

## FIȘA DISCIPLINEI

### 1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Chimie și Inginerie Chimică
1.3 Departamentul	Inginerie Chimică
1.4 Domeniul de studii	Inginerie Chimică
1.5 Ciclul de studii	Licență
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Ingineria și Informatica Proceselor Chimice și Biochimice / Inginer chimist

### 2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	<b>Metode numerice de calcul cu aplicații în chimie fizică – CLR2384</b>						
2.2 Titularul activităților de curs	Conf. dr. ing. Alexandra Ana Csavdări						
2.3 Titularul activităților de seminar/laborator	Conf. dr. ing. Alexandra Ana Csavdări						
2.4 Anul de studiu	III	2.5 Semestrul	5	2.6. Tipul de evaluare	E	2.7 Regimul disciplinei	DS/Opt

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

3.1 Număr de ore pe săptămână	4	Din care: 3.2 curs	2	3.3 seminar/laborator	0/2
3.4 Total ore din planul de învățământ	56	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	0/28
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					7
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri: nu este cazul					21
Tutoriat					7
Examinări					6
Alte activități: nu este cazul					0
3.7 Total ore studiu individual	69				
3.8 Total ore pe semestru	125				
3.9 Numărul de credite	5				

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

4.1 de curriculum	<ul style="list-style-type: none"> <li>Cunoștințe temeinice de chimie fizică, de fenomene de transfer și de ingineria reacțiilor chimice constituie un avantaj.</li> </ul>
4.2 de competențe	<ul style="list-style-type: none"> <li>Cele specifice disciplinelor mai sus menționate.</li> </ul>

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

5.1 De desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> <li>Studentii se vor prezenta punctual la curs (în sala de curs în regim <i>on-site</i> sau pe platforma electronică în regim <i>on-line</i>).</li> <li>În regim <i>on-site</i>: Studentii vor respecta toate normele sanitare în vigoare (la nivel național sau local/UBB).</li> <li>În regim <i>on-line</i>: studenții vor păstra obligatoriu camerele de luat vederi <b>deschise</b>, iar acestea vor fi <b>funcționale</b>. De asemenea, studenții vor avea microfoane <b>funcționale</b>, dar pe care le vor păstra închise atât</li> </ul>
-------------------------------	---

	<p>timp cât cadrul didactic sau un alt student vorbesc.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• În regim <i>on-site</i> și/sau <i>on-line</i>: <b>nu</b> se vor efectua înregistrări video și/sau audio ale activităților, și nici <b>nu</b> se va permite efectuarea acestora în mod ilicit de către oricare dintre participanții la activitățile didactice. Nerespectarea acestei prevederi va fi tratată conform legislației în vigoare.</li> <li>• Regulile de bună conduită academică – atât în regim <i>on-line</i> cât și în regim <i>on-site</i> – vor fi comunicate de către cadrul didactic la început de semestru, luate la cunoștință prin semnătură de către studenți, și respectate de către aceștia.</li> <li>• Studenții se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise sau pe mod silențios. Acestea nu vor fi ținute la vedere în timpul activităților didactice.</li> </ul>
5.2 De desfășurare a lucrarilor practice	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Studenții se vor prezenta <b>punctual</b> la lucrări practice (în sala de lucrări în regim <i>on-site</i> sau pe platforma electronică în mod <i>on-line</i>).</li> <li>• În regim <i>on-site</i>: Studenții vor respecta toate normele sanitare în vigoare (la nivel național sau local/UBB).</li> <li>• În regim <i>on-line</i>: studenții vor păstra obligatoriu camerele de luat vederi <b>deschise</b>, iar acestea vor fi <b>funcționale</b>. De asemenea, studenții vor avea microfoane funcționale, dar pe care le vor păstra închise atât timp cât cadrul didactic sau un alt student vorbesc.</li> <li>• În regim <i>on-site</i> și/sau <i>on-line</i>: <b>nu</b> se vor efectua înregistrări video și/sau audio ale activităților, și nici <b>nu</b> se va permite efectuarea acestora în mod ilicit de către oricare dintre participanții la activitățile didactice. Nerespectarea acestei prevederi va fi tratată conform legislației în vigoare.</li> <li>• Regulile de bună conduită academică – atât în regim <i>on-line</i> cât și în regim <i>on-site</i> – vor fi comunicate de către cadrul didactic la început de semestru, luate la cunoștință prin semnătură de către studenți, și respectate de către aceștia.</li> <li>• Temele/Testele de evaluare formativă (lucrări practice) sunt <b>obligatorii</b>. Testele se dau la o dată și dintr-o tematică anunțată în prealabil de către îndrumătorul de lucrări practice. Temele se predau cel târziu la termenele comunicate în prealabil de către cadrul didactic. Temele predate cu întârziere sunt considerate <b>nule</b>, și nu se vor lua în considerare în nota finală la această disciplină. Prezența la termen la teste și predarea la termen a temelor este <b>obligatorie</b> și constituie condiție de prezentare la examen.</li> <li>• Orice tentativă de fraudă sau plagiat va fi <b>documentată</b> ca atare și va fi supusă <b>analizei</b> autorităților competente, conform regulamentului ECST al UBB.</li> <li>• Studenții se vor prezenta la lucrări practice cu telefoanele mobile închise sau pe mod silențios. Acestea nu vor fi ținute la vedere în timpul activităților didactice</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 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> </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>Completarea noțiunilor dobândite în cadrul cursurilor de bază de chimie fizică cu modele complexe/sofisticate de calcul ce se regăsesc în mediile software uzuale în proiectarea, automatizarea, simularea și conducerea instalațiilor chimice industriale.</li> </ul>
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> <li>Formarea deprinderilor de operare cu modele / expresii matematice complexe / elemente de statistică (valori numerice și unități de măsură).</li> <li>Formarea deprinderilor de calcul în estimarea diversilor parametri termodinamici și cinetici în situații întâlnite în industria chimică.</li> <li>Aplicații de calcul și studii de caz.</li> </ul>

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Obiectul, scopul și importanța disciplinei. Forme uzuale și corecte de prezentare a datelor numerice, sub diverse forme. Instrumente de calcul <i>Microsoft Excel</i> și <i>Matlab</i> utile în calcule fizico-chimice.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea; Problematizarea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.2. Elemente de calcul statistic – partea 1. Statistică descriptivă. Instrumentul de calcul „ <i>Data Analysis</i> ” în <i>Microsoft Excel</i> . Exemple și aplicații în ingineria chimică.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea; Problematizarea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.3. Elemente de calcul statistic – partea 2. Regresia liniară cu doi coeficienți. Instrumentul de calcul „ <i>Data Analysis</i> ” în <i>Microsoft Excel</i> . Exemple și aplicații în ingineria chimică.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea; Problematizarea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.4 Elemente de calcul statistic – partea 3. Regresii	Prelegerea; Explicația	Fond de timp

multiliniare. Analiza de regresie. Instrumentul de calcul „ <i>Data Analysis</i> ” în <i>Microsoft Excel</i> . Exemple și aplicații în ingineria chimică. Exemple de calcul matricial în chimie fizică și inginerie chimică.	Conversația; Descrierea; Problematizarea	alocat = 2 ore
8.1.5. Elemente de calcul statistic – partea 4. Testări statistice ANOVA (mono- și bi-factorial). Instrumentul de calcul „ <i>Data Analysis</i> ” în <i>Microsoft Excel</i> . Exemple și aplicații.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea; Problematizarea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.6. Derivarea numerică. Semnificația geometrică a derivatei. Semnificația și aplicațiile primei și celei de a doua derivate. Metoda diferențelor finite. Exemple și aplicații.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea; Problematizarea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.7. Integrarea numerică. Semnificația geometrică a integralei. Semnificația și aplicațiile integralei simple, duble și triple. Metoda dreptunghiurilor și a trapezelor. Exemple și aplicații.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea; Problematizarea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.8. Recapitulare noțiuni de bază de termodinamică și cinetică chimică. Interdependența acestor informații corelația cu fenomenele de transfer și ingineria reacțiilor chimice. Exemple.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea; Problematizarea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.9. Calcule termochimice – partea 1. Modele de calcul pentru călduri specifice, călduri de reacție, entropii de reacție și entalpii libere de reacție. Calculul constantei de echilibru și a conversiei de echilibru. Sisteme ideale. Instrumentul de calcul « <i>Goal Seek</i> » în <i>Microsoft Excel</i> . Exemple și aplicații.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea; Problematizarea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.10. Calcule termochimice – partea 2. Medii neideale de reacție. Activitate. Fugacitate. Calculul constantei de echilibru și a conversiei de echilibru. Instrumentul de calcul « <i>Goal Seek</i> » în <i>Microsoft Excel</i> . Exemple și aplicații.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea; Problematizarea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.11. Determinarea constantelor de proces (de viteză) din serii de date dependente de timp. Procese simple și complexe. Metoda rezidualelor de determinare simultană a coeficienților de viteză pentru procese paralele și succesive. Exemple și aplicații.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea; Problematizarea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.12. Diverse tipuri de date experimentale obținute de pe instalații în funcțiune. Interpretarea acestora. Exemple și aplicații.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea; Problematizarea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.13. Construirea bilanțurilor de materiale și termice. Exemple și aplicații.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea; Problematizarea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.14. Importanța practică a calculelor de chimie fizică în modelarea matematică a diverselor procese.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea; Problematizarea	Fond de timp alocat = 2 ore

### Bibliografie

1. S. Ellison, V. Barwick, T. Duguid Farrant, „*Practical Statistics for the Analytical Scientist. A Bench Guide*”, 2<sup>nd</sup> Edition, RSC Publishing, Cambridge, 2009.
2. P.W. Atkins, „*Tratat de Chimie Fizică*”, Editura Tehnică, București, 1996. (sau „*Physical Chemistry*” oricare dintre ediții).
3. M. Geană, A. Veis, P. Ionescu, G. Ivănuș, „*Proprietățile fizice ale fluidelor. Metode de calcul*”, Editura Tehnică, București, 1993.
4. G. Niac, V. Voiculescu, I. Baldea, M. Preda, „*Formule tabele probleme de chimie fizică*”, Editura Dacia,

Cluj-Napoca, 1984.

5. Gh. Lupușor, E. Merica, C. Gorea, V. Bucea-Gorđuza, „*Ingineria sintezei intermediarilor aromatici*”, Editura Tehnică, București, 1977.

6. Suport electronic de curs.

8.2 Lucrări practice	Metode de predare	Observații
8.2.1 Prezentarea corectă a datelor numerice, sub formă grafică, tabelară, matricială ( <i>Microsoft Excel</i> și <i>Matlab</i> ).	Calcul; Explicația; Problematizarea; Descrierea; Aplicatia, Exemplificarea; Demonstratia	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.2. Elemente de calcul statistic – partea 1. Statistică descriptivă ( <i>Microsoft Excel</i> și <i>Matlab</i> ).	Calcul; Explicația; Problematizarea; Descrierea; Aplicatia, Exemplificarea; Demonstratia	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.3. Elemente de calcul statistic – partea 2. Regresia liniară ( <i>Microsoft Excel</i> și <i>Matlab</i> ).	Calcul; Explicația; Problematizarea; Descrierea; Aplicatia, Exemplificarea; Demonstratia	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.4. Elemente de calcul statistic – partea 3. Regresia multiliniară ( <i>Microsoft Excel</i> și <i>Matlab</i> ).	Calcul; Explicația; Problematizarea; Descrierea; Aplicatia, Exemplificarea; Demonstratia	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.5. Elemente de calcul statistic – partea 4. Testări statistice ANOVA, mono- și bi-factorial ( <i>Microsoft Excel</i> și <i>Matlab</i> ).	Calcul; Explicația; Problematizarea; Descrierea; Aplicatia, Exemplificarea; Demonstratia	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.6. Derivarea numerică. Metoda diferențelor finite. Exemple și aplicații ( <i>Microsoft Excel</i> și <i>Matlab</i> ).	Calcul; Explicația; Problematizarea; Descrierea; Aplicatia, Exemplificarea; Demonstratia	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.7. Integrarea numerică. Metoda trapezelor. Exemple și aplicații ( <i>Microsoft Excel</i> și <i>Matlab</i> ).	Calcul; Explicația; Problematizarea; Descrierea; Aplicatia, Exemplificarea; Demonstratia	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.8. Interdependența noțiunii de termodinamică și cinetică chimică. Exemple, aplicații de calcul ( <i>Microsoft Excel</i> și <i>Matlab</i> ).	Calcul; Explicația; Problematizarea; Descrierea; Aplicatia, Exemplificarea; Demonstratia	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.9. Calcul călduri specifice, călduri de reacție, entropii de reacție, entalpii libere de reacție ( <i>Microsoft Excel</i> și <i>Matlab</i> ).	Calcul; Explicația; Problematizarea; Descrierea; Aplicatia, Exemplificarea; Demonstratia	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.10. Calcul constantă de echilibru și conversie de echilibru în sisteme de reacție ideale ( <i>Microsoft Excel</i> și <i>Matlab</i> ).	Calcul; Explicația; Problematizarea; Descrierea; Aplicatia, Exemplificarea; Demonstratia	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.11. Calcul constantă de echilibru și conversie de echilibru în sisteme de reacție neideale ( <i>Microsoft Excel</i> și <i>Matlab</i> ).	Calcul; Explicația; Problematizarea; Descrierea; Aplicatia, Exemplificarea; Demonstratia	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.12. Calcul constante de proces pentru procese simple și complexe. Metoda rezidualelor ( <i>Microsoft Excel</i> ) și <i>Curve Fitting</i> ( <i>Matlab</i> ).	Calcul; Explicația; Problematizarea; Descrierea; Aplicatia, Exemplificarea; Demonstratia	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.13. Interpretarea datelor experimentale obținute de pe instalații în funcțiune. Aplicații ( <i>Microsoft Excel</i> și	Calcul; Explicația; Problematizarea; Descrierea;	Fond de timp alocat = 2 ore

Matlab).	Aplicatia, Exemplificarea; Demonstratia	
8.2.14. Calcule complexe în Microsoft Excel și Matlab.	Calcul; Explicația; Problematizarea; Descrierea; Aplicatia, Exemplificarea; Demonstratia	Fond de timp alocat = 2 ore

### Bibliografie

1. S. Ellison, V. Barwick, T. Duguid Farrant, "Practical Statistics for the Analytical Scientist. A Bench Guide", 2<sup>nd</sup> Edition, RSC Publishing, Cambridge, 2009.
2. P.W. Atkins, „Tratat de Chimie Fizică”, Editura Tehnică, București, 1996. (sau „Physical Chemistry” oricare dintre ediții)
3. M. Geană, A. Veis, P. Ionescu, G. Ivănuș, „Proprietățile fizice ale fluidelor. Metode de calcul”, Editura Tehnică, București, 1993.
4. G. Niac, V. Voiculescu, I. Baldea, M. Preda, „Formule tabele probleme de chimie fizică”, Editura Dacia, Cluj-Napoca, 1984.
5. Gh. Lupușor, E. Merica, C. Gorea, V. Bucea-Gorđuza, „Ingineria sintezei intermediarilor aromatici”, Editura Tehnică, București, 1977.
6. Suport electronic de 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 **Metode numerice de calcul cu aplicații în chimie fizică** 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 în nota finală
10.4 Curs	<p>Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la curs; Aplicarea corectă a noțiunilor însușite în contexte noi.</p> <p>Rezolvarea corectă a subiectelor ca parte integrantă a evaluării sumative.</p> <p><b>NOTĂ:</b> <i>Modalitatea de evaluare și detaliile desfășurării acesteia depind de contextul epidemiologic, de legislația în vigoare și de normele interne ale UBB, și pot suferi modificări de la data publicării acestei fișe până la data efectivă de derulare a acesteia.</i></p>	<p><b>Examen scris (evaluare sumativă)</b> în formă scrisă, în regim <i>on-site</i>.</p> <p>Accesul la examen este condiționat de:</p> <p>(1) parcurgerea și <b>promovarea</b> (cu cel puțin nota 5-cinci) a evaluării formative (teste și teme predate la termen);</p> <p>(2) legitimarea prealabilă a studentului.</p> <p>Orice tentativă de fraudă sau plagiat va fi <b>documentată</b> ca atare și va fi supusă <b>analizei</b> autorităților competente, conform regulamentului ECST al UBB.</p>	Evaluarea sumativă = total 50% din nota finală
10.5 Lucrări practice	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la clasa; aplicarea corectă a noțiunilor însușite în contexte noi.	<p><b>Evaluare formativă</b> sub formă de</p> <p>(1) Teste în formă scrisă;</p> <p>(2) Teme de casă în formă scrisă;</p>	Evaluarea formativă = total 50% din nota finală

	<p><b>Toate activitățile de la lucrările practice sunt obligatorii.</b></p> <p>Rezolvarea corectă a subiectelor (teste și teme) ca parte integrantă a evaluării formative.</p> <p><b>NOTĂ:</b> <i>Modalitatea de evaluare și detaliile desfășurării acesteia depind de contextul epidemiologic, de legislația în vigoare și de normele interne ale UBB, și pot suferi modificări de la data publicării acestei fișe până la data efectivă de derulare a acesteia.</i></p>	<p>(3) participarea activă și colaborativă la lucrările practice.</p> <p>Numărul și formatul testelor se comunică de către cadrul didactic în termen util, pe parcursul semestrului, dar nu mai târziu de o săptămână înainte de data de predare a fiecărei teme sau de data de prezentare la test.</p> <p><b>NOTĂ:</b> Nota obținută la evaluarea formativă este <b>definitivă</b>, și nu cade sub incidența sesiunii de restanțe/mărimi de notă.</p> <p>Accesul la teste este condiționat de legitimarea prealabilă a studentului.</p> <p>Orice tentativă de fraudă sau plagiat va fi <b>documentată</b> ca atare și va fi supusă <b>analizei</b> autorităților competente, conform regulamentului ECST al UBB.</p>	
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"> <li>Nota 5 (cinci) conform baremului de corectare în cadrul evaluării cumulate dintre cea formativă și cea sumativă.</li> <li>Cunoașterea și utilizarea corectă a diverselor modele de calcul discutate.</li> </ul>			

Data completării

10 Aprilie 2024

Semnătura titularului de curs

Conf. dr. ing. Alexandra Csavdări

Semnătura titularului de seminar

Conf. dr. ing. Alexandra Csavdări

Data avizării în departament

15 Aprilie 2024

Semnătura directorului de departament

Prof. dr. habil. ing. Graziella Liana Turdean