

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

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Metode numerice de calcul cu aplicații în chimie fizică – CLR2384						
2.2 Titularul activităților de curs	Conf. dr. ing. Alexandra Ana Csavdări						
2.3 Titularul activităților de 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	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					28
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri: nu este cazul					0
Tutoriat					10
Examinări					3
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"> Cunostinte temeinice de chimie fizica, de fenomene de transfer și de ingineria reacțiilor chimice constituie un avantaj.
4.2 de competențe	<ul style="list-style-type: none"> Cele specifice disciplinelor mai sus menționate.

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> Studentii se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise. Nu va fi acceptată întârzierea.
5.2 De desfășurare a lucrarilor practice	<ul style="list-style-type: none"> Studentii se vor prezenta la lucrari practice cu telefoanele mobile închise, cu notitele de la curs si cu tehnică de calcul adecvată. Nu va fi acceptată întârzierea.

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> Definirea noțiunilor, conceptelor, teoriilor și modelelor de bază din domeniul chimiei și ingineriei și utilizarea lor adecvată în comunicarea profesională; Utilizarea cunoștințelor de bază din domeniul chimiei și ingineriei chimice pentru explicarea și interpretarea fenomenelor ingineresti; Identificarea și aplicarea conceptelor, metodelor și teoriilor pentru rezolvarea problemelor tipice ingineriei chimice de proces în condiții de asistență calificată; Analiza critică și utilizarea principiilor, metodelor și tehnicilor de lucru pentru evaluarea cantitativă și calitativă a proceselor din ingineria chimică; Aplicarea conceptelor și teoriilor fundamentale din domeniul chimiei și ingineriei chimice și de proces pentru elaborarea de proiecte profesionale.
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> 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; Rezolvarea sarcinilor solicitate în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru; Informarea și documentarea permanentă în domeniul sau de activitate în limba română; Preocuparea pentru perfecționarea rezultatelor activității profesionale prin implicarea în activitățile desfășurate.

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> 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.
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> Formarea deprinderilor de operare cu modele/expresii matematice complexe (valori numeice și unitati de măsură); Formarea deprinderilor de calcul în estimarea parametrilor gazelor și a lichidelor pure și în amestecuri (densități, vâscozități, fugacități, coeficienți de activitate, capacități calorice, coeficienți de difuzie, etc) în situații întâlnite în industria chimică; Aplicații reale de calcul și studii de caz.

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Noțiuni fundamentale de derivare și integrare numerică. Rezolvarea de ecuații în ingineria chimică. Instrumente de calcul în <i>Microsoft Excel</i> .	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.2. Elemente de calcul statistic. Instrumente de calcul în <i>Microsoft Excel</i> . Aplicații în ingineria chimică.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.3. Recapitulare noțiuni de bază de termodinamică chimică și corelația cu cinetica chimică, fenomenele de transfer și ingineria reacțiilor chimice.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.4. Recapitulare noțiuni de bază de cinetică chimică și corelația cu cinetica chimică, fenomenele de transfer și ingineria reacțiilor chimice.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	Fond de timp alocat = 2 ore

8.1.5. Modele de calcul pentru călduri specifice, călduri de reacție, entropii de reacție și entalpii libere de reacție	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.6. Corelația termodinamică chimică și cinetică chimică: calcul constante de viteză, constantă de echilibru și conversie de echilibru în medii lichide la temperaturi diverse și presiune de 1 atm, pornind de la date termodinamice.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.7. Corelația termodinamică chimică și cinetică chimică: calcul constante de viteză, constantă de echilibru și conversie de echilibru în medii gazoase, la temperaturi și presiuni diverse, pornind de la date termodinamice	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.8. Metode de abordare a obținerii datelor experimentale de pe instalații industriale în funcțiune. Tipuri de date obținute.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.9. Modele de calcul pentru determinarea stoechiometriei, conversiei, distribuției de produși și a legilor de viteză empirice din date experimentale obținute de pe instalații industriale în funcțiune.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.10. Modele de calcul ale coeficienților individuali de viteză pentru procese complexe (succesiuni, paralelisme, procese opuse) din date experimentale obținute de pe instalații industriale în funcțiune – partea 1.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.11. Modele de calcul ale coeficienților individuali de viteză pentru procese complexe (succesiuni, paralelisme, procese opuse) din date experimentale obținute de pe instalații industriale în funcțiune – partea 2.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.12. Instrumente de calcul în <i>Microsoft Excel</i> cu aplicație în ingineria chimică. Prezentare.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.13. Vizita la operator comercial – centru de calcul și comandă – partea 1.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	Fond de timp alocat = 4 ore
8.1.14. Vizita la operator comercial – centru de calcul și comandă – partea 2.		
Bibliografie 1. P.W. Atkins, „ <i>Tratat de Chimie Fizică</i> ”, Editura Tehnică, București, 1996. 2. M. Geană, A. Veis, P. Ionescu, G. Ivănuș, „ <i>Proprietățile fizice ale fluidelor. Metode de calcul</i> ”, Editura Tehnică, București, 1993. 3. G. Niac, V. Voiculescu, I. Baldea, M. Preda, „ <i>Formule tabele probleme de chimie fizică</i> ”, Editura Dacia, Cluj-Napoca, 1984. 4. Gh. Lupușor, E. Merica, C. Gorea, V. Bucea-Gorduza, „ <i>Ingineria sintezei intermediarilor aromatici</i> ”, Editura Tehnică, București, 1977.		
8.2 Lucrări practice / seminar	Metode de predare	Observații
8.2.1. Aplicații de inginerie chimică la derivarea și	Calcul; Explicația;	Fond de timp

integrarea numerica.	Descrierea	alocat = 2 ore
8.2.2. Aplicatii de calcul statistic in inginerie chimica.	Calcul; Explicatia; Descrierea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.3. Calcul călduri latente și călduri specifice. Calcul entalpie standard de formare. Calcul entalpie de reacție.	Calcul; Explicatia; Descrierea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.4. Calcul entropie de reacție. Calcul entalpie liberă de reacție. Calcul constante de echilibru. Calcul conversie de echilibru (1 atm)	Calcul; Explicatia; Descrierea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.5. Teoria gazelor: gaze reale. Proprietăți critice: temperatura critică, presiunea critică, volumul critic	Calcul; Explicatia; Descrierea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.6. Calcul constante de echilibru. Calcul conversie de echilibru (presiuni mari)	Calcul; Explicatia; Descrierea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.7. Interpretare profile dinamice (parametru de proces in functie de timp proces): calcul coeficienti de (viteza) de proces - Modele simple.	Calcul; Explicatia; Descrierea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.8. Interpretare profile dinamice (parametru de proces in functie de timp proces): calcul coeficienti de (viteza) de proces - Modele complexe.	Calcul; Explicatia; Descrierea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.9. Interpretarea curbelor de distributie de produse (profile concentratii in functie de timpul de reactie / stationare) dpdv stoechiometrie, eficienta proces; Corelarea informatiilor.	Calcul; Explicatia; Descrierea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.10. Instrumente de calcul in <i>Microsoft Excel</i> cu aplicatie in ingineria chimica. Aplicatii de calcul.	Calcul; Explicatia; Descrierea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.11. Vizita de studiu la o unitate de servicii de inginerie locala (baza de calcul) – partea 1.	Calcul; Explicatia; Descrierea	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.12. Vizita de studiu la o unitate de servicii de inginerie locala (baza de calcul) – partea 2.	Calcul; Explicatia; Descrierea; Aplicatia, Exemplificarea; Demonstratia	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.13. Vizita de studii la un operator economic (software de calcul proiecte individuale) – partea 1.		
8.2.14. Vizita de studii la un operator economic (software de calcul proiecte individuale) – partea 2.	Calcul; Explicatia; Descrierea; Aplicatia, Exemplificarea; Demonstratia	Fond de timp alocat = 4 ore

Bibliografie

1. M. Geană, A. Veis, P. Ionescu, G. Ivănuș, „*Proprietățile fizice ale fluidelor. Metode de calcul*”, Editura Tehnică, București, 1993.
2. G. Niac, V. Voiculescu, I. Baldea, M. Preda, „*Formule tabele probleme de chimie fizică*”, Editura Dacia, Cluj-Napoca, 1984.
3. E.W. Washburn (Ed.), „*International Critical Tables of Numerical Data, Physics, Chemistry and Technology*”, Knovel, New York, 2003.
4. Teme de calcul transmise electronic studentilor de catre titularul 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 din
----------------	---------------------------	-------------------------	------------------

			nota finală
10.4 Curs	<p>Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la curs; Aplicarea corectă a noțiunilor însușite în contexte noi.</p> <p>Rezolvarea corectă a problemelor ca parte integrantă a subiectelor de la examen.</p>	<p>Examen scris cu rezolvare de probleme.</p> <p>Intenția de fraudă și fraudă se tratează conform regulamentului ECST al UBB.</p>	100 %
10.5 Lucrari practice	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la clasa; aplicarea corectă a noțiunilor însușite în contexte noi.	Se evalueaza prin probleme propuse spre rezolvare în cadrul aplicațiilor de calcul.	-
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"> Nota 5 (cinci) conform baremului de corectare la examenul scris. Cunoașterea și utilizarea corectă a diverselor modele de calcul discutate. 			

Data completării

15 Aprilie 2020

Semnătura titularului de curs

Conf. dr. ing. Alexandra Csavdări

Semnătura titularului de seminar

Conf. dr. ing. Alexandra Csavdări

Alexandra Csavdări

Alexandra Csavdări

Data avizării în departament

16 Aprilie 2020

Semnătura directorului de departament

Prof. dr. ing. Graziella Liana Turdean

Graziella Liana Turdean