

## FIȘA DISCIPLINEI

### 1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Univeristatea Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Chimie și Inginerie Chimică
1.3 Departamentul	Chimie
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Master
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Chimie Avansata (CA)/Chimie Criminalistica (CCR)/Chimie Clinica (CCI)/Diploma de master

### 2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	<b>Chemometrie – CMR6121</b>						
2.2 Titularul activităților de curs	Lect. Dr. Augustin C. Moț						
2.3 Titularul activităților de seminar	Lect. Dr. Augustin C. Moț						
2.4 Anul de studiu	I	2.5 Semestrul	2	2.6. Tipul de evaluare	E	2.7 Regimul disciplinei	Ob

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

3.1 Număr de ore pe săptămână	3	Din care: 3.2 curs	2	3.3 seminar/laborator	1
3.4 Total ore din planul de învățământ	42	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	14
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	42				
3.8 Total ore pe semestru	150				
3.9 Numărul de credite	6				

### 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>• Studenții se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise</li> <li>• Nu va fi acceptată utilizarea telefonului în timpul cursului</li> </ul>
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Studenții se vor prezenta la seminar cu notițele de la curs</li> <li>• Studenții se vor prezenta în laborator la data si ora programate.</li> <li>• Studenții nu pot folosi calculatorul decat in scopul lucrarii programate</li> <li>• Este interzis accesul cu mâncare în laborator</li> </ul>

## 6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	C6.1 Efectuarea unui studiu extins a literaturii de specialitate aferentă temei de cercetare alese, organizarea și sintetizarea datelor cu însușirea terminologiei specifice domeniului
	C6.2. Utilizarea cunoștințelor de specialitate pentru stabilirea strategiei cercetării; explicarea și interpretarea rezultatelor
	C6.3. Utilizarea conceptelor, metodelor și teoriilor avansate pentru dezvoltarea de abordări teoretice și practice noi în activitatea de cercetare
	C6.4 Selectarea și utilizarea adecvată a criteriilor și metodelor de evaluare în vederea interpretării pertinente a rezultatelor cercetării. Formularea de concluzii și argumentarea soluțiilor propuse
	C6.5 Aplicarea inovativă a conceptelor și teoriilor avansate pentru rezolvarea unei teme de cercetare specifice domeniului chimie
Competențe transversale	CT1 Executarea cu independență a sarcinilor profesionale complexe, cu respectarea normelor de etică profesională și de conduită morală, urmând un plan de lucru propriu și propunând soluții inovative problemelor specifice apărute
	CT2 Planificarea, monitorizarea și asumarea sarcinilor profesionale ale unui grup/grupuri profesional(e) subordonate. Demonstrarea capacității de coordonare a activității, gândire analitică, adaptabilitate și flexibilitate, colaborare cu membrii echipei

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

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> <li>Să familiarizeze studenții cu noțiunile de bază, conceptele, teoriile și metodele de bază din domeniul chemometriei</li> </ul>
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> <li>Familiarizarea studenților cu noțiunile de bază ale chimiei analitice cantitative, precum și cu principiile fundamentale și aplicațiile practice ale metodelor statistice și chemometrice</li> <li>Formarea studenților privind prelucrarea și interpretarea optimă a datelor de analiză și calitatea acestora</li> <li>Extragerea și exploatarea maximă a informației din analizele și măsurările de laborator în scopul luării unor decizii juste și în timp util</li> <li>Evaluarea caracteristicilor de performanță ale metodelor analitice prin metode statistice și informaționale</li> <li>Validarea metodelor analitice</li> <li>Optimizarea metodelor analitice</li> <li>Controlul de calitate prin metode statistice</li> </ul>

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. <b>Noțiuni generale de chemometrie. Chemometria ca subdomeniu al chimiei analitice. Repere istorice. Noțiuni de metrologie și unități de măsură. Cifre semnificative. Reguli pentru stabilirea cifrelor semnificative</b>	Prelegerea Explicația Conversația	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> elemente de metrologie, unități de măsură, cifre semnificative, cifre sigure și cifre nesigure, mărimi și măsurarea lor (2 ore)

8.1.2. Variabile statistice. Clasificarea variabilelor. Analiza univariată a datelor. Statistică descriptivă	Prelegerea Explicația Conversația	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> Variabilă aleatoare, variabile calitative și cantitative, mărimi medii și parametri ai dispersiei, deviația standard și cuantile. (2 ore)
8.1.3. Erori și surse de erori. Evaluarea caracteristicilor de performanță a metodelor analitice. Propagarea erorilor.	Prelegerea Explicația Conversația	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> erori de măsurare și incertitudinea de măsurare, propagarea erorilor, exactitatea, precizia, sensibilitatea, selectivitatea și specificitatea, fiabilitatea metodelor analitice (2 ore)
8.1.4. Funcții de distribuție a datelor. Funcții distribuție a variabelor aleatoare discrete.	Prelegerea Explicația Conversația	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> funcția densității de probabilitate, funcția de repartiție a probabilității, funcția de distribuție binomială, funcția de distribuție Poisson (2 ore)
8.1.5. Funcții de distribuție a datelor. Funcții distribuție a variabelor aleatoare continue.	Prelegerea Explicația Conversația	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> funcția de distribuție normală, funcția de distribuție normal-normată, funcția de distribuție "student" (t), funcția de distribuție $\chi^2$ , funcția de distribuție F, tabele de distribuție (2 ore)
8.1.6. Statistică inferențială. Eșantionarea. Teorema limită centrală. Intervalul de încredere.	Prelegerea Explicația Conversația	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> populație, eșantion, interval de încredere al mediei adevărate, interval de încredere al varianței (2 ore)
8.1.7. Verificarea ipotezelor statistice. Teste și erori statistice. Compararea mediei cu o valoare adevărată. Compararea a doua medii. Testul z. Testul t. Testul t pe perechi.	Prelegerea Explicația Conversația	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> ipoteza de nul și ipoteza alternativă, tipuri de erori statistice, teste parametrice, testul t, testul F, material de referință certificat, compararea metodelor analitice (2 ore)
8.1.8. Verificarea ipotezelor statistice. Puncte extreme și verificarea lor. Teste statistice pentru verificarea distribuției.	Prelegerea Explicația Conversația	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> testul Dixon, testul Grubbs, testul $\chi^2$ , testul Kolmogorov-Smirnov, testul Shapiro-Wilk, histograme statistice (2 ore)
8.1.9. Verificarea ipotezelor statistice. Teste statistice neparametrice și teste robuste.	Prelegerea Explicația Conversația	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> Testul semnelui, testul Wilcoxon, Testul U (2 ore)
8.1.10. Analiza de varianță ANOVA. Teste statistice pentru compararea mai multor variante.	Prelegerea Explicația Conversația	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> ANOVA unifactorială, testul Bartlett, testul Cochran, testul Hartley (2 ore)

8.1.11. Analiza de regresie și analiza de corelație	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> regresie, corelație, calibrare, metoda celor mai mici pătrate, metoda adaosului standard simplă și generalizată, compararea metodelor analitice cu ajutorul analizei de regresie, metode de regresie robuste (2 ore)
8.1.12. Analiza de regresie. Regresia ponderată. Metode de regresie robuste. Metode de liniarizare.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> limita de detecție și limita de determinare, factor de ponderare (2 ore)
8.1.13. Analize multivariate a datelor. Metode de clasificare și reducere a dimensionalității.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> analiza clusterilor, analiza componentelor principale, clasificarea fuzzy (2 ore)
8.1.14. Metode de optimizare și controlul de calitate în chimia analitică	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Dezbaterea;	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> analiza factorială, metoda simplex, diagrame de control (2 ore)

#### Bibliografie:

1. MIHAELA RUS și MIHAELA LUMINIȚA SANDU, *Elemente de statistică aplicată*, Editura Pro Universitaria, București, 2015
2. J. C. MILLER ȘI J. N. MILLER, *Statistics for analytical chemistry*, Ellis Horwood, 5th edition, 2005.
6. D. A. SKOOG, D. M. WEST și J. F. HOOLER, *Fundamentals of Analytical Chemistry*, Saunders, College Publishing, 1992.
7. D. C. HARRIS, *Quantitative Chemical Analysis*, Freeman and Comp., New York, 1991.
8. Suportul de curs
9. [www.chemometrics.com](http://www.chemometrics.com)
10. [www.statsoft.com/textbook/stathome.html](http://www.statsoft.com/textbook/stathome.html)

8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
8.2.1. Operații cu numere. Cifre semnificative	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> numere aproximative și operații cu aceste numere, propagarea erorilor, erorile diferitelor metode de analiză (2 ore)
8.2.2. Calcule statistice	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> propagarea erorilor, estimarea parametrilor statistici (medie, mediană, dispersie, abatere standard (2 ore)

8.2.3. Calcule statistice	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	intervale de încredere al mediei, aplicarea testelor statistice (compararea mediilor, dispersiilor, verificarea datelor, privind distribuția acestora), verificarea ipotezelor statistice, teste neparametrice și statistică robustă privind compararea a două sau mai multe, metode, laboratoare, etc.  (2 ore)
8.2.4. Analiza de varianță	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> Varianță, surse ale varianței, factori calitativi și cantitativi (2 ore)
8.2.5. Calcule de corelație și regresie	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> metoda celor mai mici pătrate, metode robuste de regresie, calcule privind metoda adaosului standard (2 ore)
8.2.6. Clasificarea și reducerea dimensionalității datelor	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> Metode diverse de clasificare, analiza componentelor principale, analiza discriminantă (2 ore)
8.2.7. Colocviu de laborator	-	Colocviu de laborator
<b>Bibliografie</b>  1. <a href="http://www.chemometrics.com">www.chemometrics.com</a> 2. <a href="http://www.statsoft.com/textbook/stathome.html">www.statsoft.com/textbook/stathome.html</a> 4. <a href="http://www.chemdex.org">www.chemdex.org</a> 5. Notițele de la curs. Suportul de la curs.		

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

Prin însușirea conceptelor teoretico-metodologice și abordarea aspectelor practice incluse în disciplina Chemometrie, studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele din Suplimentul la diplomă și calificările din ANC.

## 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 problematicii tratate la curs Rezolvarea corectă a problemelor	Examen scris – Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB.	80%
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor din cadrul colocviului de laborator – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la seminar/laborator. Rezolvarea corectă a problemelor	Colocviu laborator – test pe calculator –se susține în ultima săptămână de activitate didactică	20%
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 fundamentale de statistică descriptivă aplicată; aplicarea corectă a unui test statistic (identificarea structurii datelor, alegerea unui test potrivit); aplicarea și interpretarea corectă a analizei de regresie și corelație; aplicarea și interpretarea corectă a metodelor de analiza multidimensională;</li> </ul>			

Data completării

19.04.2019

Semnătura titularului de curs

Lect. Dr. Augustin C. Moț



Semnătura titularului de seminar

Lect. Dr. Augustin C. Moț



Data avizării în departament

09 mai 2019

Semnătura directorului de departament

Acad. Cristian Silvestru

