FIŞA DISCIPLINEI

Chemometrie aplicată în design experimental, procesarea semnalelor şi recunoaşterea formelor

Anul universitar **2025-2026**

1. Date despre program

1.1. Instituţia de învăţământ superior	**Universitatea Babeş-Bolyai din Cluj Napoca**
1.2. Facultatea	**Chimie şi Inginerie Chimică**
1.3. Departamentul	**Scoala Doctorală de Chimie**
1.4. Domeniul de studii	**Chimie**
1.5. Ciclul de studii	**Doctorat**
1.6. Programul de studii / Calificarea	**Studii doctorale – Şcoala doctorală de Chimie/ Diploma de doctor**
1.7. Forma de învăţământ	**Învăţământ cu frecvenţă**

2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei	**Chemometrie aplicată în design experimental, procesarea semnalelor şi recunoaşterea formelor**			Codul disciplinei	**SDC-19-11**
2.2. Titularul activităţilor de curs	**Conf. Habil. Dr. Augustin C. Moţ**				**Eticheta: 4**
2.3. Titularul activităţilor de seminar	**Conf. Habil. Dr. Augustin C. Moţ**				
2.4. Anul de studiu	**I**	2.5. Semestrul	**2**	2.6. Tipul de evaluare	Examen
2.7. Regimul disciplinei	Opţional		2.8. Tipul disciplinei		Disciplină de specializare (DS)

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

3.1. Număr de ore pe săptămână	**3**	din care: 3.2. curs	**2**	3.3. seminar/ laborator/ proiect	**1**
3.4. Total ore din planul de învăţământ	**36**	din care: 3.5. curs	**24**	3.6. seminar/laborator	**12**
Distribuţia fondului de timp pentru studiul individual (SI) şi activităţi de autoinstruire (AI)					**ore**
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie şi notiţe (AI)					**70**
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate şi pe teren					**70**
Pregătire seminare/ laboratoare/ proiecte, teme, referate, portofolii şi eseuri					**64**
Tutoriat (consiliere profesională)					**6**
Examinări					**4**
Alte activităţi					
3.7. Total ore studiu individual (SI) şi activităţi de autoinstruire (AI)				**214**	
3.8. Total ore pe semestru				**250**	
3.9. Numărul de credite				**10**	

4. Precondiţii (acolo unde este cazul)

4.1. de curriculum	**Cunoştinţe fundamentale de statistică**
4.2. de competenţe	**Utilizare elementară a MS Excel, Statistica şi Minitab**

5. Condiţii (acolo unde este cazul)

5.1. de desfăşurare a cursului	• Este necesară o sală echipată cu videoproiector • Studenţii se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise
5.2. de desfăşurare a seminarului/ laboratorului	• Studenţii se vor prezenta la seminar cu telefoanele mobile închise • Studenţii se vor prezenta în seminar la data si ora programate. • Studenţii nu pot folosi calculatorul decât in scopul lucrării programate • Este interzis accesul cu mâncare în sala de seminar

6.1. Competenţele dobândite în urma absolvirii programului de studii[1]

Competenţe profesionale	
Codul competenţei	**Competenţă**
CP1	Cunoştinţe avansate şi aprofundate în domeniul chimiei şi a temei de doctorat.
CP4	Planificarea, proiectarea şi implementarea unui proiect de cercetare ştiinţifică originală, cu respectarea eticii şi integrităţii academice.
CP5	Aplicarea şi dezvoltarea metodelor avansate de cercetare şi analiză; interpretarea critică a datelor şi formularea de soluţii inovative.
Competenţe transversale	
Codul competenţei	**Competenţă**
CT2	Comunicare ştiinţifică avansată în română şi engleză; colaborare în contexte interdisciplinare şi multiculturale.
CT3	Competenţe digitale avansate pentru documentare, analiză de date şi diseminare; utilizarea responsabilă a instrumentelor informatice.

6.2. Rezultatele învăţării specifice programului de studii[2]

Rezultatele învăţării vizate prin disciplină		
Codul competenţei	**Cunoştinţe şi înţelegere (Knowledge and understanding)**	**Abilităţi academice specifice (Specific academic skills)**
CP1	Cunoştinţe avansate şi actuale în domeniul chimiei şi în aria de specializare; înţelegerea critică a literaturii de specialitate.	Integrează şi aplică concepte/teorii avansate pentru formularea ipotezelor de cercetare; argumentează alegerea abordărilor ştiinţifice.
CP4	Metodologii de cercetare avansată: proiectare experimentală, tehnici moderne de sinteză şi caracterizare, analiză şi validare; principii de management al proiectelor de cercetare.	Proiectează, planifică şi implementează un proiect de cercetare; aplică proceduri de calitate şi siguranţă şi documentează trasabil etapele şi datele.
CP5	Strategii avansate de analiză, interpretare şi integrare a datelor; evaluarea limitărilor, reproductibilităţii şi a impactului ştiinţific;	Analizează critic date complexe, estimează gradul de incertitudine şi formulează concluzii; propune îmbunătăţiri metodologice şi direcţii de cercetare/inovare.
CT2	Terminologia şi comunicarea ştiinţifică în română şi engleză; structura articolelor şi a prezentărilor ştiinţifice; bune practici de citare.	Redactează şi prezintă coerent rezultate ştiinţifice în româna şi engleză; răspunde argumentat la observaţii şi la recenzii
CT3	Instrumente digitale pentru documentare, citare şi prelucrarea datelor (baze de date, software specializat, aplicaţii de gestionare a referinţelor bibliografice); utilizarea responsabilă a resurselor informatice	Utilizează eficient instrumente digitale specifice; gestionează citările; foloseşte responsabil resurse informatice în activitatea de cercetare.

7. Rezultatele disciplinei învăţării specifice

Cunoştinţe şi înţelegere (Knowledge and understanding)
1. Înţelegerea aprofundată a principiilor chemometriei moderne şi a rolului acesteia în cercetarea chimică avansată şi în ştiinţele analitice.
2. Cunoaşterea metodologiilor de design experimental multivariat (factorial, RSM, mixture design) şi a fundamentelor statistice asociate.

[1] Se vor prelua din Planul de învăţământ al programului de studii acele competenţe profesionale şi/sau transversale la dezvoltarea cărora contribuie disciplina pentru care se elaborează fişa disciplinei. Pentru fiecare competenţă se va prelua întregul enunţ, inclusiv codul competenţei, cu formularea care apare în planul de învăţământ, fără modificări. Dacă nu se preia nici o competenţă din oricare din cele două categorii, se şterge linia din tabel aferentă acelei categorii.

[2] Se menţionează rezultatele învăţării specifice programului de studiu la dezvoltarea cărora contribuie disciplina pentru care se elaborează fişa. Enunţurile, preluate fără modificări din Planul de învăţământ în funcţie de tipul disciplinei (DF/DS/DC) se trec în dreptul competenţei asociate.

3.	Înţelegerea metodelor de procesare a semnalelor analitice, inclusiv filtrare, transformări şi reducerea zgomotului.
4.	Cunoaşterea metodelor de analiză multivariată şi recunoaştere a formelor (PCA, clasificare, regresie multivariată) şi a principiilor de validare a modelelor.
	Abilităţi academice specifice (Specific academic skills)
1.	Capacitatea de a proiecta şi optimiza experimente complexe utilizând design experimental adecvat obiectivelor analitice.
2.	Abilitatea de a preprocesa şi analiza seturi de date chimice complexe, de a construi şi valida modele chemometrice robuste.
3.	Capacitatea de interpretare critică a rezultatelor chemometrice şi integrarea lor în contextul cercetării doctorale şi al publicaţiilor ştiinţifice.

8. Conţinuturi

8.1 Curs	**Metode de predare - învăţare**	**Observaţii[3]**
8.1.1. Fundamente de chemometrie şi rolul în cercetarea doctorală. Rolul chemometriei în ştiinţele analitice moderne, tipuri de date chimice şi structuri de date. Fluxul chemometric complet (DoE, preprocesare, modelare, validare).	Prelegerea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea	4 ore
8.1.2. Design experimental avansat.: principii fundamentale DoE, design factorial complet şi fracţionat. Randomizare, replicare, blocare. Screening vs. Optimizare.	Prelegerea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea	4 ore
8.1.3. Response Surface & Mixture Design. Central Composite Design (CCD), Box–Behnken, mixture designs şi constrângeri. Optimizarea Simplex.	Prelegerea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea	4 ore
8.1.4. Procesarea semnalelor analitice. Natura zgomotului instrumental. Filtre liniare (Savitzky–Golay, smoothing). Derivate numerice. Noţiuni de Fourier în chimie analitică	Prelegerea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea	4 ore
8.1.5. PCA şi recunoaştere nesupravegheată. Conceptul de componente principale. Scores vs. Loadings. Preprocesare (autoscaling, centrare). Cluster analysis şi interpretare chimică	Prelegerea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea	4 ore
8.1.6. Clasificare şi calibrare multivariată. Clasificatori supravegheaţi. MLR, PCR, PLS. Overfitting şi validare. Selectarea variabilelor semnificative	Prelegerea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea	4 ore

Bibliografie:

1. Richard G. Brereton, Chemometrics: Data Driven Extraction for Science, Wiley, 2018.
2. Alexey L. Pomerantsev, *Chemometrics in Excel*, Wiley, 2014.
3. Augustin C. Moţ, Adrian-Ioan Dudu, Tiberiu Frentiu, Dorin Petreus, Erika-Andrea Levei, Zamfira Stupar, Maria Frentiu, Eniko Covaci, Cost-effective oxygen flask combustion and electrothermal vaporization capacitively coupled plasma microtorch optical emission spectrometry as a green and white method for multielemental determination in food, Journal of Analytical Atomic Spectrometry 41(1) (2026) 308–319.
4. Alexandra Gandea, Cezara Zagrean-Tuza, Eniko Covaci, Tiberiu Frentiu, Olivian Marincas, Emese Gal, Augustin C. Moţ, Unravelling the bridge of polyphenol composition and mineralomics in Se biofortified edible Allium species, Journal of Food Composition and Analysis 135 (2024) 106648.
5. Bogdan Bosca, Augustin C. Mot, Novel simultaneous determination of alliin and allicin in Allium sp. using digital subtraction HPTLC, Journal of Chromatography B 1222 (2023) 123700.
6. Anca E. Anghel, Ibolya Balazs, Augustin C. Mot, Conventional versus Extended Standard Addition Method: Determination of Capsaicinoids in Topical Creams by High-Performance Liquid Chromatography – Diode Array Detection (HPLC-DAD), Analytical Letters 1 (2022) 1-16.

8.2 Seminar / laborator	**Metode de predare - învăţare**	**Observaţii**

[3] De exemplu aspecte organizatorice, recomandări pentru studenţi, aspecte specifice legate de curs/seminar cum ar fi invitarea unor practicieni în domeniu etc.

8.2.1. Workflow chemometric complet pe set de date reale. Exploratory Data Analysis. Identificare outlieri. Structura matricială a datelor chimice. Mini-proiect ghidat	Conversaţia; Descrierea; Problematizarea.	2 ore
8.2.2. Aplicaţii DoE. Construire design factorial în software. Evaluare efecte principale şi interacţiuni. Interpretare suprafeţe de răspuns. Studiu de caz optimizare metodă analitică	Conversaţia; Descrierea; Problematizarea.	2 ore
8.2.3. Preprocesare şi filtrare semnale. Smoothing vs. Denoising. Derivate spectrale. Impact asupra modelelor multivariate. Compararea metodelor	Conversaţia; Descrierea; Problematizarea.	2 ore
8.2.4. PCA aplicat pe date spectrale. PCA pe seturi mari de date. Interpretare chimică loadings. Detectarea anomaliilor. Mini-proiect individual	Conversaţia; Descrierea; Problematizarea.	2 ore
8.2.5. Clasificare supravegheată. Construire modele de clasificare. Sensibilitate, specificitate. Validare externă	Conversaţia; Descrierea; Problematizarea.	2 ore
8.2.6. Calibrare PLS pe date analitice. Construire model PLS. Alegerea numărului de factori. RMSEC, RMSEP, Q^2. Mini-proiect final evaluat.	Conversaţia; Descrierea; Problematizarea.	2 ore

Bibliografie:

7. Richard G. Brereton, Chemometrics: Data Driven Extraction for Science, Wiley, 2018.
8. Alexey L. Pomerantsev, *Chemometrics in Excel*, Wiley, 2014.
9. Augustin C. Moţ, Adrian-Ioan Dudu, Tiberiu Frentiu, Dorin Petreus, Erika-Andrea Levei, Zamfira Stupar, Maria Frentiu, Eniko Covaci, Cost-effective oxygen flask combustion and electrothermal vaporization capacitively coupled plasma microtorch optical emission spectrometry as a green and white method for multielemental determination in food, Journal of Analytical Atomic Spectrometry 41(1) (2026) 308–319.
10. Alexandra Gandea, Cezara Zagrean-Tuza, Eniko Covaci, Tiberiu Frentiu, Olivian Marincas, Emese Gal, Augustin C. Moţ, Unravelling the bridge of polyphenol composition and mineralomics in Se biofortified edible Allium species, Journal of Food Composition and Analysis 135 (2024) 106648.
11. Bogdan Bosca, Augustin C. Mot, Novel simultaneous determination of alliin and allicin in Allium sp. using digital subtraction HPTLC, Journal of Chromatography B 1222 (2023) 123700.
12. Anca E. Anghel, Ibolya Balazs, Augustin C. Mot, Conventional versus Extended Standard Addition Method: Determination of Capsaicinoids in Topical Creams by High-Performance Liquid Chromatography – Diode Array Detection (HPLC-DAD), Analytical Letters 1 (2022) 1-16.

9. Evaluare

Tip activitate	9.1 Criterii de evaluare[4]	9.2 Metode de evaluare[5]	9.3 Pondere din nota finală
9.4 Curs	Corectitudinea răspunsurilor – însuşirea şi înţelegerea corectă a problematicii tratate la curs	Examen scris – Intenţia de frauda la examen se pedepseşte cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepseşte prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB.	50%
9.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însuşirea şi înţelegerea corectă a problematicii tratate la seminar.	Test practic – test pe calculator –se susţine în ultima săptămână de activitate didactică	50%
9.6 Standard minim de promovare			
Promovarea disciplinei necesită obţinerea a minimum 50% din punctajul prevăzut în barem atât la examenul scris, cât şi la testul practic.			

[4] Criteriile de evaluare trebuie să reflecte direct rezultatele învăţării vizate la nivel de program de studii, respectiv la nivel de disciplină. Mai concret, se evaluează achiziţiile de învăţare menţionate în rezultatele anticipate ale învăţării.

[5] Se recomandă stabilirea atât a metodelor de evaluare finală, cât şi a strategiei de evaluare pe parcurs.

10. Etichete ODD (Obiective de Dezvoltare Durabilă / Sustainable Development Goals)[6]

	○	Eticheta generală pentru Dezvoltare durabilă

								
○	○	○	x	○	○	○	○	○
								Nu se aplică nici o etichetă
○	○	○	○	○	○	○	○	○

Data completării:
05.02.2026

Semnătura titularului de curs
Conf. Habil. Dr. Augustin C. Moț

Semnătura titularului de seminar
Conf. Habil. Dr. Augustin C. Moț

Data avizării în CSDC:
...

Semnătura directorului SDC
Prof. Dr. Niculina Hădade

[6] Selectați o singură etichetă, cea care, în conformitate cu *Procedura de aplicare a etichetelor ODD în procesul academic*, se potrivește cel mai bine disciplinei. Dacă disciplina tratează tema dezvoltării durabile la modul general (de ex. prin prezentarea/introducerea cadrului general al dezvoltării durabile etc.) atunci se poate aloca eticheta generală de Dezvoltare Durabilă. Dacă niciuna dintre etichete nu descrie disciplina, selectați ultima opțiune: „*Nu se aplică nici o etichetă*”.