

## FIȘA DISCIPLINEI

### 1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea Babes-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Facultatea de Chimie si Inginerie Chimica
1.3 Departamentul	Departamentul de Chimie si Inginerie Chimica-linia maghiara
1.4 Domeniul de studii	Inginerie Chimica
1.5 Ciclul de studii	Licenta
1.6 Programul de studiu / Calificarea	CISOPC/Inginer Chimist

### 2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	CAD, statistica si modelare moleculara – CLM2165						
2.2 Titularul activităților de curs	Lect. Dr. Gabriel Katona						
2.3 Titularul activităților de seminar	Lect. Dr. Gabriel Katona						
2.4 Anul de studiu	III	2.5 Semestrul	I	2.6. Tipul de evaluare	EC	2.7 Regimul disciplinei	Ob

### 3. Timpul total estimat (ore pe semestru al activităților didactice)

3.1 Număr de ore pe săptămână	7	Din care: 3.2 curs	3	3.3 seminar/laborator	4
3.4 Total ore din planul de învățământ	98	Din care: 3.5 curs	42	3.6 seminar/laborator	56
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					28
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					14
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					28
Tutoriat					4
Examinări					3
Alte activități: .....					
3.7 Total ore studiu individual	77				
3.8 Total ore pe semestru	175				
3.9 Numărul de credite	7				

### 4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	• Nu este cazul
4.2 de competențe	• Nu este cazul

### 5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> <li>• In timpul orelor de curs studentii trebuie sa fie foarte atenti, deoarece sunt prezentate cantitati semnificative de informatii, care sunt impartite si prezentate in intervale scurte de timp.</li> <li>• Nu sunt permise alte activitati in timpul cursului.</li> <li>• Nu sunt permise mesajele text, e-mail-urile, etc in timpul orelor de curs.</li> <li>• Nu sunt permise înregistrările audio sau video a cursurilor.</li> <li>• Studentii sunt rugati sa-si seteze telefoanele in modul silentios.</li> </ul>
-------------------------------	--

<p>5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Prezenta la seminar/laborator este obligatorie.</li> <li>• Este imperativ ca studentii sa detina abilități de utilizare a calculatorului solide.</li> <li>• In timpul orelor de seminar studentii trebuie sa fie foarte atenti, deoarece sunt prezentate cantitatii semnificative de informatii, care sunt impartite si prezentate in intervale scurte de timp.</li> <li>• Prezentarea temelor de seminar este obligatorie.</li> <li>• Nu sunt permise alte activitati in timpul seminarului.</li> <li>• Nu sunt permise mesajele text, e-mail-urile, etc in timpul orelor de seminar.</li> </ul>
---	--

## 6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> <li>Definirea noțiunilor, conceptelor, teoriilor și modelelor de bază din domeniul fundamental al științelor ingineresti și utilizarea lor adecvată în comunicarea profesională</li> <li>Utilizarea cunoștințelor de bază din domeniul științelor fundamentale pentru explicarea și interpretarea fenomenelor ingineresti</li> <li>Identificarea și aplicarea conceptelor, metodelor și teoriilor pentru rezolvarea problemelor ingineresti în condiții de asistență calificată</li> <li>Analiza critică și utilizarea principiilor, metodelor și tehnicilor de lucru pentru evaluarea cantitativă și calitativă a proceselor</li> <li>Fundamentarea teoretică în rezolvarea problemelor specifice domeniului cu utilizarea unor principii și metode consacrate.</li> <li>Definirea noțiunilor, conceptelor, teoriilor și modelelor de bază din domeniul chimiei și ingineriei și utilizarea lor adecvată în comunicarea profesională</li> <li>Utilizarea cunoștințelor de bază din domeniul chimiei și ingineriei chimice pentru explicarea și interpretarea fenomenelor ingineresti</li> <li>Identificarea și aplicarea conceptelor, metodelor și teoriilor pentru rezolvarea problemelor tipice ingineriei chimice de proces în condiții de asistență calificată</li> <li>Analiza critică și utilizarea principiilor, metodelor și tehnicilor de lucru pentru evaluarea cantitativă și calitativă a proceselor din ingineria chimică</li> <li>Aplicarea conceptelor și teoriilor fundamentale din domeniul chimiei și ingineriei chimice și de proces pentru elaborarea de proiecte profesionale</li> <li>Identificarea și utilizarea adecvată a limbajului, conceptelor, abordărilor, teoriilor, modelelor și metodelor elementare pentru: monitorizarea procesului, automatizarea clasică și cea bazată pe sisteme de calcul a proceselor (bio)chimice</li> <li>Explicarea și interpretarea modului de funcționare a sistemelor de monitorizare și automatizare procese (bio)chimice, cu și fără sistem de calcul</li> <li>Rezolvarea problemelor de exploatare și operare a ansamblului integrat: sistem de monitorizare, sistem de automatizare, sistem de calcul și proces (bio)chimic</li> <li>Evaluarea și analiza performanțelor sistemelor de automatizare (traductoare, elemente de execuție, reglatoare, sisteme de protecție) și monitorizare (software și hardware) în ansamblul integrat proces-sistem de monitorizare/automatizare, în scopul identificării de soluții pentru îmbunătățirea performanțelor acestora</li> <li>Implementarea de soluții hardware/software pentru probleme tipice și elementare de îmbunătățire a sistemelor de monitorizare și automatizare procese (îmbunătățirea/introducerea de sisteme de măsură, reglare, monitorizare, prelucrare de date on/off-line)</li> <li>Utilizarea conceptelor de statistica și modelare moleculară aplicabile în chimie și inginerie</li> <li>Explicarea funcționării aparatelor, utilajelor și proceselor de bază din industriile de proces pe baza mediilor software care descriu comportarea acestora prin modele matematice simple (staționare) și prin prelucrări statistice de date de proces</li> <li>Dezvoltarea de modele matematice pentru caracterizarea unor proprietăți chimice, fizice și biologice</li> <li>Dezvoltarea de modele matematice simple staționare sau dinamice pentru aparatele, utilajele și procesele din industriile de proces și implementarea acestora în simulatoare utilizate la evaluarea performanțelor proceselor pentru identificarea unor soluții de operare prezentând avantaje economice, eficiență energetică mărită, siguranță sporită în exploatare și impact redus asupra mediului</li> <li>Adaptarea și utilizarea modelelor matematice pentru proiectarea tehnologică și implementarea acestora în sisteme de conducere automată cu scopul obținerii unor soluții optime prezentând avantaje economice, eficiență energetică mărită, siguranță sporită în exploatare și impact redus asupra mediului</li> </ul>
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> <li>Executarea sarcinilor solicitate conform cerințelor precizate și în termenele impuse, cu respectarea normelor de etică profesională și de conduită morală, urmând un plan de lucru prestabilit</li> <li>Rezolvarea sarcinilor solicitate în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru</li> <li>Informarea și documentarea permanentă în domeniul sau de activitate în limba română</li> <li>Preocuparea pentru perfecționarea rezultatelor activității profesionale prin implicarea în activitățile desfășurate</li> </ul>

## 7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Cunoașterea modului de elaborare a modelelor spațiale și a desenelor cu un software CAD, desenare și modelare CAD. Elaborarea de proiecte asistate de calculator</li> <li>• Însușirea și aplicarea noțiunilor de prelucrare statistică</li> <li>• Crearea de modele teoretice utilizabile în modelarea moleculară</li> </ul>
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Dobândirea cunoștințelor teoretice de bază pentru utilizarea sistemelor CAD</li> <li>• Dobândirea cunoștințelor referitoare statistică aplicabilă în chimie și inginerie chimică</li> <li>• Dobândirea cunoștințelor referitoare la modelarea proprietăților fizice, chimice și biologice</li> </ul>

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
<b>1. Introducere în proiectarea CAD</b> Concepte de bază, cuvinte-cheie: CAD, proiectare, soft specific. Bibliografie obligatorie: IV.1. pag. 1-30, IV.3. pag. 1-7	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>2. Prezentare SOLID EDGE</b> Concepte de bază, cuvinte-cheie: module, principii de proiectare CAD. Bibliografie obligatorie: IV.3. pag. 7-9, IV.1. pag. 1-30	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>3. Principii de realizarea CAD a corpurilor 3D,</b> Concepte de bază, cuvinte-cheie: translație, rotație, protruzii, decupări. Bibliografie obligatorie: IV.1. pag. 40-100, IV.3. pag. 83-137	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>4. Desene 2D pentru corpurile 3D generate</b> Concepte de bază, cuvinte-cheie: desen de execuție, cotare, comentarii. Bibliografie obligatorie: IV.1. pag. 150-200, IV.3. pag. 239-252	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>5. Obținerea ansamblurilor</b> Concepte de bază, cuvinte-cheie: ansamblu, desene de ansamblu. Bibliografie obligatorie: IV.1. pag. 179-210, IV.3. pag. 200-221	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>6. Construcții sudate</b> Concepte de bază, cuvinte-cheie: sudură, simboluri Bibliografie obligatorie: IV.1. pag. 237-240, IV.3. pag. 234-239	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>7. Proiectarea traseelor de conducte</b> Concepte de bază, cuvinte-cheie: conducte, tevi, fittinguri. Bibliografie obligatorie: IV.1. pag. 240-249, IV.3. pag. 225-233	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>8. Elemente de statistică</b> Noțiuni de bază (media aritmetică, dispersia, abaterea eroare standard). Regresii liniare. Cautarea regresiei optime.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>9. Analiza de date</b> Analiza clusterilor. Analiza componentelor principale. Analiza factorială.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	

<b>10. Notiuni de chimie matematica. Teoria grafurilor</b> Notiuni de baza.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>11. Matrici topologice. Indici topologice</b> Matrici de baza utilizati (adiacenta, distanta, conectivitate). Matrici strat. Indici bazati pe matricea de adiacenta, distanta, conectivitate, strat. Constructia indicilor	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>12. Simetrie si similaritate. Structuri inalt simetrice</b> Similaritatea structurilor moleculare 2D și 3D. Similaritatea structurilor moleculare descrise prin câmpuri de forțe si cuanto-chimic. Indici de similaritate	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>13. Modele avansate QSPR/QSAR</b> Modelul Hansch. Modelul Fischer. Modelul TI-MTD.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>14. Aplicatii ale teoriei grafurilor in chimie</b> Metode de clusterare. Prelucrarea datelor	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	

#### Bibliografie

1. Badut, M., Iosip, P., Bazele proiectarii cu Solid Edge, Ed. Albastra, Cluj-Napoca, 2002.
2. EDS/Unigraphics Solutions, Inc. Solid Edge on-line Documentation, [www.solidedge.com](http://www.solidedge.com).
3. Musca, G, Proiectarea asistata folosind Solid Edge, Ed. Junimea, Iasi, 2006.
4. M.V. Diudea; O. Ivanciuc, *Topologie Moleculară*, **COMPRES**, Cluj, 1995.
5. M. V. Diudea, M. S. Florescu, and P. V. Khadikar, *Molecular Topology and Its Applications*, **EFICON**, București, 2006.
6. M. V. Diudea, I. Gutman, L. Jantschi, *Molecular Topology*, Nova Science Publishers, Inc. Huntington, New York, 2002.
7. M. V. Diudea, Cs. L. Nagy, *Periodic Nanostructures*, Springer, 2007.

8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
<b>1. Startul in Solid Edge</b> Concepte de baza, cuvinte-cheie: deschidere, meniuri, prezentare soft Desenarea schitelor, plane de referinta Concepte de baza, cuvinte-cheie: plane de referinta, schite, profile	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>2. Caracteristicile de baza ale pieselor</b> Concepte de baza, cuvinte-cheie: racordari, tesiri, filete, rotunjiri <b>Cotare schitelor</b> Concepte de baza, cuvinte-cheie: cote, lungimi, unghiuri, tesiri, comentarii.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>3. Modelarea curbelor si a suprafetelor</b> Concepte de baza, cuvinte-cheie: profile generatoare, curbe <b>Protruzii si decupari de translatie</b> Concepte de baza, cuvinte-cheie: extrudare, generare corpuri 3D	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	

<b>4. Protruzii si decupari de rotatie</b> Concepte de baz, cuvinte-cheie: generare corpuri de rotatie <b>Protruzii complexe</b> Concepte de baza, cuvinte-cheie: Swept, loft, helical, normal	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>5. Caracteristicile de baza ale corpurilor 3D</b> Concepte de baza, cuvinte-cheie: tesiri, rotunjiri, pattern, filete. <b>Modificarea entitatilor de modelare</b> Concepte de baza, cuvinte-cheie: dimensiuni, forme, copiere, pattern.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>6. Obținerea ansamblelor, interfata de lucru</b> Concepte de baza, cuvinte-cheie: ansamblu, mod de realizare <b>Obținerea ansamblelor, proiectarea ansamblor 3D</b> Concepte de baza, cuvinte-cheie: desene 2D pentru ansamble, asamblari sudate	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>7. Ansambluri din conducte si tevi, proiectarea conductelor</b> Concepte de baza, cuvinte-cheie: conducte, fittinguri, tevi <b>Ansambluri din conducte si tevi, proiectarea ansamblor</b> Concepte de baza, cuvinte-cheie: instalatii chimice, trasee, utilaje	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>8. Utilizarea programelor de statistica.</b> Realizarea regresiiilor. Interpretarea datelor	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>9. Calculul matricilor topologici</b> Utilizarea programelor de calcul al matricilor topologici	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>10. Calculul indicilor topologici</b> Utilizarea programelor de calcul al indicilor topologici	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>11. Realizarea bazelor de date</b> Operatii cu baze de date. Realizarea bazelor de date structura-indici topologici	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>12. Simetrie si similaritate. Structuri inalt simetrice</b> Cautarea structurilor similare si simetrice	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>13. Realizarea modelelor QSPR/QSAR</b> Cautarea regresiiilor optime in vederea realizarii modelelor QSPR/QSAR	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>14. Aplicatii ale teoriei grafurilor in chimie</b> Metode de clusterare. Prelucrarea datelor	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	

## Bibliografie

1. Badut, M., Iosip, P., Bazele proiectării cu Solid Edge, Ed. Albastra, Cluj-Napoca, 2002.
2. EDS/Unigraphics Solutions, Inc. Solid Edge on-line Documentation, [www.solidedge.com](http://www.solidedge.com).
3. Musca, G, Proiectarea asistată folosind Solid Edge, Ed. Junimea, Iasi, 2006.
4. M.V. Diudea; O. Ivanciuc, *Topologie Moleculară*, **COMPRES**, Cluj, 1995.
5. M. V. Diudea, M. S. Florescu, and P. V. Khadikar, *Molecular Topology and Its Applications*, **EFICON**, București, 2006.
6. M. V. Diudea, I. Gutman, L. Jantschi, *Molecular Topology*, Nova Science Publishers, Inc. Huntington, New York, 2002.
7. M. V. Diudea, Cs. L. Nagy, *Periodic Nanostructures*, Springer, 2007.

## 9. Coroborarea conținuturilor disciplinei cu așteptările reprezentanților comunității epistemice, asociațiilor profesionale și angajatori reprezentativi din domeniul aferent programului

- Computer Aided Design, cunoscut sub numele de CAD, este utilizat de către profesioniștii IT în industria de proiectare și construcție pentru a crea obiecte și structuri, atât reale sau cat si virtuale prin intermediul tehnologiei computerizate.
- Cursul de invata utilizatorii de software specific cum să transmită informații simbolice, matematice cum ar fi materiale, procese, dimensiuni, toleranțe și altele, în conformitate cu convențiile specifice aplicației.
- Scopul cursului este de a realiza o conexiune între chimie și matematica, în vederea proiectării de noi structuri organice, cat si de a codifica și cuantifica informația chimică în vederea utilizării în prelucrarea informatică

## 10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la curs	Examen scris – accesul la examen este condiționat de susținerea colocviului de laborator și prezentarea referatelor de laborator corespunzătoare tuturor lucrărilor practice Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB	80%
	Rezolvarea corectă a problemelor		

10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la seminar/laborator	Referatele de laborator corespunzătoare tuturor lucrărilor practice – se predau în ultima săptămână de activitate didactică Colocviu laborator – test – se susține în ultima săptămână de activitate didactică	20%
	Calitatea referatelor pregătite		
	Activitatea desfășurată în laborator		
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"> <li>Nota 5 (cinci) atât la colocviul de laborator cât și la examen conform baremului.</li> <li>Cunoașterea noțiunilor introductive; întocmirea corectă a unui bilanț de materiale (identificare sistem, subsisteme, scrierea corectă a ecuațiilor de bilanț de masă); elaborarea unui flux de separare (distilare simplă); elaborarea unei diagrame cascadă pentru sinteza unui subsistem de schimbătoare de căldură.</li> </ul>			

Data completării

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar

28.03.2017

Conf.Dr. Katona Gabriel

Conf.Dr. Katona Gabriel

Data avizării în departament

28.03.2017

Semnătura directorului de departament

Lect.Dr. Szabó Gabriella Stefánia