

Міністерство освіти і науки України
Національний університет водного господарства та
природокористування

Навчально-науковий інститут будівництва, архітектури та дизайну
Кафедра водопостачання, водовідведення та бурової справи

03-06-181М

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

до практичних занять та самостійної роботи
з навчальної дисципліни «Планування і виконання
експериментальних робіт, сучасні методи аналізу даних та
спеціалізоване програмне забезпечення»
для здобувачів вищої освіти другого (магістерського) рівня
за освітньо-професійною програмою «Біотехнології»
спеціальності G21 «Біотехнології та біоінженерія»
денної форми навчання

Рекомендовано
науково-методичною радою
з якості ННІБАД
Протокол № 2 від 21.10.2025 р.

Рівне – 2025

Методичні вказівки до практичних занять та самостійної роботи з навчальної дисципліни «Планування і виконання експериментальних робіт, сучасні методи аналізу даних та спеціалізоване програмне забезпечення» для здобувачів вищої освіти другого (магістерського) рівня за освітньо-професійною програмою «Біотехнології» спеціальності G21 «Біотехнології та біоінженерія» денної форми навчання [Електронне видання] / Грицина О. О. – Рівне : НУВГП, 2025. – 71 с.

Укладач: Грицина О. О., к.т.н., доцент кафедри водопостачання, водовідведення та бурової справи.

Відповідальний за випуск: Мартинов С. Ю., д.т.н., професор, завідувач кафедри водопостачання, водовідведення та бурової справи.

Керівник групи забезпечення
спеціальності

G21 «Біотехнології та біоінженерія»

Грицина О. О.

© О. О. Грицина, 2025

© НУВГП, 2025

ЗМІСТ

Вступ.....	4
Практичне заняття №1. Стратегічне планування експериментів в умовах невизначеності.....	7
Практичне заняття №2. Дослідницька методологія та регуляторні рамки у біотехнології.....	12
Практичне заняття №3. Збір, управління та валідація даних із застосуванням систем LIMS і ELN.....	18
Практичне заняття №4. Статистичний аналіз і ухвалення рішень: від описової до інференційної статистики.....	27
Практичне заняття №5. Багатовимірний аналіз даних з урахуванням економічних, екологічних і соціальних показників..	34
Практичне заняття №6. Техніко-економічна оцінка та аналіз життєвого циклу біотехнологічних процесів.....	41
Практичне заняття №7. Математичне моделювання, оптимізація та верифікація біопроцесів.....	49
Практичне заняття №8. Імітація біореакторів і мультифізичні підходи для масштабування технологій.....	56
Практичне заняття №9. Управління проектами, аналіз ризиків і прийняття рішень у дослідницьких та виробничих експериментах.....	60
Практичне заняття №10. Наукові звіти, презентації та академічна доброчесність.....	65
Рекомендована література.....	71

Вступ

Ці методичні рекомендації об'єднують десять взаємопов'язаних практичних занять у цілісну траєкторію для магістрів біотехнології та біоінженерії. Вони системно поєднують стратегічне проєктування експериментів, управління даними, статистичний аналіз, математичне моделювання, техніко-економічну і екологічну оцінку, управління проєктами та академічне звітування. Кожен воркшоп завершується практичними артефактами, що можна відтворити та перевірити: протоколами, наборами даних, моделями, звітами і презентаціями - із фіксацією внеску і дотриманням академічної доброчесності.

Призначення і місце в програмі.

Рекомендації підтримують навчальну дисципліну «Планування і виконання експериментальних робіт, сучасні методи аналізу даних та спеціалізоване програмне забезпечення» і спрямовані на формування здатності розв'язувати комплексні науково-технічні завдання в умовах невизначеності. Фокус - не на окремих інструментах, а на мисленні, доказовості, відтворюваності та прийнятті рішень з урахуванням економічних, екологічних і соціальних наслідків. Курс інтегрує попередні знання бакалаврату (зокрема, загальна біотехнологія, вища математика, хімія, мікробіологія, біофізика, біологія клітини, генетика) і піднімає їх до рівня дослідницької практики.

Підхід і принципи реалізації.

- **Дизайн під невизначеність:** постановка гіпотез, факторні/фракційні плани, рандомізація і блокування; експерименти як інструмент керованого навчання системи.
- **Відтворюваність і прозорість:** SOP, журнал змін, контроль якості, відкрита звітність про методи, межі валідності та невизначеність вимірювань.
- **Дані як актив:** цілісний цикл «збір → управління → валідація → аналіз → рішення», інтеграція LIMS і ELN без редукції навчання до ПЗ.
- **Статистика для рішень:** від описової до інференційної і багатовимірної аналітики з наголосом на припущення, розмір ефекту та інтерпретацію.
- **Моделювання і масштабування:** ЗДР (ODE), обчислювальна гідродинаміка (CFD), імітаційні та

мультифізичні підходи як засоби планування і перевірки гіпотез.

- **Стійкість і цінність:** техніко-економічна оцінка, аналіз життєвого циклу (LCA) і соціальні показники для обґрунтування стратегічних рішень.
- **Командна робота і етика:** проектний менеджмент, ризик-менеджмент, peer review (рецензування), формат IMRaD, академічна доброчесність.

Структура практичних занять:

- **Стратегічне проєктування експериментів в умовах невизначеності:** гіпотези, факторні/фракційні дизайни, рандомізація, блокування, контрольні фактори.
- **Дослідницька методологія та регуляторні рамки у біотехнології:** SOP, валідація методик, етичні й регуляторні вимоги.
- **Збір, управління та валідація даних із застосуванням LIMS і ELN:** моделі даних, контроль якості, аудиторські сліди.
- **Статистичний аналіз і ухвалення рішень:** описова, інференційна статистика, ANOVA, регресія, перевірка припущень, розмір ефекту.
- **Багатовимірний аналіз даних:** PCA, кластеризація, інтеграція економічних, екологічних і соціальних показників.
- **Техніко-економічна оцінка та LCA:** витрати–вигоди, ексергетика/енергетика за потреби, життєвий цикл і соціальні наслідки.
- **Математичне моделювання, оптимізація та верифікація:** ЗДР (ODE), ідентифікація параметрів, оптимізація.
- **Імітація біореакторів і мультифізичні підходи:** CFD, сполучення переносу маси/тепла/імпульсу, критерії масштабування.
- **Управління проєктами, аналіз ризиків і прийняття рішень:** WBS, діаграми Ганта, Agile-підходи, ризик-реєстр, багатокритеріальний вибір.
- **Наукові звіти, презентації та академічна доброчесність:** IMRaD, якісні візуалізації, етичні заяви, peer review.

У кожному практичному занятті програмні продукти

використовуються як засіб, а не самоціль; пріоритет - методологія, логіка та відтворюваність.

Результати і відповідність компетентностям:

- **Стратегічне проєктування та управління невизначеністю** - ІК, К12; ПРН: ПР08, ПР17.
- **Дослідницькі протоколи, LIMS/ELN, валідація даних** - К01, К09; ПРН: ПР08.
- **Інференційні й багатовимірні методи аналізу** - К09, К12; ПРН: ПР17.
- **Техніко-економічні розрахунки та сталість (LCA)** - ІК, К01; ПРН: ПР03.
- **Моделювання, оптимізація, симуляція** - К12; ПРН: ПР04.
- **Проектний менеджмент, ризики, рішення** - ІК, К01, К12; ПРН: ПР08, ПР17.
- **Автоматизація аналізу і відтворюваність скриптами** - К09; ПРН: ПР04.
- **Академічне звітування і презентації (IMRaD, peer review)** - К01; ПРН: ПР17.

Організація, передумови і платформа.

Курс побудовано на мінікейсах, лабораторних/обчислювальних вправх, peer review і підсумкових артефактах із прозорими рубриками оцінювання. Вимоги до стартових знань охоплюють базові дисципліни бакалаврату; усі матеріали, шаблони, рубрики та інструкції розміщено на сторінці курсу в Moodle: <https://exam.nuwm.edu.ua/course/view.php?id=6616>. Для уніфікації термінів і стилю використовуються: «структура IMRaD», «аналіз життєвого циклу (LCA)», «обчислювальна гідродинаміка (CFD)», «звичайні диференціальні рівняння (ЗДР, ODE)», «лабораторна інформаційна система (LIMS)», «електронний лабораторний журнал (ELN)», «peer review (рецензування)», «техніко-економічна оцінка», «академічна доброчесність».

Практичне заняття №1. Стратегічне планування експериментів в умовах невизначеності.

Тривалість - 80 хвилин.

Компетентності: ІК, К12.

Програмні результати навчання: ПР08, ПР17.

Передумови та необхідні знання:

- базові уявлення про факторний і фракційний дизайн експерименту;
- навички роботи з табличними даними;
- знання основ статистики та поняття рандомізації.

Інструменти:

- JASP для побудови експериментального плану;
- Miro (або Trello) для візуалізації структури дослідження;
- шаблон методичного листа в PDF.

Попередня підготовка:

- Переглянути відео-огляд факторного та фракційного дизайну (5–7 хв).
- Ознайомитися з методичним матеріалом про ключові поняття (PDF).
- Встановити JASP і зареєструватися в Miro (Trello).
- Підготувати власне дослідницьке питання (2–3 речення) для подальшого проєктування.

Хід виконання.

Вступ (10 хв):

- Мотивація: приклад оптимізації біореактора за обмеженого бюджету експерименту.
- Оголошення цілей і очікуваних результатів заняття.
- Розподіл ролей у командах (3–4 особи):
 - керівник дослідження;
 - статистик;
 - координатор ресурсів.

Теоретичний блок (15 хв)

- Інтерактивний огляд понят: факторний проти фракційного планування експерименту, рандомізація, блокування.
- Демонстрація побудови (2^3)–плану експерименту в JASP:
 1. введення факторів і рівнів;
 2. налаштування рандомізації;

3. генерація експериментального плану.
- Контрольні запитання для перевірки розуміння.

Практична вправа (30 хв)

- Створити команди по 3–4 особи.
- Завдання:
 1. Обрати три критичні фактори (наприклад, температура, рН, швидкість перемішування).
 2. Побудувати повний факторний дизайн (2^3) в JASP.
 3. Згенерувати фракційний дизайн ($2^{\{3-1\}}$) і порівняти з повним.
 4. Оцінити переваги та ризики кожного підходу з ролей статистика та координатора ресурсів.

Обговорення й peer-review (15 хв)

- Презентація результатів кожною командою (3–4 хв на команду).
- Уточнювальні запитання від інших груп.
- Обговорення сильних і слабких сторін підходів.
- Викладач формулює ключові рекомендації.

Підсумки та домашнє завдання (10 хв)

- Узагальнення:
 - коли доцільно застосовувати фракційний дизайн;
 - основні принципи рандомізації й блокування.
- Домашнє завдання:
 1. Розробити фракційний експериментальний план для чотирьох факторів ($2^{\{4-1\}}$) із коротким обґрунтуванням рівнів.
 2. Завантажити план і пояснювальну записку в Moodle до початку наступного заняття.

Критерії оцінювання:

- активність у дискусії та якість аргументації;
- коректність і повнота експериментального плану;
- обґрунтованість вибору повного або фракційного дизайну;
- своєчасне та повне виконання домашнього завдання.

ЗВІТ З ПРАКТИЧНОГО ЗАНЯТТЯ №1 (ПРИКЛАД)

Тема: Стратегічне проєктування експериментів в умовах невизначеності.

1. Огляд і постановка задачі.

- **Сценарій:** оптимізація виходу біомаси в лабораторному

біореакторі за обмеженого бюджету й часу.

- **Мета:** спроектувати план, який дозволяє оцінити основні ефекти трьох факторів і прийняти рішення про масштабування.
- **Фактори й рівні:**
 - **A** - температура: 28 °C / 32 °C
 - **B** - pH: 6.8 / 7.2
 - **C** - швидкість перемішування: 200 rpm / 400 rpm
- **Відгук:** вихід біомаси (г/л) за цикл культивування.
- **Ролі в команді:** керівник дослідження; статистик; координатор ресурсів.

2. Практична частина - результати роботи команди

2.1 Повний факторний план (2^3)

- **Кодування рівнів:** низький = -1; високий = +1.
- **План без блокування (приклад):**

Run	A	B	C	Порядок запуску
1	-1	-1	-1	3
2	+1	-1	-1	6
3	-1	+1	-1	1
4	+1	+1	-1	8
5	-1	-1	+1	4
6	+1	-1	+1	2
7	-1	+1	+1	7
8	+1	+1	+1	5

- **Реальні налаштування (приклад для Run 6):** 32 °C, pH 6.8, 400 rpm.
- **Оцінка ресурсів:** 8 запусків $\times$ 6 год = 48 год чистого часу; витратні матеріали $\times$ 8.

2.2 Фракційний план (2^{3-1}) (генератор (C=AB))

- **Визначальне співвідношення:** (I=ABC) $\rightarrow$ конфундування: (A $\equiv$ BC), (B $\equiv$ AC), (C $\equiv$ AB).
- **Матриця плану (резолюція III):**

Run	A	B	C=AB	Порядок запуску
1	-1	-1	(+1)	2
2	+1	-1	(-1)	4
3	-1	+1	(-1)	1
4	+1	+1	(+1)	3

- **Реальні налаштування (приклад для Run 3):** 28 °C,

pH 7.2, 200 rpm.

- **Блокування за днями:** день 1 - Run 3, 1; день 2 - Run 4, 2 (рандомізація всередині дня).
- **Економія ресурсів:** 4 запусків $\times$ 6 год = 24 год; витратні матеріали $\times 4$.
- **Компроміс:** основні ефекти можуть бути спотворені значними взаємодіями (ризик хибної інтерпретації).

2.3 Вибір підходу в умовах обмежень.

- **Обмеження:** доступно 2 дні по 12 год; одна установка. Максимально реалістично - 4–6 запусків.
- **Рішення:** старт із фракційного плану ($2^{\{3-1\}}$) для скринінгу основних ефектів; за підозри на взаємодії - розширення до повного (2^3) у наступному спринті (дозбір 4 точок).
- **Критичні контрольні точки:** стабільність pH і температури (дрейф $< \pm 0.1$ pH, ± 0.2 °C); перевірка калібрування датчиків до кожного запуску.

2.4 Рандомізація і блокування.

- **Рандомізація:** порядок запусків визначено генератором випадкових чисел; зафіксовано seed у методичному листі.
- **Блокування:** двоблокова схема за днями; у протоколі вказано «BlockID» для коректного подальшого аналізу дисперсії.

2.5 Артефакти JASP і Miro.

- **JASP:** створено таблицю плану з кодованими та реальними рівнями; додано колонки «RunOrder», «BlockID», «Seed», «Notes».
- **Miro:** карта процесу з вузлами «Фактори/Рівні», «Рандомізація», «Блокування», «Ресурси», «Ризики», «Критерій переходу до (2^3)».

3. Peer-review.

- **Сильні сторони:** чітка трасованість рішень; явний облік обмежень; план дозбору для ескалації до (2^3).
- **Ризики:** можливе змішування основних ефектів і взаємодій у ($2^{\{3-1\}}$); ризик дрейфу температури в другій зміні.
- **Рекомендації:** додати технічні реплікації для двох крайніх точок $(-1, -1, -1)$ і $(+1, +1, +1)$; протокол корекції pH перед інокуляцією; фіксація часу на перезаправку середовища як

коварати.

4. Підсумки та рішення.

- **Коли обирати (2^3):** є час/ресурси на 8 запусків; пріоритет - достовірна оцінка взаємодій.
- **Коли обирати (2^{3-1}):** скринінг під обмеженнями; головна мета - ідентифікація домінантних факторів для швидкого інженерного рішення.
- **Правила рандомізації/блокування:** рандомізація всередині блоків; блок - у статистичній моделі як фактор під час подальшого аналізу (ANOVA).

5. Домашнє завдання (виконано - приклад подання)

- **Завдання:** розробити фракційний план для чотирьох факторів (2^{4-1}) із коротким обґрунтуванням рівнів.
- **Генератор і резолюція:** обрано генератор ($D=ABC$) → ($I=ABCD$) (резолюція IV: основні ефекти не конфундують із двофакторними взаємодіями, але взаємодії між собою - так).
- **Фактори/рівні:**
 - A: температура 28/32 °C; B: pH 6.8/7.2; C: 200/400 грм; D: концентрація субстрату 10/20 г/л.
- **Таблиця плану (фрагмент):** наведено 8 запусків з колонкою ($D=ABC$), рандомізований «RunOrder», позначено «BlockID».
- **Обґрунтування:** резолюція IV обрана як компроміс між кількістю запусків і якістю оцінок основних ефектів для швидкого прийняття інженерного рішення.
- **Завантаження:** план (CSV) і пояснювальна записка (PDF) подані в Moodle.

Практичне заняття №2. Дослідницька методологія та регуляторні рамки у біотехнології.

Тривалість - 80 хвилин.

Компетентності: K01, ІК, K12.

Програмні результати навчання: ПР08, ПР17.

Передумови та необхідні знання:

- Розуміння фаз дослідницького циклу: планування, виконання, аналіз і звітування;
- Знання принципів забезпечення якості даних і вимог до документації;
- Ознайомленість з основами складання протоколу експерименту.

Інструменти:

- PDF-версії нормативних документів (GLP, GMP, GCP, ISO 17025);
- Miro або Trello для візуального мапування регуляторних вимог;
- Overleaf або Microsoft Word для підготовки протоколу.

Попередня підготовка:

- Переглянути відео-огляд регуляторних стандартів у біотехнології (5–7 хв).
- Ознайомитися з конспектом методичного матеріалу про GLP, GMP, GCP та ISO 17025 (PDF).
- Створити обліковий запис у Miro або Trello та завантажити шаблон чек-листа відповідності.
- Сформулювати короткий опис власного дослідницького сценарію (2–3 речення).

Вступ (10 хв):

- Мотивація: розбір кейсу затримки реєстрації біопрепарату через невідповідність документообігу стандартам GMP.
- Оголошення цілей і очікуваних результатів заняття:
 - визначити ключові контрольні точки дослідницького циклу;
 - скласти базовий чек-лист відповідності нормативним вимогам.
- Розподіл ролей у командах (3–4 особи):
 - методолог досліджень;

- фахівець із контролю якості (QA);
- відповідальний за документообіг.

Теоретичний блок (15 хв):

- Інтерактивний огляд:
 - фази дослідницького циклу та їхні ключові контрольні точки;
 - призначення основних стандартів:
 - GLP (Good Laboratory Practice) - належна лабораторна практика;
 - GMP (Good Manufacturing Practice) - належна виробнича практика;
 - GCP (Good Clinical Practice) - належна клінічна практика;
 - ISO 17025 - загальні вимоги до компетентності випробувальних і калібрувальних лабораторій.
- Демонстрація створення мапи нормативних вимог у Miro:
- 1. визначення джерел нормативних документів;
- 2. класифікація вимог за етапами дослідницького процесу.
- Контрольні запитання для самоперевірки

Практична вправа (30 хв):

- Формування міні-команд по 3–4 студенти.
- Завдання:
 1. Обрати дослідницький сценарій (наприклад, розробка експрес-тесту, виробництво рекомбінантного білка або культура клітин).
 2. Проаналізувати, які вимоги GLP, GMP, GCP або ISO 17025 застосовуються на кожному етапі сценарію.
 3. У Miro (або Trello) скласти чек-лист відповідності з пунктами:
 - кваліфікація та калібрування обладнання;
 - валідація методики;
 - контроль якості та зберігання зразків;
 - ведення протоколів і фіксація змін у документації.
 4. У Overleaf або Word підготувати заголовок та перший розділ протоколу з посиланнями на відповідні стандарти.

Обговорення й peer-review (15 хв):

- Презентація результатів кожною командою (3–4 хв на команду).
- Уточнення пропущених вимог і доповнення чек-листа.
- Викладач узагальнює рекомендації та деталізує нюанси застосування стандартів.

Підсумки та домашнє завдання (10 хв):

- Підсумування:
 - відмінності між GLP, GMP та GCP;
 - роль ISO 17025 у валідації лабораторій;
 - ключові елементи чек-листа відповідності.

□ Чек-лист: Дослідницька методологія та регуляторні рамки у біотехнології.

1. Формулювання дослідницької ідеї:

- ☐ Чітко визначено проблему, мету та завдання дослідження;
- ☐ Проведено огляд наукової літератури та патентних джерел;
- ☐ Узгоджено тему з керівником/науковою радою.

2. Вибір та опис методології:

- ☐ Обґрунтовано вибір методів (експериментальних, аналітичних, статистичних);
- ☐ Складено детальний план експериментів з часовими рамками;
- ☐ Визначено контрольні та експериментальні групи/зразки;
- ☐ Описано процедури збору, обробки та аналізу даних.

3. Етичні та правові аспекти:

- ☐ Перевірено відповідність дослідження національному та міжнародному законодавству;
- ☐ Отримано необхідні дозволи (етичні комітети, регуляторні органи);
- ☐ Підготовлено та підписано інформовану згоду учасників (якщо застосовно);
- ☐ Застосовано принципи біоетики (3Rs для роботи з тваринами: Replacement, Reduction, Refinement).

4. Регуляторні рамки та стандарти:

- ☐ Ідентифіковано релевантні стандарти (ISO, GMP, GLP, GCP);

- ☐ Створено SOP для ключових процедур дослідження;
- ☐ Забезпечено навчання персоналу згідно зі стандартами;
- ☐ Передбачено процедури аудиту та контролю якості.

5. Управління ризиками та безпекою:

- ☐ Проведено оцінку ризиків для дослідників, об'єктів та довкілля;
- ☐ Розроблено план дій у випадку аварій чи інцидентів;
- ☐ Підготовлено засоби індивідуального захисту (ЗІЗ) та аварійні комплекти;
- ☐ Ведеться журнал реєстрації інцидентів/відхилень

6. Документування та звітність:

- ☐ Створено систему збереження сирих даних (захищені сервери / ELN);
- ☐ Задokumentовано всі відхилення від плану з обґрунтуваннями;
- ☐ Підготовлено проміжні та фінальні звіти згідно з вимогами регуляторів;
- ☐ Здійснено архівацію матеріалів відповідно до політики зберігання.

- Роздача методичного листа з шаблоном протоколу, що містить розділи «Методика», «Контроль якості», «Відповідність стандартам».

- Домашнє завдання:

1. Розробити протокол одного з етапів власного дослідницького сценарію з урахуванням нормативних вимог.
2. Завантажити протокол у Moodle та підготувати коротку презентацію (5 слайдів) до наступного заняття.

Критерії оцінювання:

- повнота та точність чек-листа відповідності;
- якість опису процедур у протоколі;
- обґрунтованість застосування стандартів;
- активність у peer-review та дискусії;
- своєчасність і повнота виконання домашнього завдання.

ЗВІТ З ПРАКТИЧНОГО ЗАНЯТТЯ №2 (ПРИКЛАД)

Тема: Дослідницька методологія та регуляторні рамки у біотехнології.

1. Обраний сценарій.

Тема: Розробка рекомбінантного білка для діагностики вірусної інфекції.

Мета: Створити лабораторний прототип білка та перевірити його специфічність і чутливість у діагностичному тесті.

Команда і ролі:

- Методолог досліджень - відповідає за дизайн і протоколи
- QA-фахівець - контролює дотримання стандартів і валідацій
- Відповідальний за документообіг - веде ELN, SOP, архівацію

2. Мапа нормативних вимог (фрагмент).

Фази дослідницького циклу та релевантні стандарти (створено у Miro):

Етап	Контрольні точки	Стандарти
Планування	Огляд літератури, формулювання гіпотези, план експерименту	GLP (планування дослідів), ISO 17025 (компетентність лабораторії)
Виконання	Калібрування обладнання, ведення протоколів, контроль середовищ	GLP, GMP (якщо виробничий масштаб)
Аналіз	Валідація методів, перевірка обробки даних	GLP, ISO 17025
Звітність	Підготовка звітів, архівація, аудит	GLP, GMP (якщо релевантно)

3. Чек-лист відповідності (Miro → експорт у Trello).

Приклад заповнення:

1. **Формулювання ідей:** ☐ Мета, завдання, гіпотеза зафіксовані в ELN; проведено пошук у PubMed та Espacenet.
2. **Методологія:** ☐ Вибрано метод експресії у *E. coli*, план робіт на 4 тижні з контрольними точками; визначені контрольні зразки (негативний/позитивний).
3. **Етичні аспекти:** ☐ Не застосовується (in vitro, без матеріалів людини/тварин).
4. **Регуляторні рамки:** ☐ Ідентифіковано GLP, ISO 17025; створено 2 SOP (експресія білка, тест ELISA).

5. **Управління ризиками:** □ Проведено оцінку біобезпеки (BSL-1), підготовлено ЗІЗ та журнал інцидентів.
6. **Документування:** □ ELN-записи з датами і підписами; сирі дані зберігаються на захищеному сервері; архівування згідно з політикою установи.

4. Фрагмент протоколу (Overleaf).

Назва: SOP-REC-P01 “Експресія рекомбінантного діагностичного білка у *E. coli*”

Розділ 1 - Методика:

- Виразка гена у векторі pET-28a, трансформація штаму BL21(DE3)
- Індукція IPTG, культивування при 30 °C, збір біомаси
- Лізис клітин, афінна хроматографія, діаліз
- Валідація чистоти білка (SDS-PAGE) і активності (ELISA)

Розділ 2 - Контроль якості:

- Калібрування спектрофотометра (ISO 17025, п.5.5)
- Контроль температури інкубації (GLP, розд.6)
- Валідація ELISA-методу (повторюваність, відтворюваність)

Розділ 3 - Відповідність стандартам:

- GLP: повне ведення протоколів і результатів
- ISO 17025: компетентність персоналу, калібрування
- GMP: зберігання зразків у контрольованих умовах (для можливого масштабування)

5. Peer-review (результати 15-хв сесії).

- **Позитив:** Чітко ідентифіковані контрольні точки, оформлено SOP з посиланнями на нормативи, відображено у Міго процес від ідеї до звітування.
- **Зауваження:** Додати розділ про план дій у разі технічного збою обладнання та резервне дублювання даних на хмарний репозиторій.

6. Підсумки.

- Розмежування GLP, GMP, GCP: у цьому кейсі GCP не застосовується, GMP - лише перспективно для виробництва.
- ISO 17025 - ключовий для довіри до аналітичних результатів і зовнішнього визнання лабораторії.
- Чек-лист став готовою основою для майбутніх внутрішніх аудитів.

Практичне заняття №3. Збір, управління та валідація даних із застосуванням систем LIMS і ELN.

Тривалість: 80 хвилин.

Компетентності: K01, K09. **Програмні результати навчання:** ПР08.

Передумови та необхідні знання:

- Розуміння структури дослідницького процесу та життєвого циклу даних;
- Базові навички роботи з цифровими інструментами керування інформацією;
- Поняття валідації даних та контролю якості.

Інструменти:

- Демонстраційні або навчальні версії LIMS (Laboratory Information Management System) та ELN (Electronic Laboratory Notebook);
- Приклад лабораторного набору даних (CSV);
- Google Drive/OneDrive для командної роботи з файлами;
- Шаблон SOP (Standard Operating Procedure) для валідації даних.

Попередня підготовка:

- Ознайомитися з коротким відео/презентацією про LIMS та ELN (5–7 хв);
- Завантажити навчальний набір даних для воркшопу;
- Ознайомитися з базовими принципами Good Data Management Practices (GDMP);
- Установити або отримати доступ до навчального середовища LIMS/ELN.

Вступ (10 хв):

- Мотивація: приклад помилки у біотехнологічному проєкті через відсутність централізованого обліку даних.
- Цілі:
 - навчитись ефективно збирати й організовувати дані;
 - застосовувати автоматизовані інструменти валідації;
 - інтегрувати контроль якості у цифрові робочі процеси.
- Розподіл ролей у командах:
 - адміністратор LIMS;

- дослідник, який вводить дані;
- контролер якості.

Теоретичний блок (15 хв):

- Структура LIMS та ELN: ключові модулі та функціональні можливості;
- Різниця між LIMS (управління зразками та процесами) і ELN (електронна фіксація протоколів і результатів);
- Основні принципи GDMP та ролі у забезпеченні якості даних;
- Валідація даних: типи помилок, логічні перевірки, контрольні точки у системі.

Практична вправа (30 хв):

1. Імпортувати тестовий набір даних у LIMS;
2. Створити запис зразка у ELN із прив'язкою до протоколу експерименту;
3. Запровадити правила валідації:
 - формат даних (наприклад, діапазони значень);
 - обов'язкові поля;
 - автоматичні перевірки на дублікати;
4. Виявити та виправити 3–5 помилок у даних, змодельовавши процес QA;
5. Експортувати звіт про зміни для командного обговорення.

Обговорення й peer-review (15 хв):

- Презентація результатів кожною командою: знайдені помилки, методи валідації;
- Обговорення ефективності застосованих підходів;
- Формування узагальнених рекомендацій для інтеграції LIMS/ELN у роботу лабораторії.

Підсумки та домашнє завдання (10 хв):

- Ключові тези:
 - переваги централізованого управління даними;
 - роль валідації для достовірності результатів;
 - оптимальна взаємодія LIMS і ELN.
- Роздача методичного листа з чек-листом «Валідація даних у LIMS/ELN».

□ Чек-лист валідації даних у LIMS та ELN:

1. Підготовка робочого середовища:

- [] Перевірено доступ до LIMS та ELN;

- ☐ Створено або вибрано відповідний проєкт/експеримент;
- ☐ Оновлені шаблони записів та SOP до актуальної версії.

2. Введення даних:

- ☐ Заповнені всі обов'язкові поля (ID зразка, дата, виконавець, методика);
- ☐ Формат числових та текстових полів відповідає специфікації (одиниці вимірювання, роздільники);
- ☐ Назви та коди зразків узгоджені зі стандартом номенклатури.

3. Автоматичні перевірки:

- ☐ Увімкнено вбудовані правила валідації (діапазони значень, допустимі формати);
- ☐ Відсутні дублікати записів;
- ☐ Логічні зв'язки між полями збережені (наприклад, дата вимірювання $\geq$ дата відбору зразка).

4. Візуальний та ручний контроль:

- ☐ Перевірено коректність завантажених файлів/зображень;
- ☐ Порівняно введені дані з первинними лабораторними нотатками;
- ☐ Зафіксовано невідповідності для корекції.

5. Контроль якості (QA):

- ☐ Проведено peer-review іншими членами команди;
- ☐ Підтверджено виправлення помилок з відміткою у LIMS/ELN;
- ☐ Збережено історію змін для аудиту.

6. Фіналізація:

- ☐ Експортовано звіт про результати валідації (PDF/CSV);
- ☐ Завантажено звіт у Moodle або іншу LMS;
- ☐ Архівовано дані згідно з політикою зберігання.
- **Домашнє завдання:**
 - Створити у ELN повний запис власного дослідження із валідаційними правилами;
 - Завантажити у Moodle PDF-звіт із переліком контрольних точок і прикладами помилок, які було виявлено та виправлено.

Критерії оцінювання:

- коректність налаштування валідаційних правил.
- повнота й логічність структури записів.

- ефективність командної роботи при виявленні помилок.
- своєчасність і якість виконання домашнього завдання.

ЗВІТ З ПРАКТИЧНОГО ЗАНЯТТЯ №3 (ПРИКЛАД)

Тема: Збір, управління та валідація даних із застосуванням систем LIMS і ELN

1. Вступ і налаштування середовища.

- **Команда і ролі:** Адміністратор LIMS (Анна), Дослідник/ввід даних (Богдан), Контролер якості (Софія).
- **Інструменти:** Навчальна LIMS (модулі Samples, Results, Instruments, Methods), навчальна ELN, Google Drive для спільних файлів, шаблон SOP “Валідація даних у LIMS/ELN v1.2”.
- **Передумови виконані:** Переглянуто міні-презентацію про LIMS/ELN (7 хв), завантажено набір даних “microalgae_batch_A.csv”, ознайомлено з принципами GDMP, отримано доступ до тренінгового середовища.
- **Мотиваційний кейс:** Помилка в одиницях (mg/L замість g/L) призвела до некоректних технологічних рішень у попередньому проєкті; мета воркшопу - запобігти таким ризикам через централізований облік і валідацію.

2. Дані, структура та SOP.

- **Опис набору даних:** 120 записів аналізів біомаси мікроводоростей (партії A1–A4), поля: ProjectID, SampleID, BatchID, Collector, CollectionDate, MeasurementDate, Biomass_Value, Biomass_Unit, MethodID, MethodVersion, InstrumentID, Operator, Notes.
- **Номенклатура і форматування:** SampleID за шаблоном NBS-YYYY-#### (напр., NBS-2025-0123); дати у форматі YYYY-MM-DD; одиниці очікувано g/L; унікальність SampleID в межах ProjectID.
- **Ключові політики SOP:** Обов’язкові поля (SampleID, BatchID, CollectionDate, MeasurementDate, Biomass_Value, Biomass_Unit, MethodID, InstrumentID, Operator), заборона редагування первинних значень без причини, усі зміни - через оформлений change request з audit trail.

Словник сутностей LIMS

Сутність	Обов'язкові поля	Типові зв'язки	Валідаційні вимоги
Sample	ProjectID, SampleID, BatchID, CollectionDate	Sample 1 - M Results; Sample M - 1 Batch	Унікальний SampleID у межах проекту
Result	MeasurementDate, Biomass_Value, Biomass_Unit, MethodID, InstrumentID, Operator	M - 1 Sample; M - 1 Method; M - 1 Instrument	Діапазони значень, відповідність одиниць
Method	MethodID, MethodVersion, SOP_Link	1 - M Results	Існування запису перед імпортом Result
Instrument	InstrumentID, CalibrationDue	1 - M Results	Валідна калібровка на дату вимірювання

3. Практична вправа і результати.

3.1 Імпорт у LIMS.

- **Дії адміністратора:** Створено ProjectID=ALGAE-25Q1; попередньо завантажено довідники Methods (ALG-004 v1.2) та Instruments (HPLC-02, SPCT-07).
- **Дії дослідника:** Імпортовано microalgae_batch_A.csv у модуль Results з мапінгом полів; активовано попередню перевірку перед комітом у продукційні таблиці.
- **Результат:** 120 рядків пройшли синтаксичні перевірки; 7 рядків позначено попередженнями; 5 - критичні помилки (блокування коміту).

3.2 Запис в ELN і прив'язка до LIMS.

- **Створений запис:** ELN Entry "Batch A - Growth Assay", посилання на SOP ALG-004 v1.2, вкладені файли сирих логів приладів, таблиця матеріалів і параметрів культивування.

- **Крос-посилання:** Для кожного SampleID додано URL-якір на відповідний запис у LIMS; у LIMS для Results додано поле ELN_EntryID.

3.3 Налаштовані правила валідації

Код правила	Область	Логіка перевірки	Тригер	Дія
VR-01	SampleID	Формат NBS-YYYY-####; унікальність в межах ProjectID	On import	Error + блокування
VR-02	Дати	MeasurementDate $\geq$ CollectionDate	On import/update	Error + блокування
VR-03	Значення	Biomass_Value в [0.05; 12.00] (очікуваний техн. діапазон)	On import	Warning або Error (>12)
VR-04	Одиниці	Biomass_Unit $\in$ {g/L}; інші заборонені	On import	Error + блокування
VR-05	Довідники	MethodID, InstrumentID існують і активні	On import	Error + блокування
VR-06	Калібровка	CalibrationDue MeasurementDate $\geq$	On import/update	Warning
VR-07	Дублі	Комбінація SampleID+MeasurementDate унікальна	On import	Error + блокування

3.4 Виявлені помилки і виправлення (QA).

ID зміни	Проблема	До	Після	Власник/Час	Підстава
CH-001	Невірні одиниці	Biomass_Unit=mg/L; Value=640	Biomass_Unit=g/L; Value=0.64	Софія, 10:32	Конверсія за протоколом; підтверджено сириєм логом
CH-002	Інверсія дат	Collection=2025-03-15; Measurement=2025-03-14	Measurement=2025-03-16	Богдан, 10:36	Зіставлено з журналом приладу
CH-003	Дублікат SampleID	NBS-2025-0123 повторюється	Новий ID NBS-2025-0457; крос-посилання на ELN	Анна, 10:41	Унікальність у межах проекту
CH-004	Відсутній Method Version	MethodVersion=null	MethodVersion=1.2	Богдан, 10:44	Перенесено з SOP
CH-005	Прострочена калібровка	CalibrationDue=2025-03-10; Meas=2025-03-12	Результат позначено "QC-Flag=Review"	Софія, 10:47	Вимагатиме повторного вимірювання

- **Метод QA:** Перехресна звірка з первинними файлами, використання ELN як джерела істини для контексту, обов'язкова причина зміни + посилання на артефакт (лог/фото/файл).

3.5 Аудит-трейл і експорт.

- **Audit trail:** Для кожної зміни зафіксовано користувача, час, старе/нове значення, причину, посилання на ELN і вкладений доказ.
- **Експорти:** Згенеровано “Validation_Report_ALGAE-25Q1.pdf” та “ChangeLog_ALGAE-25Q1.csv” для обговорення; у звіті - статистика помилок (5 критичних, 2 попередження), перелік правил, що спрацювали.

4. Peer-review і узагальнення результатів.

- **Презентація команди:** Показано налаштовані правила VR-01...VR-07, діаграму причин помилок (60% - формат/одиноці, 20% - дати, 20% - довідники), приклади записів у ELN з повною трасованістю.
- **Оцінка ефективності:** Автоматичні перевірки відсікли 100% критичних помилок до внесення у продукційні таблиці; час на ручний QC зменшено орієнтовно на 35% порівняно з попереднім спринтом.
- **Рекомендації для лабораторії:**
 - **Стандарти номенклатури:** Затвердити шаблони ID на рівні інституції.
 - **Контроль одиниць:** Залишити лише один допустимий варіант для кожного показника; конверсії - в окремому ETL-шарі.
 - **Калібровка приладів:** Додавати блокувальні правила для вимірювань після дати CalibrationDue.
 - **ELN як джерело контексту:** Усі відхилення та винятки документувати в ELN з чек-листом доказів.

5. Відповідність чек-листу і критеріям оцінювання.

- **Підготовка середовища:** Доступи актуальні; проект створено; SOP v1.2 застосовано.
- **Введення даних:** Усі обов'язкові поля заповнено; формати та номенклатура дотримані після виправлень.
- **Автоматичні перевірки:** Увімкнено VR-01...VR-07; дублікати усунено; логічні залежності виконані.
- **Візуальний і ручний контроль:** Зіставлено з первинними файлами; додані докази у ELN.

- **QA-процес:** Peer-review проведено; виправлення підтверджені; історія змін збережена.
- **Фіналізація:** Експортовано звіт і changelog; завантажено у LMS; дані архівовано у проектному каталозі.
- **Критерії оцінювання:**
 - **Коректність правил валідації:** Усі правила працюють, охоплюють основні ризики.
 - **Структура записів:** Повна і логічна, з крос-посиланнями LIMS↔ELN.
 - **Командна робота:** Ролі відпрацьовані; peer-review результативний.
 - **Домашнє завдання:** Підготовлений шаблон ELN для власного експерименту (див. нижче).

6. Підсумки та домашнє завдання.

- **Ключові висновки:** Централізований облік і автоматизована валідація суттєво зменшують ризик помилок; ELN забезпечує відтворюваність і контекст; LIMS гарантує цілісність, унікальність і трасованість даних.
- **Домашнє завдання:**
 - **ELN-запис:** Створити повний запис власного експерименту з прикріпленими артефактами та чек-листом відхилень.
 - **Правила:** Налаштувати мінімум 5 правил валідації для своїх показників у LIMS (формат ID, діапазони, дати, довідники, дублікати).
 - **Звіт:** Згенерувати PDF-звіт про валідацію і коротко описати 2–3 виявлені або змодельовані помилки та їх виправлення.
- **Відповідність компетентностям/ПР:**
 - **K01:** Продемонстровано розуміння життєвого циклу даних і ролей у процесі.
 - **K09:** Застосовано цифрові інструменти для керування інформацією та забезпечення якості.
 - **ПР08:** Використано сучасні LIMS/ELN-практики для збору, структурування, валідації й документування даних.

Практичне заняття №4. Статистичний аналіз і ухвалення рішень: від описової до інференційної статистики.

Тривалість: 80 хвилин.

Компетентності: K01; K09.

Програмні результати: ПР08.

Передумови: базові поняття про вибірку, змінні, гіпотези; навички роботи з електронними таблицями та аналітичними ноутбуками

Інструменти: JASP або Jamovi; RStudio Cloud чи Google Colab; Excel/Google Sheets; шаблон аналітичної записки та чек-лист аналізу

Попередня підготовка:

- **Читання:** конспект (2–3 стор.) про типи змінних, помилки I/II типу, довірчі інтервали;
- **Доступ:** встановлений JASP/Jamovi або доступ до Colab/RStudio Cloud;
- **Огляд:** «сходинки вибору тесту» та мінічек-лист перевірки припущень (нормальність, однорідність дисперсій);
- **Дані:** навчальні набори даних курсу або власні для домашнього завдання.

Вступний модуль (10 хв):

- **Мотивація:** як різний вибір статистичного методу змінює інтерпретацію одного й того ж експерименту (мікрокейс із біопроцесу).
- **Цілі:** перейти від опису даних до статистичного висновку; обрати відповідний тест, перевірити припущення, оцінити розмір ефекту та невизначеність.
- **Ролі в команді:** аналітик, відповідальний за перевірку припущень, візуалізатор, рецензент висновків.

Теоретичний блок (10 хв):

- **Типи змінних і дизайн:** категоріальні/безперервні; незалежні/парні вибірки; факторні дизайни;
- **Описова статистика:** середнє, медіана, стандартне відхилення (SD), інтерквартильний розмах (IQR), викиди; візуалізації - гістограма, діаграма розмаху (boxplot),

скрипковий графік (violin plot), стовпчикові діаграми зі смужками похибок.

- **Інференція та припущення:** нульова й альтернативна гіпотези, рівень значущості (α), статистична потужність; нормальність (критерій Шапіро - Вілка), однорідність дисперсій (критерій Левена), незалежність спостережень.
- **Вибір тесту:** t-тести/ANOVA; непараметричні аналоги - критерій Манна - Вітні, критерій Краскела - Уолліса; кореляція Пірсона/Спірмена; проста лінійна регресія
- **Звітність результатів:** р-значення + 95%-й довірчий інтервал (ДІ) + розмір ефекту (Cohen's d, η^2 , r) + практична значущість.

Практичний модуль (45 хв):

Датасети на вибір:

1. **Біореактор:** вихід ферментації за двома протоколами ($n \approx 30$ у групі), побічні метаболіти, температура.
2. **Активність ферментів:** активність протеази в трьох буферах (ANOVA) + pH як коваріата.
3. **Контамінації:** частота відхилень до/після оновлення SOP (пропорції; критерій χ^2 або точний критерій Фішера).

Кроки:

1. **Профілювання даних:** побудувати описову статистику (середнє/медіана, SD/IQR) та візуалізації.
2. **Перевірка припущень:** застосувати критерій Шапіро - Вілка (нормальність), критерій Левена (однорідність дисперсій), виявити викиди та обґрунтувати дії.
3. **Вибір і виконання тесту:** обрати тест за дизайном і типом змінних; виконати t-тест/ANOVA або непараметричний аналог; для пропорцій - критерій χ^2 чи тест Фішера.
4. **Розмір ефекту та ДІ:** обчислити Cohen's d, η^2 або r; додати 95%-й ДІ; інтерпретувати практичну значущість.
5. **Висновок у форматі аналітичної записки:** 150–200 слів із рекомендацією до дії.

Усі кроки документуються в ELN або аналітичному ноутбуку для відтворюваності.

Обговорення та peer-review (10 хв):

- **Презентація:** 3–4 слайди або скріншоти: дизайн, вибір тесту, ключові значення, графік, висновок.

- **Рецензія:** оцінка узгодженості припущень і тесту; можливі альтернативи; баланс p , ДІ та розміру ефекту.
- **Узагальнення:** побудова колективного дерева вибору тестів для типових кейсів курсу.

Підсумки та домашнє завдання (5 хв):

- **Ключові акценти:** перевірка припущень, комбінація p + ДІ + розмір ефекту, відтворюваність та інтерпретація результатів у практичному контексті.
- **Завдання:**
 - Проаналізувати інший набір даних тим самим методом.
 - Здати: файл JASP/ноутбук із кроками, 1 графік, аналітичну записку з рекомендаціями та обмеженнями аналізу.
- **Додатково:** коротка передреєстрація плану аналізу (гіпотеза, тест, (α), критерії зупинки).

Критерії оцінювання:

- **Вибір тесту:** відповідність типу змінних і дизайну, аргументація вибору.
- **Перевірка припущень:** коректність тестування, обґрунтована робота з викидами та порушеннями.
- **Звітність:** статистика тесту, df , p , 95%-й ДІ, розмір ефекту, графік.
- **Висновок:** чіткість і практична значущість, оцінка ризиків, рекомендації.
- **Відтворюваність:** скрипти, файли, скріншоти; логічна структура й чистота оформлення.

ЗВІТ З ПРАКТИЧНОГО ЗАНЯТТЯ №4 (ПРИКЛАД)

Тема: Статистичний аналіз і ухвалення рішень: від описової до інференційної статистики.

1. Огляд і налаштування.

- **Ролі команди:** аналітик (Олена), відповідальний за припущення (Марк), візуалізатор (Ірина), рецензент висновків (Тарас).

- **Інструменти:** JASP 0.18; RStudio Cloud (tidyverse/effsize); Google Sheets для спільної таблиці; шаблон аналітичної записки і чек-лист аналізу.
- **Підготовка виконана:** прочитано конспект (типи змінних, помилки I/II типу, ДІ); доступ до JASP і RStudio Cloud; переглянуто «сходинки вибору тесту» та мінічек-лист припущень; дані курсу завантажені в проєкт.
- **Мотиваційний мікрокейс:** на одному наборі вимірювань різні методи (t-тест vs U-Манна - Вітні) дають схожий висновок, але різну інтерпретацію невизначеності та розміру ефекту - отже, обґрунтування вибору методу критично важливе.

2. Датасет і дизайн.

- **Обрана задача:** Біореактор - вихід ферментації за двома протоколами (A vs B), додаткові змінні: температура, побічний метаболіт.
- **Дослідницьке питання:** чи відрізняється середній вихід біомаси між Протоколом А і Протоколом В в умовах лабораторної ферментації?
- **Дизайн:** незалежні вибірки, по 30 спостережень у кожній групі; безперервна цільова змінна - вихід біомаси (г/л).
- **Гіпотези:**
 $(H_0: \mu_A = \mu_B)$
 $(H_A: \mu_A \neq \mu_B)$
- **Словник даних:** Group (A/B), Biomass (г/л), Temp (°C), Byproduct (мг/л), BatchID, OperatorID, Date.

Описова статистика

Група	n	Середнє	SD	Медіана
A	30	5.42	0.56	5.40
B	30	5.88	0.60	5.90

- **Спостереження з описової:** розподіли подібні за розкидом; у В середнє вище. Візуалізації: гістограми та boxplot з накладеними середніми значеннями.

3. Перевірка припущень і вибір методу.

Профілювання припущень.

Перевірка	Метрика	Результат	Рішення
Нормальність (Шاپіро - Вілка)	$W(A)=0.972$, $W(B)=0.968$; $p>0.40$	Відхилень не виявлено	Можна застосовувати параметричний тест
Однорідність дисперсій (Левена)	$F(1,58)=0.12$; $p=0.73$	Дисперсії рівні	Класичний двовибірковий t-тест
Викиди (boxplot; z-score)	По 1 потенційному outlier у кожній групі	Контекстно валідні	Залишено, проведено чутливісну перевірку

- **“Сходи́нки вибору тесту”:** дві незалежні групи; безперервна змінна; припущення виконані → двосторонній t-тест для незалежних вибірок. Для надійності - паралельно U-Манна - Вітні.

Результати тестування.

Тест	Статистика	df	p
t-тест (незалежні)	$t = -3.12$	58	0.0027
U-Манна - Вітні	$U = 274$	-	0.0042

- **Різниця середніх:** -0.46 г/л ($B - A = +0.46$ г/л для інтерпретації користі B).
- **95% ДІ для різниці:** $[-0.75; -0.17]$.
- **Розмір ефекту:** Cohen's ($d = 0.80$) - великий ефект.

Додаткові перевірки:

- **Потенційний конфундер - температура:** різниця температур між групами несуттєва (середня $Temp_A = 30.1^{\circ}C$, $Temp_B = 30.3^{\circ}C$; $t = -0.61$; ($p = 0.54$)), кореляція Biomass-Temp: ($r = -0.12$), ($p = 0.36$). Висновок: вплив температури на основний результат не виявлено.
- **Чутливісний аналіз:** видалення 2 потенційних outliers змінює оцінку незначно ($t = -2.89$; ($p = 0.0053$); ($d = 0.74$)) - висновок стабільний.

4. Візуалізації і ключові рисунки.

- **Boxplot з накладеними даними:** чітко видно вищу медіану та середнє у групі В, перекриття інтервалів помірне.
- **Стовпчиковий графік із 95% ДІ:** різниця між середніми статистично і практично значуща; ДІ не перетинає нуль.
- **Гістограми/скрипкові графіки:** форма розподілу близька до нормальної; асиметрія низька.

5. Аналітична записка.

Ціль аналізу - оцінити різницю у виході біомаси між двома протоколами ферментації. Описова статистика свідчить, що середній вихід за Протоколом В на 0.46 г/л вищий, ніж за Протоколом А. Перевірки припущень (нормальність за Шапіро - Вілка, однорідність дисперсій за Левена) не виявили порушень, тож застосовано двосторонній t-тест для незалежних вибірок. Отримано ($t(58)=-3.12$), ($p=0.0027$), 95% ДІ для різниці $[-0.75; -0.17]$; розмір ефекту Cohen's ($d=0.80$) (великий). Непараметрична перевірка U-Манна - Вітні підтвердила висновок ($p=0.0042$). Аналіз потенційного конфундера (температура) не виявив зміщення результатів. З огляду на статистичну і практичну значущість, рекомендуємо перевести виробничі пілоти на Протокол В із поетапним масштабуванням. Перед впровадженням на повну потужність потрібен техніко-економічний розрахунок (врахувати вартість реагентів, енергоспоживання, навантаження на очищення побічних метаболітів) та короткий валідаційний цикл QA/QC із контрольними точками. Очікуваний ефект - підвищення виходу при зіставній вартості, з мінімальними ризиками якості.

6. Відтворюваність, peer-review і підсумок.

- **Артефакти та структура:**
 - **ELN-запис:** "Fermentation_Yield_AvsB_v1" із описом дизайну, скрінами графіків, протоколом перевірки припущень, посиланням на дані.
 - **Файли:** data_bioreactor.csv; JASP файл "A_vs_B_yield.jasp"; R-ноутбук "analysis_yield.Rmd" (імпорт, описова, припущення, тести, графіки, експорт результатів).
 - **Графіки:** boxplot.png; means_CI.png.
- **Чек-лист аналізу:** усі пункти виконано - коректний вибір тесту за дизайном; припущення перевірено; звітність містить статистику тесту, (df), (p), 95% ДІ, (d), графік;

рішення сформульовано з урахуванням практичної значущості.

- **Peer-review (10 хв):** рецензент запропонував додати непараметричну перевірку та чутливісний аналіз без викидів - додано; рекомендації залишилися незмінними.
- **Домашнє завдання:** застосувати ідентичний конвеєр до іншого набору (варіант “Активність ферментів” або “Контамінації”), здати JASP/ноутбук, 1 графік, аналітичну записку з рекомендаціями та обмеженнями.
- **Відповідність K01; K09; ПР08:**
 - **K01:** продемонстровано розуміння життєвого циклу даних аналізу (профілювання → припущення → тест → рішення).
 - **K09:** використано сучасні цифрові інструменти (JASP, RStudio Cloud, Sheets) для керування й аналізу.
 - **ПР08:** виконано повний цикл статистичного висновку з коректною звітністю і практичною інтерпретацією.

Практичне заняття №5. Багатовимірний аналіз даних з урахуванням економічних, екологічних і соціальних показників.

Тривалість: 80 хвилин.

Компетентності: ІК, К12. Програмні результати: ПР08, ПР17.

Цілі та контекст.

- **Мета:** навчитися проєктувати й виконувати багатовимірний аналіз даних для прийняття рішень за трьома вимірами сталості: економічним, екологічним і соціальним.
- **Практичний сценарій:** ранжування портфеля проєктів з біотехнологій за поєднаними показниками ROI/витрат, викидів CO₂ є/водокористування та соціального впливу (зайнятість/безпека/довіра громади).
- **Очікувані результати:** коректне масштабування змінних, виконання PCA і кластеризації в JASP, інтерпретація компонент і кластерів, формування прозорої аргументації вибору.

Передумови, інструменти та підготовка.

- **Передумови та знання:**
 - базові уявлення про описову статистику та кореляцію;
 - навички роботи з табличними даними й відсутніми значеннями;
 - розуміння стандартизації даних і впливу масштабів змінних на відстані.
- **Інструменти:**
 - JASP для PCA, кластеризації та візуалізацій;
 - Miro (або Trello) для карти дослідження та пріоритизації;
 - шаблон методичного листа в PDF.
- **Попередня підготовка:**
 - переглянути 5–7-хв відео-огляд PCA і кластеризації;
 - ознайомитися з коротким PDF щодо стандартизації, вибору кількості компонент і кластерів;
 - встановити JASP і зареєструватися в Miro (або Trello);

- підготувати дослідницьке питання (2–3 речення) і 6–10 показників по 12–20 об’єктах (або використати наданий CSV із прикладом).

Хід виконання:

Вступ (10 хв).

- **Мотивація:** як звести воедино ROI, CO₂ е та соціальний ризик, щоб обрати «кращі» проєкти за обмежених ресурсів.
- **Цілі заняття:** отримати двовимірне подання (біплот) для виявлення компромісів і груп схожих проєктів; оформити рішення у вигляді відтворюваного плану.
- **Ролі в командах (3–4 особи):**
 - керівник дослідження;
 - статистик-методолог;
 - аналітик ESG/політик показників;
 - комунікатор (за потреби).

Теоретичний блок (15 хв).

- **Ключові поняття:** стандартизація даних; головні компоненти (PCA) і навантаження; біплот; ієрархічна кластеризація та k-середніх; критерії вибору кількості компонент (критерій Кайзера, скріплот, паралельний аналіз) і кластерів (лікоть, індекс силуету).
- **Коли що застосовувати:**
 - PCA - для зменшення розмірності й виявлення латентних осей «економіка–екологія–соціум»;
 - кластеризація - для сегментації проєктів із подібними профілями;
 - коротко про альтернативи: факторний аналіз, MANOVA, канонічна кореляція, PLS (для подальших занять).
- **Демонстрація в JASP (live):**
 - імпорт CSV → перевірка типів змінних і пропусків;
 - стандартизація (z-оцінки) і побудова PCA з кореляційної матриці;
 - вибір кількості компонент (скріплот + паралельний аналіз), обертання варімакс;
 - біплот; кластеризація k-середніх на z-оцінках; попередня оцінка k (лікоть/силует).

Практична справа (30 хв).

- **Команди:** 3–4 особи, один ноутбук з JASP і спільна дошка Miro/Trello.
- **Дані:** набір показників для 15 проєктів, напр.: CAPEX, OPEX, ROI (%), CO₂ е (т/рік), водокористування (м³/рік), вироблені відходи (т/рік), створені робочі місця (ос.), інциденти з безпеки (на 200 тис. год), індекс довіри громади (0–100).
- **Завдання:**
 1. **Підготовка даних:** очистити пропуски (обґрунтувати стратегію), стандартизувати числові змінні; зафіксувати seed і всі рішення в методичному листі.
 2. **РСА:** обрати кількість компонент (скріплет + паралельний аналіз); застосувати варімакс; інтерпретувати навантаження (які змінні формують осі).
 3. **Біплет і проєкції:** нанести проєкти на площину перших двох компонент; охарактеризувати «економічно-важку», «екологічно-важку» та «соціально-орієнтовану» зони.
 4. **Кластеризація:** порівняти k-середніх (k=2..5) та ієрархічну кластеризацію (зв'язок Уорда); обрати k на підставі індексу силуету й інтерпретованості.
 5. **Композитний індекс (мікро-завдання):** побудувати прозорий індекс з двох перших компонент, вирівнявши напрямки за «більше = краще»; обґрунтувати ваги.
 6. **Артефакти:** зберегти JASP-файл, експорт біплоту; у Miro - карта рішень: припущення, вибір k, інтерпретації кластерів, ризику упередженості.

Обговорення й peer-review (15 хв).

- **Презентація команд:** 3–4 хв кожна - біплет, навантаження, карта кластерів, короткий композитний індекс.
- **Запитання колег:** перевірка стійкості висновків до змін k, вилучення окремих змінних, альтернативної стандартизації.

- **Зворотний зв'язок викладача:** чіткість інтерпретацій; коректність процедур; поради щодо валідації (крос-перевірка, чутливий аналіз).

Підсумки (10 хв).

- **Ключові висновки:** значення стандартизації; роль PCA як засобу виявлення латентних компромісів; сегментація як місток до стратегічної пріоритизації.
- **Коли що обирати:** PCA - для зменшення розмірності й візуального огляду; кластеризація - для групування; факторний аналіз - для теоретично обґрунтованих латентних конструктів; MANOVA/PLS - коли є явні предиктори/відгуки.

Домашнє завдання та формат подання

- **Завдання:** для власного набору з 6–10 показників і 12–20 об'єктів:
 - виконати стандартизацію, PCA (з протоколом вибору кількості компонент) і кластеризацію (k-середніх або ієрархічну) з обґрунтуванням k;
 - створити біплот із підписами та карту кластерів; побудувати прозорий композитний індекс і провести чутливісну перевірку до ваг;
 - оформити пояснювальну записку (PDF) і завантажити разом із JASP-файлом у Moodle до початку наступного заняття.
- **Що оцінюється у записці:** постановка мети; опис даних; рішення з обробки пропусків; критерії вибору компонент і k; інтерпретації; обмеження та ризики; відтворюваність (seed, версії ПЗ).

Критерії оцінювання.

- **Активність і якість аргументації:** участь у дискусії, здатність захищати методичні рішення.
- **Коректність процедур:** стандартизація, вибір кількості компонент, налаштування кластеризації, фіксація seed.
- **Інтерпретованість і валідація:** логічність трактування навантажень і кластерів, чутливий аналіз, перевірка альтернатив.
- **Відтворюваність:** повний методичний лист, збережені проєкти JASP, опис версій та параметрів.

- **Своєчасність і повнота:** наявність усіх артефактів (біплот, карта рішень Miro/Trello, пояснювальна записка, JASP-файл).

ЗВІТ З ПРАКТИЧНОГО ЗАНЯТТЯ №5 (ПРИКЛАД)

Тема: Багатовимірний аналіз даних з урахуванням економічних, екологічних і соціальних показників.

Дані, постановка задачі.

- **Сценарій:** пріоритизація 15 біотехнологічних проєктів за сукупними критеріями сталості для бюджетного циклу на 12 місяців.
- **Показники (приклад):** ROI (%), CAPEX (тис. \$), OPEX (тис. \$/рік), викиди CO₂ е (т/рік), водокористування (м³/рік), утворені відходи (т/рік), створені робочі місця (ос.), інциденти з безпеки (на 200 тис. год), індекс довіри громади (0–100).
- **Артефакт на вході:** CSV з 15 рядками (проєкти) і 9 стовпцями (показники); 3% пропусків у «інциденти з безпеки» та «водокористування».

Проєкт	ROI, %	CO ₂ е, т/рік	Водокористування, м ³ /рік	Довіра громади, 0–100
P01	18.2	240	13 500	62
P02	11.5	120	7 800	74
P03	23.1	310	15 200	55
P04	9.4	95	6 100	81
P05	15.0	210	10 400	68

Формат і найменування змінних узгоджені з методичним шаблоном; одиниці вимірювання подано явно.

Хід виконання з результатами.

Практична вправа.

- **Підготовка даних:**
 - **Стандартизація:** усі числові змінні перетворено в z-оцінки (JASP: Descriptives → Descriptive statistics → z-scores).

- **Обробка пропусків:** однокрокова імпутація середнім у межах змінної; чутливісна перевірка до видалення проєкту P03 без змін трендів.
- **Відтворюваність:** seed=2025; версія JASP зафіксована в методичному листі.
- **РСА (кореляційна матриця):**
 - **Вибір компонент:** за скріплетом і паралельним аналізом обрано 2 компоненти; кумулятивна пояснена дисперсія - 67% (PC1=41%, PC2=26%).
 - **Обертання:** варімакс; покращена інтерпретованість без змін загальної дисперсії.
 - **Інтерпретації навантажень (основні):**
 - **PC1 (економічно-соціальна вісь):** ROI (+0.78), індекс довіри (+0.71), робочі місця (+0.66), CAPEX (-0.58), OPEX (-0.62).
 - **PC2 (екологічний градієнт):** CO₂ е (-0.81), водокористування (-0.74), відходи (-0.69), інциденти з безпеки (-0.45).
 - **Біплот:** проєкти P02, P04 у «соціально-економічно привабливій та екологічно легшій» зоні; P03 - антиекологічний край; P01, P05 - проміжні компроміси.
- **Кластеризація:**
 - **Оцінка k:** критерій «лікоть» пропонує k=3; середній індекс силуету для k=3 - 0.47 (задовільна відокремленість).
 - **Моделі:** k-середніх на z-оцінках (k=3); ієрархічна (Уорд) підтвердила ті самі групи на дендрограмі (поріг різну - 3 кластери).
 - **Сегменти (узагальнення):**
 - **K1 - економічні лідери з прийнятною екологією:** високі PC1, помірні/вищі PC2 (P02, P04, ...).
 - **K2 - збалансовані виконавці:** середні PC1, середні PC2 (P01, P05, ...).
 - **K3 - екологічні ризики з високим CAPEX/OPEX:** низькі PC2, низькі PC1 (P03, ...).

- **Композитний індекс (прозорий):**

- **Ваги за дисперсіями:**

$$[w_1 = \frac{0.41}{0.41+0.26} = 0.61, \quad w_2 = \frac{0.26}{0.41+0.26} = 0.39]$$

- **Формула індексу:**

$$[I = w_1 \cdot \text{PC1} + w_2 \cdot \text{PC2}]$$

де напрямки компонент узгоджено так, щоб «більше = краще» (екологічні змінні інвертовано перед PCA або інтерпретовано зі знаком).

- **Перевірка чутливості:** варіація ваг на ± 0.1 змінює ранги лише у 3/15 проєктів на ± 1 позицію - рішення стійке.

- **Артефакти:**

- **JASP:** збережено .jasp-проєкт, таблиці навантажень, скріплет, біплет, звіт кластеризації, seed і версію ПЗ.
 - **Miro:** карта рішень (імпутація, вибір компонент, k, інтерпретації, ризики упередженості); пріоритизаційна дошка з топ-5.

Рішення

- **Short-list:** P02, P04, P01 - пріоритетні; P05 - резерв; P03 - вимагає екологічної реконфігурації перед інвестиціями.
- **Далі:** уточнити дані безпеки (інциденти) і перезапустити PCA з альтернативною стандартизацією (робастні масштаби, MAD).

Практичне заняття №6. Техніко-економічна оцінка та аналіз життєвого циклу біотехнологічних процесів.

Тривалість: 80 хвилин.

Компетентності: ІК, К12.

Програмні результати: ПР08, ПР17.

Передумови: базові знання економіки проєктів; уявлення про масо-енергетичні баланси; володіння електронними таблицями.

Інструменти: Excel/Google Sheets для TEA; RStudio Cloud (опційно) для графіків чутливості; Miro/Trello для мапи системи; шаблони TEA/LCA у PDF; демо-база факторів характеристики для LCA (надана в курсі)

Попередня підготовка.

- **Прочитати:** 2–3 сторінки про структуру TEA (CAPEX, OPEX, NPV, IRR, PBP) та етапи LCA (FU, межі системи, LCI, LCIA).
- **Переглянути:** 5–7-хв відео-огляд «Що таке функціональна одиниця та межі системи».
- **Підготувати:** встановлений доступ до Sheets/Excel; акаунт у Miro/Trello; завантажити стартовий набір даних (CSV).
- **Сформулювати:** дослідницьке питання на 2–3 речення щодо порівняння двох технологічних альтернатив.

Вступ (10 хв).

- **Мотивація:** як приймати рішення про масштабування біопроцесу, якщо протокол із вищим виходом має гірший вуглецевий слід.
- **Цілі:** побудувати прозору TEA-модель, виконати базовий LCA «від колиски до воріт», синтезувати рішення з урахуванням компромісів «вартість–екологія–соціум».
- **Ролі (3–4 особи):** фінансовий аналітик (TEA); LCA-аналітик; координатор даних/документації; рецензент рішень.

Теоретичний блок (15 хв).

- **TEA - ключові поняття:** CAPEX; OPEX; собівартість одиниці продукції; дисконтована вартість, чиста теперішня вартість (NPV), внутрішня норма дохідності (IRR), строк окупності (PBP), еквівалентна річна вартість (EAC).

- **LCA - ключові поняття:** функціональна одиниця (FU); межі системи (cradle-to-gate); правила відсікання (cut-off); інвентаризація (LCI); оцінка впливу (LCIA: GWP, водокористування тощо); алокація (масова/енергетична/економічна); невизначеність і чутливість.

- **Міні-формули:**

- **NPV:**

$$[\mathrm{NPV} = \sum_{t=0}^n \frac{CF_t}{(1+r)^t}]$$

- **Коефіцієнт відновлення капіталу (CRF):**

$$[\mathrm{CRF} = \frac{r(1+r)^n}{(1+r)^n - 1}]$$

- **Собівартість одиниці:**

$$[C_{\text{unit}}] = \frac{\mathrm{OPEX}_{\text{річний}} + \mathrm{CAPEX} \cdot \mathrm{CRF}}{Q_{\text{річний}}}]$$

- **Демонстрація:** структура TEA-таблиці (CAPEX, OPEX, випуск, ціна); мапа LCA-системи в Міро; LCI-таблиця й застосування факторів характеристизації (набори курсу).

Практична вправа (30 хв).

- **Дані (надані):** 1 кг цільного продукту (FU). Дві альтернативи ферментації (А, В). Для кожної: витрати глюкози (кг), амонію (кг), електроенергії (кВт·год), пари (МДж), води (м³), утилізації відходів (кг); ціни ресурсів; CAPEX (тис. \$), життєвий цикл обладнання (n років), ставка дисконту (r); річний випуск ($Q_{\text{річний}}$); соціальні показники (робочі місця/інциденти на 200 тис. год)
- **Крок 1 - постановка LCA:**
 - **FU:** 1 кг продукту; **межі системи:** від колиски до воріт (сировина → виробництво → відходи)
 - **Алокація:** економічна (за замовчуванням курсу) у випадку ко-продуктів.
- **Крок 2 - LCI і LCIA:**
 - **LCI:** нормувати всі потоки на 1 кг; зібрати в таблицю «вхід/вихід».
 - **LCIA:** застосувати фактори характеристизації (GWP100, водокористування) з наданої таблиці; отримати показники впливу для А і В.
- **Крок 3 - TEA:**

- **Змінні витрати:** сировина, енергія, утилізація → у перерахунку на 1 кг.
- **Постійні витрати:** персонал, обслуговування (як % CAPEX/OPEX - надано).
- **Річна собівартість:** використати CRF для CAPEX; обчислити (C_{unit}) для A і B.
- **Крок 4 - чутливість і сценарії:**
 - **Сценарій S1:** +10% ціни електроенергії; **S2:** –5% виходу (врожайності); **S3:** +15% вартості утилізації
 - **Візуалізація:** «павутина» (spider) для (C_{unit}); 2D-мапа «вартість vs GWP» із виділенням Парето-фронту.
- **Крок 5 - інтегроване рішення:**
 - **Правило вибору:** домінує Парето або компроміс із порогами: ($C_{\text{unit}} \leq$) ціль, GWP - мінімально з можливих при виконанні цілі
 - **Артефакти:** файл TEA/LCA в Sheets/Excel; мапа системи в Migo; аналітична записка (150–200 слів).

Обговорення й peer-review (15 хв).

- **Презентації команд:** біплот «вартість–GWP» чи таблиця Парето; ключові припущення; короткий сценарний висновок
- **Peer-review:** перевірка коректності FU та меж; обґрунтування алокації; прозорість факторів характеристики; логіка сценаріїв.
- **Узагальнення:** колективний список «червоних прапорців» (типові помилки - змішані межі, подвійний рахунок, некоректний CRF).

Підсумки та домашнє завдання (10 хв).

- **Ключові висновки:** значення FU та меж системи; прозорість припущень у TEA; необхідність спільного читання економічних і екологічних метрик
- **Домашнє завдання:** застосувати той самий конвеєр до власного кейсу або варіанта з датасету курсу; здати файл TEA/LCA, 1 графік чутливості, аналітичну записку з ризиками й обмеженнями; фіксувати версії ПЗ і джерела факторів

Критерії оцінювання.

- **Коректність постановки LCA:** чітка FU; межі системи; валідна алокація; відсутність подвійного рахунку.
- **Якість ТЕА-розрахунків:** правильне застосування CRF; повна структура витрат; коректний (C_{unit}).
- **Чутливість і сценарії:** доречні сценарії; інтерпретовані графіки; висновки про стійкість рішень.
- **Інтегроване рішення:** логічний вибір на основі Парето або порогів; прозоре обґрунтування.
- **Відтворюваність:** упорядкований файл; підписані аркуші; фіксація параметрів; карта системи в Miro/Trello.
- **Комунікація:** чіткість презентації; відповіді на зауваження peer-review; лаконічна аналітична записка.

ЗВІТ З ПРАКТИЧНОГО ЗАНЯТТЯ №6 (ПРИКЛАД)

Тема: Техніко-економічна оцінка та аналіз життєвого циклу біотехнологічних процесів.

Загальні налаштування кейсу:

- **Функціональна одиниця:** 1 кг цільового продукту.
- **Межі системи:** від колиски до воріт (сировина → виробництво → утилізація відходів).
- **Альтернативи:** А (базовий протокол), В (модифікований протокол з вищою врожайністю, але іншими енергетичними профілями).
- **Алокація:** не потрібна (ко-продукти відсутні).
- **Артефакти:** ТЕА-модель у Sheets/Excel; LCA-таблиця (LCI/LCIA); коротка аналітична записка.

Вхідні дані та фактори.

Таблиця 1. Потіки на 1 кг продукту та економічні параметри

Потік	Одиниця	A	B	Ціна/тариф
Глюкоза	кг	2.5	2.2	0.48 \$/кг
Джерело амонію	кг	0.15	0.18	0.25 \$/кг
Електроенергія	кВт·год	5.5	4.0	0.12 \$/кВт·год
Пара	МДж	15	12	0.008 \$/МДж
Вода процесна	м³	0.25	0.35	0.90 \$/м³
Утилізація відходів	кг	0.30	0.40	0.20 \$/кг

Додатково для ТЕА: CAPEX(A)=1.8 млн \$, CAPEX(B)=2.2 млн \$, ставка дисконту ($r=10\%$), строк служби ($n=10$) років, річний випуск

(Q_{\text{пiчний}}=500\{, \}000) кг/рік, обслуговування 4% CAPEX/рік, персонал і накладні: A=350 тис. \$/рік, B=380 тис. \$/рік.

Таблиця 2. Фактори характеристикації для LCIA (GWP100 і водокористування)

Потік	Одиниця	GWP100 (кг CO ₂ e/од.)	Водокористування
Глюкоза	кг	0.80	-
Джерело амонію	кг	2.50	-
Електроенергія (середня мережа)	кВт·год	0.45	-
Пара (природний газ)	МДж	0.056	-
Вода процесна	м ³	0.30	1.0 м ³ /м ³
Утилізація відходів	кг	0.10	-

LCI і LCIA.

Нормування LCI.

- **Підхід:** усі потоки вже нормовані на 1 кг продукту (FU).
- **Перевірка меж:** лише «від колиски до воріт», без фаз використання/кінця життя.

Розрахунок LCIA.

- **GWP100, кг CO₂e/кг продукту:**
 - A: глюкоза 2.00 + амоній 0.375 + електроенергія 2.475 + пара 0.84 + вода 0.075 + відходи 0.03 = 5.795.
 - B: глюкоза 1.76 + амоній 0.45 + електроенергія 1.80 + пара 0.672 + вода 0.105 + відходи 0.04 = 4.827.
- **Водокористування, м³/кг продукту:** A: 0.25; B: 0.35.

Підсумок LCIA.

Показник	A	B
GWP100, кг CO ₂ e/кг	5.795	4.827
Водокористування, м ³ /кг	0.25	0.35

Висновок LCIA: B має нижчий вуглецевий слід, але більше водоспоживання; A - навпаки.

ТЕА.

Параметри та формули

- **Коефіцієнт відновлення капіталу (CRF):**

$$[\mathrm{CRF}] = \frac{r(1+r)^n}{(1+r)^{n-1}} \quad [r=0.10,; n=10 \rightarrow (1+r)^{10} \approx 2.5937,; \mathrm{CRF} \approx 0.162745]$$

- **Собівартість одиниці продукції:**

$$[C_{\text{unit}} = \frac{\text{OPEX}}{\text{річний}} + \text{CAPEX} \cdot \text{CRF} \cdot Q_{\text{річний}}]$$

Розрахунок OPEX і C_{unit}.

- **Змінні витрати на 1 кг (за Табл. 1):**
 - A: 2.3025 \$/кг; B: 2.092 \$/кг.
- **Річні змінні витрати:**
 - A: 1,151,250 \$/рік; B: 1,046,000 \$/рік.
- **Фіксовані витрати/рік:**
 - Обслуговування: A=72,000; B=88,000.
 - Персонал і накладні: A=350,000; B=380,000.
- **OPEX річний:**
 - A: 1,573,250; B: 1,514,000.
- **Річна еквівалентна CAPEX:**
 - A: (1.8 млн · 0.162745) ≈ 292,941 \$/рік.
 - B: (2.2 млн · 0.162745) ≈ 358,039 \$/рік.
- **Собівартість одиниці (C_{unit}):**
 - A: ((1,573,250 + 292,941) / 500,000) ≈ 3.73 \$/кг.
 - B: ((1,514,000 + 358,039) / 500,000) ≈ 3.74 \$/кг.

Підсумок ТЕА.

Компонент	A	B
Змінні витрати, \$/кг	2.3025	2.0920
OPEX річний, \$	1,573,250	1,514,000
Еквівалентна CAPEX/рік, \$	292,941	358,039
Собівартість C _{unit} , \$/кг	3.73	3.74

Висновок ТЕА: А трохи дешевший за одиницю продукції через нижчу CAPEX, попри вищу енергоємність.

Аналіз чутливості і сценарії.

Опис сценаріїв

- **S1 - +10% ціни електроенергії.**
- **S2 - -5% врожайності процесу (масо-енергетичні витрати на 1 кг зростають на 5%).**
- **S3 - +15% вартості утилізації відходів.**

Результати за собівартістю.

Сценарій	A: C_unit, \$/кг	B: C_unit, \$/кг	Перевага за вартістю	Зміна GWP
Базовий	3.73	3.74	A	-
S1: +10% електрики	≈ 3.80	≈ 3.79	B	без змін
S2: -5% врожайності	≈ 3.85	≈ 3.85	майже паритет	+5% обом
S3: +15% утилізації	≈ 3.74	≈ 3.76	A	без змін

Інтерпретація: за S1 вартісна перевага переходить до B, що посилює її екологічну привабливість (нижчий GWP). За S2 і S3 ранжування суттєво не змінюється.

Інтегрований вибір і Парето-аналіз.

- **Парето-фронт:** A має нижчу собівартість, B має нижчий GWP - жодна альтернатива не домінує.
- **Правило відбору:**
 - Якщо цільова собівартість ≤ 3.75 \$/кг і мінімізація GWP - пріоритет: обрати B (особливо за очікуваного зростання тарифів на електроенергію).
 - Якщо бюджет жорсткий і водний стрес у регіоні високий: обрати A (нижча ціна і менше прямих витрат води).
- **Резерв дій:** для B - енергоефективні двигуни/аерація; для A - оптимізація живлення для зменшення глюкози й кВт·год без росту CAPEX.

Аналітична записка.

У межах FU=1 кг та меж «від колиски до воріт» порівняно дві альтернативи ферментації. LCA показує, що B має нижчий вуглецевий слід (4.83 проти 5.80 кг CO₂e/кг) завдяки меншій електроенергії та парі, але споживає більше води (0.35 проти 0.25 м³/кг). ТЕА свідчить про майже рівну собівартість: 3.74 \$/кг (B) проти 3.73 \$/кг (A), де A виграє через нижчу CAPEX. Аналіз чутливості показав, що +10% ціни електроенергії робить B не тільки екологічно, а й економічно кращим (≈3.79 \$/кг проти ≈3.80 \$/кг для A). Падіння врожайності на 5% піднімає витрати обох альтернатив приблизно однаково, не змінюючи ранжування;

подорожчання утилізації відходів на 15% трохи гірше впливає на В, але не змінює висновків. За умов пріоритету кліматичних цілей і ризику зростання енерготарифів рекомендовано В із планом енергоефективних заходів. Якщо критичним є обмеження бюджету та водний дефіцит, рекомендовано А, паралельно ініціювавши проєкт зниження електроспоживання. Всі припущення прозорі; подвійного рахунку уникнуто; фактори характеристики та економічні параметри задокументовано.

Практичне заняття №7. Математичне моделювання, оптимізація та верифікація біопроектів.

Тривалість: 80 хвилин.

Компетентності: ІК, К11, К13.

Програмні результати: ПР09, ПР17.

Передумови: знання основ біохімії та мікробіології процесів; базове розуміння диференційних рівнянь; навички роботи з середовищами MATLAB, R або Python.

Інструменти: Python (SciPy, NumPy, Matplotlib), R (deSolve, ggplot2) або MATLAB; онлайн-інструмент Desmos для візуалізації; Miro для схеми моделі; стандартні шаблони для калібрування та верифікації.

Попередня підготовка.

- **Прочитати:** оглядові матеріали про типи математичних моделей біопроектів (статичні, динамічні, гібридні).
- **Вивчити:** приклад моделі Монода та модифікацій (Haldane, Andrews).
- **Ознайомитись:** із методами оптимізації (градієнтні, еволюційні, пошук по сітці).
- **Підготувати:** робоче середовище з встановленими бібліотеками для моделювання та оптимізації; набір експериментальних даних з курсу (формат CSV).

Вступ (10 хв).

- **Мотивація:** моделі дозволяють прогнозувати поведінку біопроекту без проведення десятків дорогих експериментів, але лише якщо вони коректно верифіковані.
- **Цілі:** побудувати математичну модель росту мікроорганізмів, виконати оптимізацію технологічних параметрів, провести верифікацію на незалежному наборі даних.
- **Ролі:** розробник моделі, аналітик оптимізації, верифікатор, координатор документації.

Теоретичний блок (15 хв).

- **Математична модель:**
 - Основні змінні: концентрація біомаси (X), субстрату (S), продукту (P).
 - Приклад: модель Монода

$$\left[\mu(S) = \mu_{\max} \frac{S}{K_S + S} \right] \left[\frac{dX}{dt} = \mu(S) X \right] \left[\frac{dS}{dt} = -\frac{1}{Y_{X/S}} \mu(S) X \right]$$

- Розширення: інгібування субстратом, продукційні моделі Ледерберга.
- **Оптимізація:** вибір цільової функції (максимум виходу продукту; мінімум часу процесу; баланс між витратами та виходом), вибір алгоритму.
- **Верифікація:** порівняння моделі з експериментальними даними, статистичні показники (R^2 , RMSE, MAE), візуальний аналіз залишків.
- **Приклад у Python:** симуляція ОДУ, побудова графіків, підбір параметрів методом найменших квадратів.

Практична вправа (30 хв).

- **Дані (надані):** набір (t, X, S, P) для двох умов культивування; 70% точок - для калібрування, 30% - для верифікації.
- **Крок 1 - постановка задачі:**
 - Вибір базової моделі (Монод / Халдейн)
 - Формулювання ОДУ системи; визначення початкових умов.
- **Крок 2 - калібрування:**
 - Використати `scipy.optimize.curve_fit` (Python) або `optim` (R) для підбору ($\mu_{\max}$), (K_S), ($Y_{X/S}$).
- **Крок 3 - оптимізація:**
 - Цільова функція: максимальний вихід продукту при обмеженні на мінімальне споживання субстрату.
 - Алгоритм: пошук по сітці (grid search) або диференціальна еволюція.
- **Крок 4 - верифікація:**
 - Перевірка моделі на відкладених даних; розрахунок R^2 , RMSE.
 - Побудова графіків «експеримент vs модель» для X, S, P.
- **Крок 5 - інтегрований висновок:**
 - Чи модель адекватна в прогнозах?
 - Чи оптимальні параметри реалістичні для впровадження?

Обговорення й peer-review (15 хв).

- **Презентація результатів:** графіки динаміки змінних; таблиця параметрів; оптимальні значення цільових показників.
- **Peer-review:** перевірка математичної коректності ОДУ; обґрунтування вибору алгоритму оптимізації; валідність верифікації.
- **Узагальнення:** список типових помилок (перенавчання моделі, використання неадекватних граничних умов, ігнорування залишкових аналізів).

Підсумки та домашнє завдання (10 хв).

- **Ключові висновки:**
 - Необхідність балансу між складністю моделі та якістю прогнозу.
 - Верифікація - критичний етап перед практичним застосуванням.
- **Домашнє завдання:**
 - Розширити модель додаванням стадії інгібування продуктом.
 - Повторити оптимізацію та порівняти нові параметри з базовими.
 - Здати файл коду, графіки та аналітичну записку (150–200 слів).

Критерії оцінювання:

- **Модель:** коректність рівнянь, логіка залежностей, обґрунтовані початкові умови.
- **Оптимізація:** обґрунтованість вибору цільової функції та алгоритму, інтерпретовані результати.
- **Верифікація:** використання незалежних даних, адекватні статистичні показники.
- **Презентація:** чіткість графіків, коректність підписів, структурованість записки.
- **Відтворюваність:** доступність коду, фіксація версій бібліотек.

ЗВІТ З ПРАКТИЧНОГО ЗАНЯТТЯ №7 (ПРИКЛАД)

Тема: Математичне моделювання, оптимізація та верифікація біопроцесів.

1. Налаштування кейсу і дані.

Постановка задачі.

- **Функціональна мета:** побудувати динамічну модель культивування, оцінити параметри, оптимізувати момент відбору проби та початкову концентрацію субстрату для максимізації продукції.
- **Об'єкт моделювання:** аеробна культивування з одним лімітуючим субстратом.
- **Змінні стану:** концентрації біомаси (X) [г/л], субстрату (S) [г/л], продукту (P) [г/л].
- **Дані:** два набори - для калібрування (70%) і для верифікації (30%); виміряні часові ряди (t, X, S, P).

Дані для калібрування:

t, год	X, г/л	S, г/л	P, г/л
0	0.50	15.0	0.00
2	0.90	14.2	0.08
4	1.55	12.9	0.21
6	2.45	11.1	0.39
8	3.60	8.8	0.62
10	4.80	6.4	0.86

Примітка: початкові умови для калібрування - (X₀=0.5) г/л, (S₀=15) г/л, (P₀=0) г/л.

Дані для верифікації:

t, год	X, г/л	S, г/л	P, г/л
3	1.20	16.6	0.14
6	2.40	14.2	0.38
9	3.90	11.2	0.68

Примітка: початкові умови для верифікації - (X₀=0.5) г/л, (S₀=18) г/л, (P₀=0) г/л.

2. Математична модель і калібрування.

Формулювання моделі:

- **Кінетика росту (Моно):**
$$\mu(S) = \mu_{\max} \frac{S}{K_S + S}$$
- **Система ОДУ:**

$$\left[\frac{dX}{dt}=\mu(S),X\right]\left[\frac{dS}{dt}=-\frac{1}{Y_{X/S}}\mu(S),X\right]\left[\frac{dP}{dt}=\alpha\mu(S),X\right]$$

- **Припущення:** однорідна система, сталий об'єм, продукція асоційована з ростом (параметр Людекінга–Піре - лише зростальна складова, без неасоційованої).

Калібрування параметрів.

- **Оцінювані параметри:** $(\mu_{\max})$ [1/год], (K_S) [г/л], $(Y_{X/S})$ [гX/гS], (α) [гP/гX].
- **Метод:** найменші квадрати надвиду «спільний фіт» для (X, S, P) з вагами за інверсією дисперсій вимірювань; інтегрування ОДУ з умовами калібрування.
- **Оцінки параметрів:**
 - **Максимальна питома швидкість:** $(\mu_{\max}=0.42)$ 1/год.
 - **Півнасичення субстратом:** $(K_S=0.12)$ г/л.
 - **Вихід біомаси за субстратом:** $(Y_{X/S}=0.50)$ гX/гS.
 - **Коефіцієнт продукції (асоційованої з ростом):** $(\alpha=0.20)$ гP/гX.
- **Якість апроксимації:**
 - **RMSE:** (X=0.18) г/л; (S=0.55) г/л; (P=0.05) г/л.
 - **(R²):** (X=0.985); (S=0.976); (P=0.982).
 - **Залишки:** випадкові, без тренду; слабка гетероскедастичність для (S) на пізніх часах.

3. Оптимізація.

Постановка задачі оптимізації

- **Змінні рішення:** початкова концентрація субстрату (S_0) [г/л] і час відбору (t_h) [год].
- **Цільова функція:** максимізувати кінцеву концентрацію продукту ($P(t_h)$).
- **Обмеження:**
 - **Залишковий субстрат:** $(S(t_h)\leq 1.0)$ г/л.
 - **Тривалість процесу:** $(6\leq t_h\leq 12)$ год.
 - **Технічний діапазон:** $(10\leq S_0\leq 22)$ г/л.

Алгоритм і результати

- **Алгоритм:** пошук по сітці для (S_0) з кроком 1 г/л і адаптивний пошук для (t_h) з кроком 0.1 год; моделювання з оціненими параметрами.

- **Оптимум:** ($S_0^{\star}=18$) г/л, ($t_h^{\star}=10.2$) год.
- **Показники в оптимумі:**
 - **Кінцевий продукт:** ($P^{\star}\approx 1.31$) г/л.
 - **Біомаса:** ($X^{\star}\approx 7.0$) г/л.
 - **Залишковий субстрат:** ($S^{\star}\approx 0.9$) г/л.
- **Порівняння з базою (15 г/л, 10 год):** (+15%) до (P) при дотриманні обмеження на (S).

Аналіз чутливості:

- **Варіація ($\mu_{\max}$) $\pm 10\%$:** оптимальний (t_h) зміщується на (∓ 0.6) год, ($P^{\star}$) змінюється на ($\mp 7\%$).
- **Варіація ($Y_{X/S}$) $\pm 10\%$:** змінює залишковий (S) на (∓ 0.2) г/л; оптимальний ($S_0^{\star}$) не виходить за 17–19 г/л.
- **Висновок:** оптимум стабільний у практичному діапазоні параметрів.

4. Верифікація на незалежних даних.

Методика

- **Дані:** набір «верифікація» з початковими умовами ($X_0=0.5$) г/л, ($S_0=18$) г/л, ($P_0=0$) г/л.
- **Процедура:** інтегрування моделі з фіксованими параметрами; порівняння з вимірюваннями; оцінка показників відповідності.

Результати верифікації:

- **RMSE:** ($X=0.22$) г/л; ($S=0.70$) г/л; ($P=0.06$) г/л.
- **(R^2):** ($X=0.976$); ($S=0.964$); ($P=0.971$).
- **Графічна діагностика:** паритетні графіки «експеримент vs модель» лежать поблизу діагоналі; залишки не корелюють із часом або рівнем змінних.
- **Висновок:** модель узгоджується з незалежними вимірюваннями; перенавчання не виявлено.

5. Інтегрований висновок і рекомендації.

Узагальнення.

- **Адекватність моделі:** проста модель Моно з продукцією, асоційованою з ростом, відтворює динаміку (X, S, P) з високою точністю в межах виміряних умов.
- **Оптимізаційне рішення:** ($S_0^{\star}=18$) г/л і ($t_h^{\star}=10.2$) год забезпечують найбільший (P) при

дотриманні обмежень; рішення є стійким до помірних варіацій параметрів.

- **Операційні дії:** затвердити регламент із цільовим ($S_0=18\text{ } \mu\text{m l}$) г/л, контроль harvest-критерію за online-оцінкою залишкового (S); валідувати на масштабі пілотної установки.

Артефакти, що здаються

- **Файл моделі:** інтеграція ОДУ, функції для калібрування та оптимізації, фіксація версій бібліотек.
- **Графіки:** траєкторії ($X(t)$, $S(t)$, $P(t)$); паритетні графіки; теплокарта ($P(S_0, t_h)$).
- **Записка (160–180 слів):** чітко викладені припущення, параметри, оптимум і ризику.

Практичне заняття №8. Імітація біореакторів і мультифізичні підходи для масштабування технологій.

Тривалість: 80 хвилин.

Компетентності: ІК, К9, К12.

Програмні результати: ПР08, ПР17

Передумови: знання гідродинаміки, основ масообміну, кінетики перенесення кисню; базові навички розрахунків у електронних таблицях.

Інструменти: Excel/Google Sheets для інженерних розрахунків; Міро для схем; опційно - Python/R для параметричних досліджень; шаблони для k_La /OTR та критеріїв масштабування.

Підготовка і вступ.

- **Прочитати:** огляд критеріїв масштабування (константні (P/V) , швидкість на кінчику лопаті, (k_{La}) , (Re) , (Fr)); базові кореляції для (k_{La}) у барботажних та мішалкових апаратах.
- **Переглянути:** короткий демо-розрахунок методу «динамічної дегазації» для оцінки (k_{La}) .
- **Підготувати:** паспортні дані лабораторного біореактора (T , D , тип імелера, (Po)), властивості бульйону (ρ, μ) , OUR цільного штаму.
- **Мотивація:** масштабування «1→100×» часто ламається об масоперенесення й змішування; мультифізичні критерії дозволяють керувати компромісами між (OTR), зсувним навантаженням та енерговитратами.
- **Цілі:** сформулювати маршрут масштабування 5 L → 500 L з явними допущеннями; перевірити життєздатність рішення за $(OTR \geq OUR)$, (t_{mix}) , зсувом і обмеженнями приводу.

Теоретичний блок.

Ключові величини та кореляції:

- **Витрата енергії:**
$$\left[\frac{P}{V} = \frac{Po \cdot \rho \cdot N^3 \cdot D^5}{V} \right]$$
- **Число Рейнольдса:**
$$\left[Re = \frac{\rho \cdot N \cdot D^2}{\mu} \right]$$
- **Швидкість на кінчику лопаті:**
$$\left[u_{tip} = \pi \cdot N \cdot D \right]$$

- **Об'ємний коефіцієнт масоперенесення:** типова кореляція для аерації мішалкових реакторів

$$[k_{La} = A \left(\frac{P}{V} \right)^{\alpha} u_g^{\beta}, \quad u_g = \frac{Q_g}{A_{\text{переріз}}}]$$
- **Швидкість перенесення кисню та баланс із споживанням:**

$$[OTR = k_{La} (C^* - C_L), \quad OTR \geq OUR]$$

Критерії масштабування.

- **Константне (P/V):** зберігає інтенсивність турбулентності й (k_{La}) (часто підвищує (u_{tip}) на масштабі).
- **Константний (u_{tip}):** контролює зсув, проте може просадити (k_{La}).
- **Константний (k_{La}):** безпосередній таргет на масоперенесення, вимагає кореляцій та/або експериментальної калібровки.
- **Додаткові числа:** ($Fr = N^2 D/g$) (антивихровий режим), (Po) (залежить від типу імелера і (Re)).

Практична частина.

Вихідні дані кейсу:

- **Лаб-реактор (5 L, робочий об'єм 4 L):** ($T=0.15$) м; ($D=0.05$) м; Rushton, ($Po=5.0$); ($\rho=1000$) кг/м³; ($\mu=2$) мПа·с; ($N=7$) с⁻¹; ($Q_g=2$) vvm.
- **Пілот (500 L, робочий об'єм 400 L):** ($T=0.75$) м; пропелер: Rushton $\times 2$, ($D/T=0.33$); привід до 4 кВт; ліміт ($u_{\text{tip}} \leq 4.5$) м/с.
- **Кінетика кисню:** ($C^* - C_L = 6$) мг/л; **OUR:** 120 ммоль O₂ / (L·h).
- **Емпіричні показники:** ($A=0.5$), ($\alpha=0.7$), ($\beta=0.4$) для даної системи.

Кроки виконання:

1. **Розрахунок базових показників 5 L.**
 - (**P/V**): обчислити за формулою; (**Re**): перевірити режим турбулентності; (**k_{La}**): із кореляції; (**OTR**) і запас до (**OUR**).
2. **Вибір критерію масштабування.**
 - **Гіпотеза 1:** константне (P/V) для збереження (k_{La}).
 - **Гіпотеза 2:** константний (u_{tip}) для обмеження зсуву.

- **Гіпотеза 3:** таргетований (k_{La}) із корекцією (Q_g) і (N).
- 3. **Підбір параметрів 500 L.**
 - **Обмеження:** ($u_{\text{tip}} \leq 4.5$) м/с; ($P \leq 4$) кВт; ($Fr \geq 1$) (без воронки).
 - **Вихідні:** знайти (N) і (Q_g) такі, щоб ($OTR \geq OUR$) і виконувались обмеження.
- 4. **Оцінка змішування та зсуву.**
 - **Час змішування:** використати кореляцію ($t_{\text{mix}} \propto N^{-1} \left(\frac{T}{D} \right)^3$) (коефіцієнт - із шаблону курсу).
 - **Зсув:** порівняти (u_{tip}) із допустимим для клітин (відомий поріг із кейсу).
- 5. **Сценарний аналіз.**
 - **S1:** -20% ($C^{\text{ast}} - C_L$) (тепліша вода/солі).
 - **S2:** +30% OUR у фазі експоненти.
 - **S3:** зниження (μ) до 1 мПа·с (ферментний бульйон).

Приклад проміжних результатів:

- **5 L:** високий (Re) (турбулентний режим), (k_{La}) достатній для ($OTR \gtrsim OUR$) із запасом 10–15%.
- **500 L, константне (P/V):** дає (N) вище ліміту приводу; потрібне підвищення (Q_g) та імпульсна модифікація (додавання розсікача/другого рівня).
- **500 L, таргетований (k_{La}):** досяжно при помірному (N), ($Q_g \approx 0.8$) vvm, ($u_{\text{tip}} \leq$) ліміту; (t_{mix}) у межах техзавдання.

Верифікація рішення:

- **k_{La} -тест:** «динамічна дегазація» в 500 L для підтвердження розрахункових (k_{La}).
- **Трейсерне змішування:** імпульс солі/кислоти, оцінка (t_{mix}) за 95% однорідності.
- **Кисневе навантаження:** порівняння (DO)-трендів із розрахованим запасом ($OTR - OUR$).

5. Обговорення, підсумки та домашнє завдання.

- **Презентація команд:** обраний критерій масштабування; розраховані (N , Q_g , P/V , u_{tip}), k_{La} , OTR);

результати сценаріїв; карта ризиків (піноутворення, ерозія бульбашок, CO₂ -накопичення)

- **Peer-review:** коректність використання кореляцій; обґрунтованість меж і допущень; узгодженість одиниць; прозорість розрахунку запасу щодо (OUR)
- **Ключові висновки:** мультифізичний підхід = паралельний контроль гідродинаміки, масоперенесення і механобіологічних ризиків; масштабування - це вибір компромісів, а не «один правильний» критерій
- **Домашнє завдання:**
 - **Варіант А:** повторити розрахунки для біореактора 2,000 L із двома альтернативними імелерами (Rushton vs pitched-blade) і порівняти необхідні (N , Q_g) за таргетом ($OTR_{ge\ OUR}$).
 - **Варіант В:** змодельовати вплив підвищення в'язкості до 5 мПа·с на (Re , k_{La} , t_{mix}) та перерахувати оптимум.
 - **Артефакти:** файл розрахунків, графік «(OTR) проти (OUR)» для сценаріїв, коротка записка (150–200 слів) із припущеннями й межами застосовності.
- **Критерії оцінювання:**
 - **Коректність розрахунків:** консистентні (P/V , Re , u_{tip} , k_{La} , OTR); відсутність одиничних помилок; явні припущення
 - **Вибір критерію масштабування:** логічне обґрунтування, перевірка обмежень приводу й зсуву
 - **Сценарний аналіз:** доречні сценарії, інтерпретація впливу на (OTR) та (t_{mix})
 - **Верифікація:** план експериментального підтвердження (k_{La}) і змішування; критерій успіху
 - **Комунікація:** чіткі графіки/таблиці, лаконічна записка, відповіді на зауваження peer-review

Практичне заняття №9. Управління проєктами, аналіз ризиків і прийняття рішень у дослідницьких та виробничих експериментах.

Тривалість: 80 хвилин.

Компетентності: ІК, К01, К09, К12.

Програмні результати: ПР03, ПР04, ПР08, ПР17.

Передумови: базові знання планування експериментів, розуміння метрик якості/безпеки, навички командної взаємодії.

Опційні інструменти: електронні таблиці для підсумкового підрахунку, простий калькулятор; без необхідності спеціалізованого ПЗ.

Хід воркшопу:

Вступ і постановка проєкту - 10 хв.

- **Кейс:** запуск 6-тижневого експерименту з оптимізації ферментації на 50 L із двома альтернативами живлення; обмеження - бюджет, час, біобезпека, доступність обладнання.
- **Артефакт:** коротка декларація проєкту (ціль, критерії успіху, припущення, обмеження).
- **Прив'язка:** ІК, К01 → ПР08.

Планування робіт (WBS, RACI) - 10 хв.

- **WBS:** декомпозиувати на етапи: підготовка середовищ, кваліфікація обладнання, проведення серій, аналіз даних, звіт.
- **Ролі:** RACI на ключові задачі (хто відповідає, хто виконує, кого консультуємо, кого інформуємо).
- **Прив'язка:** ІК, К01, К12 → ПР08.

Реєстр і оцінка ризиків - 20 хв.

- **Ідентифікація:** не менше 8 ризиків різних типів (технічні, організаційні, регуляторні, безпекові, постачання).
- **Оцінка:** присвоїти бали ймовірності і впливу (1–5), розрахувати показник ризику
 - $[R = P \times I]$
- **Матриця:** розмістити ризики, визначити «червону зону», обрати стратегії реагування (уникнення, зниження, передання, прийняття).

- **Тригери та власники:** для 3 найвищих ризиків визначити тригерні події і відповідальних.
- **Прив'язка:** ІК, К09, К12 → ПР17.

Варіанти рішень і вибір під невизначеністю - 25 хв.

- **Сформуувати альтернативи:**
 - **А:** одна серія/тиждень, глибока аналітика, мінімальний ризик контамінації.
 - **В:** дві серії/тиждень, швидше, але вище навантаження на команду і ризик браку.
 - **С:** послідовна стратегія: пілот 2 тижні → масштабування.
- **Критерії оцінки:** надійність, час до результату, прямі витрати, ризик безпеки, вплив на подальше масштабування.
- **Метод вибору (на вибір команди):**
 - **АНР/TOPSIS:** ваги критеріїв визначаються консенсусом; підрахунок інтегрального бала.
 - **Дерево рішень + очікувана цінність:** для ключового ризику (контамінація/відмова обладнання) задати гілки з імовірностями і наслідками; обрати максимальну очікувану цінність.
- **Перевірка реалістичності:** зіставити вибір із обмеженнями кейсу (людські ресурси, календар, бюджет, регуляція).
- **Прив'язка:** ІК, К09 → ПР04, ПР17.

Економіко-екологічна дооцінка і план контролю - 15 хв.

- **Коротко/довго строкові наслідки:** для обраної альтернативи оцінити прямі витрати, використання ресурсів, потенційні екологічні наслідки і соціальні ризики (через карту зацікавлених сторін).
- **Контрольні точки:** визначити 3 контрольні події (go/hold), пов'язані з метриками якості/безпеки, і план ескалації.
- **Комунікація:** хто, що, коли і як повідомляє (канали, частота, формат протоколів).
- **Прив'язка:** ІК, К12 → ПР03, ПР08.

Артефакти, що здаються.

- **Декларація проєкту:** мета, критерії успіху, обмеження, припущення.
- **WBS + RACI:** одна сторінка із чіткими відповідальностями.

- **Реєстр ризиків:** таблиця з P, I, (R), стратегіями реагування, тригерами, власниками.
- **Картка рішення:** опис альтернатив, критерії/ваги, обраний метод (АНР/TOPSIS або дерево рішень), розрахунок і обґрунтування.
- **План контролю:** контрольні точки, сигнали зупинки, канали комунікації, частота звітності.

ЗВІТ З ПРАКТИЧНОГО ЗАНЯТТЯ №9 (ПРИКЛАД)

Тема: Управління проєктами, аналіз ризиків і прийняття рішень у дослідницьких та виробничих експериментах.

1. Постановка кейсу.

Мета: провести серію експериментів з оптимізації біореакційного процесу у 20 L ферментері за двома технологічними сценаріями, обмеження: термін 5 тижнів, бюджет 7 000 \$, наявні ресурси лабораторії.

Ключові умови:

- **Зовнішні фактори:** можливі перебої з постачанням поживних компонентів; перевірка обладнання у 3-му тижні.
- **Учасники:** координатор проєкту, інженер з обладнання, біотехнолог-аналітик, фахівець з охорони праці та біобезпеки.
- **Очікувані результати:** обґрунтований вибір сценарію, задокументований план реагування на ризики, фінальний звіт з економіко-екологічною оцінкою.

2. Етап 1 - Планування та WBS (10 хв).

WBS (декомпозиція робіт):

1. Підготовка середовищ та реагентів.
2. Кваліфікація ферментера та допоміжного обладнання.
3. Проведення експериментів (серія 1 і серія 2).
4. Аналітичні вимірювання (HPLC, pH, DO, оптична густина).
5. Обробка й аналіз даних.
6. Формування висновків та звіт.

RACI-матриця для етапів: у таблиці зафіксовано, хто відповідає (R), хто затверджує (A), кого консультують (C), кого інформують (I).

3. Етап 2 - Ідентифікація та оцінка ризиків (20 хв).

Реєстр ризиків (фрагмент):

№	Ризик	Тип	P (1 – 5)	I (1 – 5)	R=P ×I	Стратегія реагування	Власник	Тригерна подія
1	Вихід з ладу насоса подачі повітря	Технічний	3	5	15	Зниження (резервний насос)	Інженер	Шум/вібрація > допустимого
2	Затримка постачання субстрату	Логістичний	4	4	16	Передача (альтернативний постачальник)	Координатор	Повідомлення від постачальника про відтермінування
3	Контамінація культури	Біобезпечовий	2	5	10	Уникнення (посилена стерилізація)	Біотехнолог	Позитивний результат тесту на сторонні мікроорганізми
4	Перевищення бюджету	Фінансовий	2	4	8	Прийняття (резерв 5%)	Координатор	Перевитрата за статтею закупівель >10%

P - ймовірність; **I** - вплив; **R** - показник ризику.

4. Етап 3 - Аналіз і вибір рішення (25 хв).

Альтернативи проведення експериментів:

- **Сценарій А:** одна серія/тиждень, мінімальний ризик помилок, але довший термін до результату.
- **Сценарій В:** дві серії/тиждень, швидше отримання даних, вищі трудові навантаження та ризик помилок.
- **Сценарій С:** комбінований підхід - тестова серія, корекція, потім прискорений цикл.

Метод вибору: АНР (Analytic Hierarchy Process).

Критерії та ваги (у відсотках):

- Надійність - 35 %
- Час до результату - 25 %
- Прямі витрати - 20 %
- Ризик безпеки - 20 %

Оцінка альтернатив (шкала 1–9):

Критерій	Вага	А	В	С
Надійність	0.35	9	6	8
Час	0.25	5	9	7
Витрати	0.20	8	6	7
Безпека	0.20	9	5	8

Інтегральні бали:

- A = 8.05
- B = 6.85
- C = 7.65

Висновок: обрано Сценарій А як найбільш збалансований за критеріями, особливо з урахуванням високої надійності та безпеки.

5. Етап 4 - Економіко-екологічна дооцінка та план контролю (15 хв).

Дооцінка:

- **Короткострокові наслідки:** стабільність розкладу, рівномірне навантаження на команду, контроль витрат у межах бюджету.
- **Довгострокові наслідки:** нижчий ризик повторних експериментів, менший екологічний слід (менше енергоспоживання та відходів).

Контрольні точки (go/hold):

1. Після калібрування обладнання (1-й тиждень) - go/hold.
2. Після аналізу середини проєкту (3-й тиждень) - корекція або продовження.
3. Перед завершальною серією (5-й тиждень) - ухвалення фінальної серії.

Карта комунікації:

- Щотижневі 15-хвилинні стендапи для команди.
- Письмові звіти у внутрішньому репозиторії.
- Ескаляція до керівництва при перевищенні ризикового індексу $R \geq 15$.

6. Підсумок

- **Досягнуто:** структуроване планування (WBS, RACI), валідний реєстр ризиків, обґрунтований вибір альтернативи, економіко-екологічна дооцінка, план контролю.

Практичне заняття №10. Наукові звіти, презентації та академічна доброчесність.

Тривалість: 80 хвилин.

Компетентності: ІК, К01, К09, К12.

Програмні результати: ПР03, ПР04, ПР08, ПР17.

1. Мета, узгодження та очікувані результати.

- **Мета:** сформувати навички підготовки наукового звіту й презентації з доказовою структурою та дотриманням академічної доброчесності.
- **Що опануємо:** IMRaD-логіку, якісні рисунки і таблиці, усну й слайдову комунікацію, коректні посилання, етичні заяви, уникнення недоброчесних практик.
- **Узгодження з компетентностями/ПРН:**
 - **ІК, К01:** планування та проведення звітності досліджень → **ПР08.**
 - **К09:** критичний аналіз даних і прозора звітність → **ПР03, ПР17.**
 - **К12:** інтерпретація результатів і обґрунтовані висновки → **ПР03, ПР17.**

2. Передумови, інструменти та підготовка.

- **Передумови:** базове розуміння структури наукових текстів; навички роботи з таблицями/графіками; знання правил цитування.
- **Інструменти (без фокусування на ПЗ):**
 - **Друковані шаблони:** IMRaD, чек-лист якості рисунків, чек-лист доброчесності, рубрика оцінювання презентації.
 - **Матеріали:** зразок звіту (1 стор.), набір сирих даних і рисунків для редагування, приклади етичних заяв.
 - **Опційно:** Zotero/Mendeley (для прикладу керування бібліографією), PowerPoint/Keynote/Canva (для слайдів).
- **Попередня підготовка:** короткий гайд (2–3 стор.) про IMRaD, типові помилки у візуалізаціях, основи академічної доброчесності; добір 5 релевантних джерел до свого міні-дослідження.

3. Хід воркшопу.

3.1 Вступ 10 хв.

- **Мотивація:** недоброчесна або неякісна звітність знецінює навіть сильні дані; якісні тексти/слайди підсилюють рішення і впровадження.
- **Цілі:** створити міні-звіт (1 стор.), підготувати 5-слайдову презентацію, заповнити чек-лист доброчесності.

3.2 Теоретичний блок 15 хв.

- **Структура IMRaD:**
 - **Вступ:** проблема, мета, новизна; 3–5 джерел.
 - **Матеріали та методи:** відтворюваність, одиниці СІ, контроль/репліки.
 - **Результати та обговорення:** цифри + інтерпретація; межі валідності.
 - **Висновки:** відповідь на мету; наступні кроки.
- **Рисунки і таблиці (мінімальні стандарти):** зрозумілі осі з одиницями; адекватні шкали; 95% ДІ або інша невизначеність; уникати «веселкових» колормепів; лінійне/лог-масштабування з обґрунтуванням; повні підписи (що, де, як, n).
- **Академічна доброчесність:** плагіат/самоплагіат; фабрикація/фальсифікація; маніпуляція зображеннями; авторство та внесок; конфлікт інтересів; етичні дозволи (ЕТК/інформована згода); коректне цитування; уникнення хижацьких практик.

3.3 Практична справа 30 хв.

- **Завдання 1 - міні-звіт (1 стор.):**
 - **Формат:** заголовок, коротка анотація (70–100 слів), IMRaD-ядро, 1 рисунок або 1 таблиця, 3–5 джерел.
 - **Чек-лист:** ясна мета; методи відтворювані; цифри з одиницями; невизначеність подана; висновок відповідає меті.
- **Завдання 2 - рисунок і підпис:**
 - **Редагування:** шрифт ≥ 10 pt; кольори з достатнім контрастом; легенда без дублювань; масштаб/штрих-бар, якщо доречно.
 - **Підпис:** що зображено; ключові параметри/статистика; умови; n; позначення значущості.

- **Завдання 3 - презентація (5 слайдів):**
 - **Структура:** проблема → підхід → ключовий результат → сенс/обмеження → висновок/наступні кроки.
 - **Правила:** 1 меседж на слайд; мінімум тексту; читабельні графіки; усний таймінг 3–4 хв.
- **Завдання 4 - доброчесність (мікрокейс):**
 - **Ситуація:** підозра на «підмальовані» смужки на Western blot / неповне цитування.
 - **Дія:** описати кроки перевірки, як коректно виправити й задокументувати (версування, пояснювальна примітка, оновлений рисунок).

3.4 Peer-review 15 хв.

- **Обмін і рецензування:** кожна пара обмінюється звітами й слайдами; застосовує рубрику (ясність, достовірність, доброчесність, дизайн).
- **Збір фідбеку:** 2 сильні сторони + 1 покращення; фіксація змін у версії «v1.1».

3.5 Підсумки 10 хв.

- **Рефлексія:** що саме посилює переконливість (структура, цифри, візуал).
- **Домашнє завдання:** доробити повний звіт (2–3 стор.) з розширеною бібліографією; підготувати 7–8-слайдову версію, додати етичні заяви (конфлікт інтересів, дозвіл ЕТК/інформована згода, дані/код).

4. Артефакти та оцінювання.

- **Що здаємо:**
 - **Міні-звіт (1 стор.)** у форматі IMRaD з 1 рисунком/таблицею.
 - **5-слайдову презентацію** (PDF або роздруковані слайди).
 - **Заповнені чек-листи:** якості рисунка і доброчесності; форма peer-review.
- **Критерії оцінювання:**
 - **Структура й логіка:** відповідність IMRaD; ясність мети й висновків.
 - **Дані та візуалізації:** коректні одиниці; невизначеність; читабельний дизайн.

- **Добро́чесність:** прозорі джерела; відсутність «косметичних» маніпуляцій; етичні заяви доречні й повні.
- **Кому́нікація:** лаконічність; один меседж на слайд; відповідність часу.
- **Ві́дтворюва́ність:** чіткі методи; посилання на дані/код (за наявності); версування («v1.0», дата).

ЗВІТ З ПРАКТИЧНОГО ЗАНЯТТЯ №10 (ПРИКЛАД)

Тема: Наукові звіти, презентації та академічна доброчесність.

Проект: Ефективність біоплівкового реактора для видалення амонію зі штучних стічних вод: міні-дослідження.

Анотація (90 слів)

Метою було оцінити ефективність лабораторного біоплівкового реактора для видалення амонію залежно від гідравлічного часу перебування. У трьох режимах (2, 4, 8 год) ми виміряли вихідні концентрації амонію на вході й виході, обчислили відсоток видалення, невизначеність і перевірили різницю між режимами. Реактор із носіями забезпечив зростання середнього видалення від 41% (2 год) до 82% (8 год); різниця між 4 і 8 год статистично значуща, ефект середній. Звіт містить відтворювані методи, прозорі одиниці вимірювання та межі валідності. Наведено етичні заяви, форму внеску авторів і політику даних.

Вступ.

- **Проблема:** амоній у стічних водах спричиняє біогенне забруднення та евтрофікацію; ефективне біологічне нітрифікаційне вилучення - ключ до дотримання нормативів.
- **Мета:** оцінити, як гідравлічний час перебування впливає на видалення амонію в біоплівковому реакторі з рухомими носіями.
- **Новизна/цінність:** короткий, відтворюваний протокол оцінювання для навчальної лабораторії з чітким урахуванням невизначеності та стандартів звітності.

Матеріали та методи.

- **Установка:** реактор 1,0 L із полімерними носіями (заповнення 40%), аерація до 6–7 mg/L DO, $t = 22\text{--}23\text{ }^{\circ}\text{C}$.

- **Режими:** гідравлічний час 2, 4, 8 год; у кожному режимі три біологічні репліки, ($n=3$).
- **Аналітика:** амоній - фотометрія (метод Nessler), калібрування 0–10 mg/L; контроль бланку; повторюваність оцінена як SD трьох вимірювань.
- **Метрики:** відсоток видалення = $(C_{in}-C_{out})/C_{in} \cdot 100\%$; оцінено ($\bar{x} \pm SD$). Для порівнянь - двовибірковий t-тест з ($\alpha=0.05$) і перевіркою нормальності (Shapiro–Wilk).
- **Відтворюваність:** описані об'єм, час, температура, DO, препарат реактивів, калібрувальні криві; надано сирі дані та шаблон обчислень.

Результати та обговорення.

- **Ефективність:** 2 год - $41\% \pm 6\%$; 4 год - $63\% \pm 5\%$; 8 год - $82\% \pm 4\%$ (середнє $\pm$ SD). Різниця 4 vs 8 год: ($p=0.012$), середній ефект (Cohen's $d \approx 0.9$).
- **Інтерпретація:** збільшення часу перебування покращує масоперенесення й стабільність нітрифікації, але спостерігається зменшення приросту ефективності після 8 год (потенційна межа насичення).
- **Обмеження:** синтетична матриця без інгібіторів; короткий час адаптації біоплівки; відсутність контролю за вмістом органіки - екстраполяція до реальних стічних вод обмежена.

Висновки.

- **Висновок 1:** збільшення гідравлічного часу з 2 до 8 год підвищує видалення амонію приблизно на 41 процентний пункт.
- **Висновок 2:** режим 8 год забезпечує статистично значуще краще очищення порівняно з 4 год при лабораторних умовах.
- **Наступні кроки:** перевірити матриці з органікою, варіювати навантаження по амонію, оцінити стабільність за 10–14 днів.

Презентація на 5 слайдів - контент і нотатки спікера

Слайд 1. Проблема.

- **Меседж:** Амоній у стічних водах потребує ефективного біологічного видалення.

- **Нотатки:** Коротко про наслідки для довкілля і нормативи; контекст навчальної лабораторії.

Слайд 2. Підхід.

- **Меседж:** Біоплівковий реактор з трьома режимами часу перебування.
- **Нотатки:** Установка, умови, метрики; чому саме такі режими.

Слайд 3. Ключовий результат.

- **Меседж:** Ефективність зростає від 41% до 82%; різниця 4 vs 8 год - значуща.
- **Нотатки:** Згадати ($\bar{x} \pm SD$), ($n=3$), ($p=0.012$); без перевантаження цифрами.

Слайд 4. Сенс і обмеження.

- **Меседж:** Більший час перебування підсилює нітрифікацію, але є межі застосовності.
- **Нотатки:** Матриця синтетична; потрібні тести на реальних стічних водах; потенційні інгібітори.

Слайд 5. Висновок і наступні кроки.

- **Меседж:** Режим 8 год - оптимальніший у наших умовах; план розширених випробувань.
- **Нотатки:** Запропонувати перевірку навантажень і триваліший період адаптації.

Етичні заяви.

- **Авторський внесок:** Студент А - дизайн і методи; Студент Б - аналітика й візуалізація; обидва - інтерпретація й написання.
- **Конфлікт інтересів:** відсутній.
- **Дозволи/етика:** дослідження не охоплює людей або тварин; погодження етичного комітету не потрібне.
- **Дані та код:** сирі дані, шаблон обчислень і лог змін надані у вигляді додатків; дозволено відтворення з атрибуцією.

Рекомендована література

1. Комп'ютерне моделювання в біології / упоряд. О. В. Оглобля, М. С. Мірошніченко, С. О. Костерін. Київ : Видавничий центр «Азбука», 2012. 120 с.

2. Горват А. А., Молнар О. О., Мінькович В. В. Методи обробки експериментальних даних з використанням MS Excel : навч. посіб. Ужгород : Вид-во УжНУ «Говерла», 2019. 160 с.

3. Кисляк С. В., Голуб Н. Б., Дуган О. М., Аверьянова О. А. Моделювання молекулярної взаємодії [Електронний ресурс] : підручник для студ. спец. 162 «Біотехнології та біоінженерія» / С. В. Кисляк ; КПІ ім. Ігоря Сікорського. Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2023. 203 с.

4. Privacy Preservation of Genomic and Medical Data / ed. Amit Kumar Tyagi. Hoboken ; Beverly : John Wiley & Sons, Inc. ; Scrivener Publishing LLC, 2024. 383 с. ISBN 978-1-394-21262-0 (Print), ISBN 978-1394213726 (Online). DOI: <https://doi.org/10.1002/9781394213726>

5. Handbook of Statistical Bioinformatics [Electronic resource] / edited by Henry Horng-Shing Lu, Bernhard Schölkopf, Martin T. Wells, Hongyu Zhao. 2nd ed. Berlin ; Heidelberg : Springer, 2022. VIII, 410 p. (Springer Handbooks of Computational Statistics). ISBN 978-3-662-65902-1 (eBook), ISBN 978-3-662-65901-4 (Hardcover). DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-662-65902-1>.

6. Recent Developments in Microbiology, Biotechnology and Pharmaceutical Sciences [Electronic resource] / edited by B. Sundaravadivazhagan, Sekar Mohan, Balakrishnaraja Rengaraju. – 1st ed. – London : CRC Press, 2025. – 1184 p. – ISBN 9781003618140 (eBook). – DOI: <https://doi.org/10.1201/9781003618140>.

7. Applied Biotechnology and Bioinformatics: Agriculture, Pharmaceutical Research and Environment [Electronic resource] / edited by Hrudayanath Thatoi, Sonali Mohapatra, Swagat Kumar Das, Sukanta Kumar Pradhan. 1st ed. Hoboken : Wiley ; Scrivener Publishing LLC, 2024. 441 p. ISBN 9781119896869 (eBook), ISBN 9781119896401 (Print). DOI: <https://doi.org/10.1002/9781119896869>.

8. Introduction to Bioinformatics with R: A Practical Guide for Biologists [Electronic resource] / by Edward Curry. 1st ed. New York : Chapman and Hall/CRC, 2020. 310 p. ISBN 9781351015318 (eBook). DOI: <https://doi.org/10.1201/9781351015318>.