чим відрізняється структурована та неструктурована інформація?
4. Що таке модель даних і які її основні типи?
5. Що означає принцип відтворюваності наукових розрахунків?
6. Які основні джерела похибок при введенні даних вручну?
7. У чому полягає відмінність між інтерполяцією та екстраполяцією даних?
8. Що таке апроксимація та які її основні види?
9. Чим відрізняється кореляційний аналіз від регресійного?
10. Поясніть поняття нормалізації та стандартизації даних.

2. Microsoft Excel

11. Які способи введення даних в Excel ви знаєте?
12. Що таке умовне форматування та для чого воно використовується?
13. Як у Excel побудувати діаграму з двома осями Y?
14. Які типи діаграм найкраще підходять для відображення динаміки зміни даних?
15. Що таке функції VLOOKUP та HLOOKUP і як вони працюють?
16. Які інструменти Excel можна використати для прогнозування?
17. Як у Excel обмежити введення некоректних даних у комірку?
18. Що таке «Таблиця даних» у контексті аналізу сценаріїв?
19. Як обчислити середнє значення, якщо частина комірок порожня?
20. Як у Excel застосувати фільтри до великої таблиці даних?

3. OriginPro

21. Що таке проєкт Origin і які його основні компоненти?
22. Як імпортувати дані з текстового файлу в Origin?
23. Чим відрізняється робоча книга від матриці в Origin?
24. Як у Origin побудувати графік з кількох таблиць одночасно?
25. Що таке багатошаровий графік і як його створити?
26. Як змінити стиль осей та шрифт підписів у графіку Origin?

27. Які інструменти Origin дозволяють будувати 3D графіки?
28. Як виконати лінійну регресію в Origin?
29. Що таке нелінійна апроксимація і як її налаштувати в Origin?
30. Як експортувати графік з Origin у формат для публікації?

4. Статистичний та математичний аналіз

31. Що таке середньоквадратичне відхилення і як його обчислити?
32. Як визначити коефіцієнт кореляції Пірсона?
33. У чому відмінність між параметричними та непараметричними методами аналізу?
34. Що таке дисперсійний аналіз і для чого він використовується?
35. Як визначити наявність викидів у наборі даних?
36. Що таке гістограма і що вона показує?
37. Як обчислити довірчий інтервал середнього значення?
38. Поясніть різницю між медіаною та середнім арифметичним.
39. Що таке p-значення у статистичному аналізі?
40. Як перевірити нормальність розподілу даних?

5. Практичне застосування

41. Які кроки необхідно виконати для підготовки графіка до публікації?
42. Як оптимально вибрати тип графіка залежно від виду даних?
43. Які параметри потрібно вказати при побудові 3D поверхні?
44. Як налаштувати кольорову карту (Color Map) в Origin?
45. Які особливості імпорту великих наборів даних у Origin?
46. Як поєднати результати кількох експериментів в одній візуалізації?
47. Які типові помилки виникають при побудові графіків і як їх уникнути?
48. Як використовувати Excel для попередньої обробки даних перед імпортом в Origin?
49. Чим відрізняється аналіз даних у реальному часі від аналізу історичних даних?
50. Як інтегрувати результати обробки даних у наукову статтю або презентацію?

11. Розподіл балів

Форма для заліку

Шкала оцінювання: національна та ECTS

Сума балів за всі види навчальної діяльності	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою	
		для іспиту	для заліку
90 – 100	A	відмінно	зараховано
82 – 89	B	добре	
74 – 81	C		
64 – 73	D	задовільно	
60 – 63	E		
35 – 59	Fx	незадовільно з можливістю повторного складання	не зараховано з можливістю повторного складання
0 – 34	F	незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни	не зараховано з обов'язковим повторним вивченням дисципліни

12. Рекомендована література

Основна

1. McFedries, P. (2019). *Microsoft Excel 2019 formulas and functions*. Microsoft Press.
2. https://support.microsoft.com/uk-ua/excel
3. https://www.excel-easy.com/
4. https://www.originlab.com/doc/en/Tutorials