

**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ СОРБЦІЇ ТА ПРОБЛЕМ ЕНДОЕКОЛОГІЇ**

ЗАТВЕРДЖЕНО
Вченою радою
Інституту сорбції та проблем
ендоекології НАН України
протокол № 1
від «21» січня 2022 року

Голова Вченої ради
Інституту сорбції та проблем
ендоекології НАН України
дл.-кор. НАН України



В.В. Брей

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Обробка та візуалізація експериментальних даних у програмі Origin
(назва навчальної дисципліни)

галузі знань **10 «Природничі науки»**

спеціальності **102 «Хімія»**

спеціалізації **«Фізична хімія»**

Інститут сорбції та проблем ендоекології НАН України
(назва інституту, факультету, відділення)

Київ - 2022 рік

Робоча програма «**Обробка та візуалізація експериментальних даних у програмі Origin**»

(назва навчальної дисципліни)

для аспірантів спеціальності **102 «Хімія», спеціалізація – фізична хімія**

«21» січня 2022 року, 16 стор.

Курс розроблено на підставі освітньо-наукової програми, затвердженої на Вченій раді Інституту сорбції та проблем ендоекології НАН України від «21» січня 2022р., протокол № 1.

Розробник: к.х.н., доцент Халявка Тетяна Олександрівна

1. ОПИС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни	
		денна форма навчання	
Кількість кредитів - 3	<p>Галузь знань <u>10 «Природничі науки»</u> (шифр і назва)</p> <p>Спеціальність <u>102 «Хімія»</u> (шифр і назва)</p> <p>Спеціалізація <u>«Фізична хімія»</u></p>	Нормативна	
Модулів - 3		Рік підготовки:	
Змістових модулів - 3		2-й	
		Семестр	
Загальна кількість годин - 90		3-й	
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних - 40, у т.ч. самостійної роботи аспіранта – 50 год.	Освітньо-кваліфікаційних рівень: доктор філософії	Лекції	
		10 год.	
		Практичні, семінарські	
		30 год.	
		Самостійна робота	
		50 год.	
		Вид контролю: іспит	

2. МЕТА ТА ЗАВДАННЯ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Метою вивчення дисципліни «Обробка та візуалізація експериментальних даних у програмі Origin» є формування здатностей проводити візуалізацію, обробку та графічний аналіз експериментальних даних.

Основні завдання дисципліни:

- формування знань стосовно основних функцій програми Origin, зокрема вміння імпортувати та експортувати дані до програми, перетворювати значення у таблиці даних;
- надати знання про побудову 2D та 3D графіків;
- навчити оформлювати графіки, аналізувати та апроксимувати графічні дані;
- виробити навички використання програми Origin для обробки результатів електрофізичних вимірювань, спектрів рентгенівської фотоелектронної спектроскопії, інфрачервоної спектроскопії, Раманівського розсіяння, люмінесцентної спектроскопії, спектроскопії електронного парамагнітного резонансу, ядерного магнітного резонансу тощо.

У результаті навчання по даній програмі аспіранти:

- оволодіють навичками імпорту даних у програму, обробкою та аналізом даних, побудовою графіків та підготовкою їх до публікації;
- набудуть вміння автоматизації роботи - створення шаблонів, взаємодія з Microsoft Excel;
- отримають знання з додаткових можливостей програми: складні методи аналізу та елементи програмування.

3. ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Змістовий модуль 1. Візуалізація даних та знайомство з програмним середовищем Origin.

Тема 1. Візуалізація та графічне відображення даних.

Візуалізація та графічне відображення даних. Мета та властивості візуалізації даних. Різновиди візуалізації даних. Інфографіка. Презентація та аналіз даних. Правила побудови графіків та діаграм. Повідомлення результатів наукового дослідження за допомогою графіків та їх структура. Графічне відображення даних у науковій літературі.

Тема 2. Основні властивості програмного середовища Origin.

Проект та робоча область програмного середовища OriginPro. Операції з вікнами у проекті. Операції із значеннями у таблиці даних.

Тема 3. Оформлення графіків.

Основні правила графічної презентації даних. Приклади невдалої/вдалої візуалізації даних. Редагування властивостей та стилю графіків у Origin.

Змістовий модуль 2. Побудова основних типів графіків, аналіз та обробка графічних даних у Origin.

Тема 1. Побудова 2D графіків, експорт та збереження даних у Origin.

Декартова та полярна системи координат. Основні типи 2D графіків. Вибір відповідного типу графіку для візуалізації даних. Сплайн-інтерполяція. Основні графіки функцій. Графіки з урахуванням похибок. Побудова графіків по точкам, сплайн-інтерполяції по точкам, графіка із урахуванням похибок, графіків функцій, 2D графіків в полярній системі координат у OriginPro. Експорт даних з таблиць даних та графіків у OriginPro. Збереження даних у OriginPro.

Тема 2. Побудова 3D графіків.

Тривимірний простір. 3D графіки. Приклади та види 3D графіків. Графіки потрійних діаграм (тернарні графіки). Побудова 3D XYU та 3D XYZ графіків, графіків тривимірної поверхні, тривимірних контурних графіків та потрійних діаграм у OriginPro. Керування 3D зображенням у OriginPro.

Тема 3. Апроксимація графічних даних.

Апроксимація експериментальних даних. Лінійна, параболічна, степенева, експоненціальна апроксимація та їх приклади. Лінійна, параболічна та нелінійна апроксимація точок на графіку у OriginPro.

Тема 4. Аналіз та обробка графічних даних. Аналіз піків кривих.

Попередня обробка даних. Корекція фонові лінії та її приклади. Грубі похибки експериментів та їх приклади. Корекція грубих похибок експериментів та її приклади. Згладжування кривих. Аналіз піків кривих. Панель інструментів для аналізу графічних даних в OriginPro. Видалення точок на графіку, згладжування кривої на графіку, аналіз піків кривої на графіку, віднімання фонові лінії, знаходження піків на кривій, апроксимація піків на кривій в OriginPro.

Змістовий модуль 3. Основи обробки та аналізу експериментальних даних у Origin.

Тема 1. Основи аналізу результатів електрофізичних вимірювань.

Аналіз результатів вимірювань часової та температурної залежностей різних величин та побудова залежностей у OriginPro.

Тема 2. Спектроскопічні методи досліджень та основи аналізу спектрів РФЕС.

Спектроскопічні методи досліджень. Основи аналізу спектрів рентгенівської фотоелектронної спектроскопії. Основи аналізу спектрів РФЕС у OriginPro.

Тема 3. Основи аналізу спектрів інфрачервоної, люмінесцентної, ЯМР, ЕПР спектроскопії, Раманівського розсіювання.

Основи аналізу спектрів інфрачервоної спектроскопії. Основи аналізу спектрів ІЧ спектроскопії в OriginPro. Основи аналізу спектрів Раманівського розсіювання. Аналіз спектрів Раманівського розсіювання в OriginPro. Основи аналізу спектрів люмінесцентної спектроскопії. Аналіз спектрів люмінесцентної спектроскопії в OriginPro. Основи аналізу спектрів ядерного магнітного резонансу. Аналіз спектрів ЯМР в OriginPro. Основи аналізу спектрів електронного парамагнітного резонансу. Аналіз спектрів ЕПР в OriginPro.

4. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Назва тем	Кількість годин					Індивідуальна робота
	Всього	Аудиторна робота				
		Всього аудито рних	Лекції	Семіна рських		
Змістовий модуль 1. Візуалізація даних та знайомство з програмним середовищем Origin.						
Тема 1. Візуалізація та графічне відображення даних.			1	1	2	
Тема 2. Основні властивості програмного середовища Origin.			1	1	4	
Тема 3. Оформлення графіків.			1	2	4	
Разом за змістовим модулем 1.			3	4	10	
Змістовий модуль 2. Побудова основних типів графіків, аналіз та обробка графічних даних у Origin.						
Тема 1. Побудова 2D графіків, експорт та збереження даних у Origin.			1	3	5	
Тема 2. Побудова 3D графіків.			1	3	5	
Тема 3. Апроксимація графічних даних.			1	3	5	
Тема 4. Аналіз та обробка графічних даних. Аналіз піків кривих.			1	5	5	
Разом за змістовим модулем 2.			4	14	20	
Змістовий модуль 3. Основи обробки та аналізу експериментальних даних у Origin.						
Тема 1. Основи аналізу результатів електрофізичних вимірювань.			1	1	6	
Тема 2. Спектроскопічні методи досліджень та основи аналізу спектрів РФЕС.			1	1	6	
Тема 3. Основи аналізу спектрів інфрачервоної, люмінесцентної, ЯМР, ЕПР спектроскопії, Раманівського розсіювання.			1	10	8	
Разом за змістовим модулем 3.			3	12	20	
Всього:	90	40	10	30	50	

5. ТЕМИ СЕМІНАРСЬКИХ ЗАНЯТЬ

№	Назва теми	Кількість годин
Змістовий модуль 1. Візуалізація даних та знайомство з програмним середовищем Origin.		
1.	Основні властивості програмного середовища Origin.	2
2.	Оформлення графіків.	2
Змістовий модуль 2. Побудова основних типів графіків, аналіз та обробка графічних даних у Origin.		
3.	Обробка графічних даних. Видалення точок на графіку, згладжування кривої на графіку, аналіз піків кривої на графіку, віднімання фонові лінії, знаходження піків на кривій, апроксимація піків на кривій в OriginPro.	2
4.	Побудова 2D графіків. Редагування властивостей та стилю графіків у OriginPro. Побудова графіків по точкам, сплайн-інтерполяції по точкам, графіка із урахуванням похибок, графіків функцій, 2D графіків в полярній системі координат у OriginPro. Експорт даних з таблиць даних та графіків у OriginPro. Збереження даних у OriginPro.	2
5.	Побудова 3D графіків. Побудова 3D XYU та 3D XYZ графіків, графіків тривимірної поверхні, тривимірних контурних графіків та потрійних діаграм у OriginPro. Керування 3D зображенням у OriginPro. Лінійна, параболічна та нелінійна апроксимація точок на графіку у OriginPro.	2
6.	Диференціювання, інтегрування та Фур'є перетворення графічних даних.	2
7.	Апроксимація графічних даних.	2
8.	Аналіз графічних даних.	2
9.	Аналіз піків кривих.	2
Змістовий модуль 3. Основи обробки та аналізу експериментальних даних у Origin.		
10	Основи аналізу спектрів РФЕС.	2
11.	Основи аналізу спектрів інфрачервоної спектроскопії.	2
12.	Основи аналізу спектрів Раманівського розсіювання.	2
13.	Основи аналізу спектрів люмінесцентної спектроскопії.	2
14.	Основи аналізу спектрів ЯМР спектроскопії.	2
15.	Основи аналізу спектрів ЕПР спектроскопії.	2
Всього годин:		30

6. САМОСТІЙНА РОБОТА

№	Назва теми	Кількість годин
Змістовий модуль 1. Візуалізація даних та знайомство з програмним середовищем Origin.		
1.	Знайомство з програмою. Загальна характеристика. Робоче середовище. Проект Origin.	1
2.	Імпорт даних та фільтри імпорту.	4
Змістовий модуль 2. Побудова основних типів графіків, аналіз та обробка графічних даних у Origin.		
3.	Способи побудови графіків. Графіки з даними з багатьох Таблиць.	5
4.	Робота з Excel в Origin.	5
5.	Маніпулювання даними: сортування, фільтр, маскування.	5
6.	Побудова багатошарових графіків.	5
Змістовий модуль 3. Основи обробки та аналізу експериментальних даних у Origin.		
7.	Побудова тривимірних графіків. Підготовка даних у вигляді матриць.	5
8.	Побудова контурних графіків. Підготовка даних у вигляді матриць.	5
9.	Лінійна та нелінійна апроксимація.	5
10.	Підготовка до публікацій.	5
11.	Створення презентацій.	5
Всього годин:		50

7. МЕТОДИ НАВЧАННЯ

- Словесні методи: пояснення, інструктаж, розповідь, лекція, бесіда (репродуктивна, евристична, катехізисна), самостійна робота з підручником, обговорення проблем, навчальні дискусії, мозковий штурм, кейс-методи, тестування, перехресна перевірка знань;
- Наочні: метод ілюстрацій (схеми, таблиці, графіки, тощо), метод демонстрацій (приладів, дослідів, технічних установок, відеофільмів);
- Метод інструктування;
- Репродуктивні методи: пояснювально-ілюстративний, відтворювальний;
- Проблемно-пошукові методи навчання (проблемний виклад, евристичний, дослідний).

8. РОЗПОДІЛ БАЛІВ, ЯКІ ОТРИМУЮТЬ АСПІРАНТИ

Поточне тестування та самостійна робота									Підсумковий тест (іспит)	Сума	
Змістовий модуль 1			Змістовий модуль 2				Змістовий модуль 3			100	100
T1	T2	T3	T1	T2	T3	T4	T1	T2	T3		
10	10	10	10	10	10	10	10	10	10		

ШКАЛА ОЦІНЮВАННЯ: НАЦІОНАЛЬНА ТА ECTS

Сума балів за всі види навчальної діяльності	Оцінки ECTS	Оцінка за національною шкалою	
		для іспиту	для заліку
90-100	A	відмінно	зараховано
80-89	B	добре	
70-79	C		
65-69	D	задовільно	
60-64	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

9. МЕТОДИЧНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ

Навчально-методичний комплекс вивчення дисципліни вміщує робочу програму навчальної дисципліни, програму навчальної дисципліни, конспект лекцій з курсу, екзаменаційні білети, презентації, створені засобами Power Point, експериментальні дані для аналізу.

Для методичного забезпечення лекційного процесу використовуються дошки із записом крейдою та фломастером, ноутбук, мультимедійний проектор, лазерна вказівка.

ЕКЗАМЕНАЦІЙНІ БІЛЕТИ

ЕКЗАМЕНАЦІЙНИЙ БІЛЕТ № 1

1. Мета, переваги, властивості візуалізації даних.
2. Лінійна діаграма, діаграма розсіювання, графік щільності розподілу.
3. Параметри піків у сигналі/спектрі.
4. Змінити довге та коротке ім'я таблиці даних. Дублювати вікно таблиці даних. Ввести значення до таблиці даних у десятичному форматі та в форматі з плаваючою комою. Додати додатковий стовпчик до таблиці даних. Створити нову таблицю даних та імпортувати до неї дані. Створити таблицю даних, ввести туди довільні дані для стовпчика X, а для значень у стовпчику Y вказати будь-яку лінійну або квадратичну математичну функцію та тригонометричну функцію.

ЕКЗАМЕНАЦІЙНИЙ БІЛЕТ № 2

1. Різновиди візуалізації даних.
2. 2D графіки.
3. Структура наукового графіка.
4. Побудувати графік прямої по точкам, графік сплайн-інтерполяції по точкам та графік по точкам. Додати на графік довільну похибку у значень Y.

ЕКЗАМЕНАЦІЙНИЙ БІЛЕТ № 3

1. Правила побудови графіків та діаграм.
2. Графічний абстракт наукової статті.
3. Параметри піків у сигналі/спектрі.
4. Створити таблицю даних зі стовпчиками X, Y, Y, Y з довільними значеннями, побудувати відповідні дані на одному графіку. Змінити масштаб осей графіка, додати відображення вісі X зверху на графіку, додати на графік лінії сітки для основних значень вісі X. Додати розрив на X вісі. Поділити значення вісі X на сталу величину. Змінити колір та товщину лінії на графіку, розмір точок, тип символів, тип лінії. Задати кількість точок, які будуть пропущені на графіку. Додати довільний текст на графік із використанням верхнього і нижнього індексів та символів.

ЕКЗАМЕНАЦІЙНИЙ БІЛЕТ № 4

1. Основні правила графічної презентації даних.
2. Ознаки невдалого графічного зображення даних.
3. 3D графік.
4. Створити таблицю даних зі стовпчиками X, Y, Y, ввести до них довільні значення і побудувати графіки типу 3D waterfall, 3D walls, 3D ribbons, 3D bars. Створити таблицю даних зі стовпчиками X, Y, Z, ввести до них довільні значення побудувати графіки типу 3D scatter, 3D trajectory, графік тривимірної поверхні, тривимірний контурний графік (ізолінії).

ЕКЗАМЕНАЦІЙНИЙ БІЛЕТ № 5

1. Гістограма та секторна діаграма.
2. Критерії вибору типу графіка для візуалізації даних.
3. Графік потрійних діаграм.
4. Створити таблицю даних зі стовпчиками X, Y, ввести до них довільні значення. Провести процедуру диференціювання кривої першого порядку.

10. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Савченко, Д. В. Основи обробки та візуалізації фізичних даних в програмному середовищі OriginPro 8. Комп'ютерний практикум [Електронний ресурс] : навч. посіб. для здобувачів ступеня бакалавра за освітньою програмою «Комп'ютерне моделювання фізичних процесів» за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія / Д. В. Савченко. – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2021. – 111 с.
2. Інфографіка: навчальний посібник / упорядник Гудіма О. В. – Чернівці, Чернівецький національний університет, 2017. – 107 с .
3. Горват А.А., Молнар О.О., Мінкович В.В. Обробка, візуалізація та аналіз експериментальних даних з використанням пакету Origin: Навчальний посібник. – Ужгород: Видавництво УжНУ “Говерла”, 2020. – 64 с.
4. Ашанін В.С., Пасько В.В. Обробка та візуалізація даних наукових досліджень. Навчальний посібник. Частина 1. Харків : ХДАФК, 2020, 132 с.
5. Chen C. Handbook of Data Visualization / C. Chen, W. Härdle, A. Unwin. – Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2008. – 936 с.
6. Резонансні явища : підручник / М.Ф. Буланий, О.В. Коваленко, С.О. Омельченко, І.В. Штамбур, О.Я. Якунін; Дніпропетр. нац. ун-т. - Д. : АРТ-Прес, 2006. - 422 с.
7. Самойчук К.О. Радіометричні і радіоспектроскопічні методи аналізу електронний навчальний посібник) [Електронний ресурс] / К. О. Самойчук // Таврійський державний агротехнологічний університет імені Дмитра Моторного – Режим доступу до ресурсу: http://elib.tsatu.edu.ua/dep/mtf/ophv_22/index.html
8. Програмне забезпечення в обчислювальній математиці та моделюванні [навчальний посібник] / І.І. Ясковець, Т.Ю. Осипова, Д.Ю. Касаткін, Я.А. Савицька, В.В. Смолій, Б.С.Гусєв, А.І. Блозва, Ю.В. Матус // - К.: НУБіП України, 2017.- 296 с.
9. Кубай Д. Відкритий посібник з відкритих даних [Електронний ресурс] / Д. Кубай, А. Г о р б а л ь . – 2016. – Режим доступу до ресурсу: <https://socialdata.org.ua/manual/>.
10. Посібник по роботі з даними [Електронний ресурс]. – 2015. – Режим доступу до ресурсу: <https://datajournalism.agency/media/data2015.pdf>.
11. Origin 8 User Guide [Електронний ресурс]. – 2007. – Режим доступу до ресурсу: http://www.phys.nthu.edu.tw/~cc/download/Origin_8_User_Guide.pdf.
12. Origin 8.1 Getting Started Booklet [Електронний ресурс]. – 2009. – Режим доступу до р е с у р с у : https://www.originlab.com/pdfs/origin_8.1_getting_started_booklet.pdf.
13. Larkin P. J. Infrared and raman spectroscopy: principles and spectral interpretation / P. J. Larkin. – Waltham, USA: Elsevier, 2011. – 228 с. – (1).
14. Фізика процесів у напівпровідниках та елементах електроніки: курс лекцій: навчальний посібник / Д. М. Фреїк, В. М. Чобанюк, З. Ю. Готра та ін. – Івано-Франківськ: Видавництво П р и к а р п а т с ь к о г о національного університету імені Василя Стефаника, 2010. – 263 с.

15. Локальні методи досліджень [Електронний ресурс]: підручник для студентів спеціальності 105 «Прикладна фізика та наноматеріали» / Загородній В.В. – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2019, 323 с.
16. Нелюбов В. О. Куруца О. С. Презентація формул і діаграм: електронний навчальний посібник / Ужгород. ДВНЗ «УжНУ», 2019. 80 слайдів.
17. Цифрова обробка сигналів. Методичні вказівки до виконання лабораторних робіт з дисципліни "Цифрова обробка сигналів та передача даних" для студентів напряму підготовки 6.050102 "Комп'ютерна інженерія" / Укл.: Зайцев С.В., Риндич Є.В., Нікітенко Є.В. – Чернігів: ЧДТУ, 2013. – 80 с.