

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	Chimie
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Master
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Chimie avansată (CA), Chimie clinică (CCI), Chimie criminalistică (CCr), Ingineria proceselor organice și biochimice (IPOB)/ Master

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Chemometrie – CMR6121						
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	DF

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	2
3.4 Total ore din planul de învățământ	56	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar	28
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					21
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					21
Pregătire seminarii, teme, referate, portofolii și eseuri					12
Tutoriat					11
Examinări					4
Alte activități:					-
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	• 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"> • Studenții vor primi suportul de curs în format electronic • Se va încuraja participarea interactivă • Nu va fi acceptată utilizarea telefonului în timpul cursului
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> • Studenții se vor prezenta la seminar cu notițele de la curs • Studenții se vor prezenta în seminar la data și ora programate. • Studenții nu pot folosi calculatorul decât în scopul lucrării programate • Este interzis accesul cu mâncare în sala de seminar

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<p>C6.1 Efectuarea unui studiu extins a literaturii de specialitate aferentă temei de cercetare alese, organizarea și sintetizarea datelor cu însușirea terminologiei specifice domeniului</p> <p>C6.2. Utilizarea cunoștințelor de specialitate pentru stabilirea strategiei cercetării; explicarea și interpretarea rezultatelor</p> <p>C6.3. Utilizarea conceptelor, metodelor și teoriilor avansate pentru dezvoltarea de abordări teoretice și practice noi în activitatea de cercetare</p> <p>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</p> <p>C6.5 Aplicarea inovativă a conceptelor și teoriilor avansate pentru rezolvarea unei teme de cercetare specifice domeniului chimie</p>
Competențe transversale	<p>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</p> <p>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</p>

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

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

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Noțiuni introductive în chemometrie. Noțiuni de metrologie și unități de măsură. Cifre semnificative și cifre sigure. Reguli pentru stabilirea cifrelor semnificative și reguli pentru operarea matematică cu cifre semnificative. Efectuarea calculelor cu numere aproximative.	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. Erori și surse de erori în procesele de măsurare și analiză chimică. Clasificarea erorilor. Propagarea erorilor. Evaluarea caracteristicilor de performanță ale metodelor analitice.	Prelegerea Explicația Conversația	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> erori de măsurare și incertitudinea de măsurare, erori sistematice și erori întâmplătoare, erori absolute și erori relative, propagarea erorilor, exactitatea și precizia. (2 ore)
8.1.3. Variabile statistice. Clasificarea variabilelor. Analiza univariată a datelor. Statistică descriptivă – calculul parametrilor statistici. Proprietăți algebrice ale parametrilor statistici. Reprezentări grafice ale datelor statistice.	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, diagrama cutiei cu mustăți, (2 ore)
8.1.4. Probabilitatea evenimentelor. Funcții distribuție a variabilelor aleatoare discrete și continue. Repartiția normală de frecvențe. Curba normală standard. Repartiții în legătură cu repartiția normală (χ^2 , t, F)	Prelegerea Explicația Conversația	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> funcția densității de probabilitate, funcția de repartiție a probabilității, funcția binomială și Poisson, funcția de distribuție normală și t, funcția de distribuție χ^2 și F, tabele de distribuție (2 ore)
8.1.5. Introducere în statistica inferențială. Eșantionarea. Teorema limită centrală. Legea numerelor mari. Estimarea parametrilor populației prin eșantionare. Intervalul de încredere al mediei. Intervalul de încredere al varianței.	Prelegerea Explicația Conversația	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> populație, parametrii populației, eșantion, estimare, interval de încredere al mediei adevărate, interval de încredere al varianței (2 ore)
8.1.6. Verificarea ipotezelor statistice. Teste statistice. Metodologia aplicării testelor statistice. Erori statistice. Introducere în teste statistice parametrice. Compararea mediei populației cu o valoare adevărată.	Prelegerea Explicația Conversația	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> ipoteza de nul și alternativă, tipuri de erori statistice, teste parametrice, testul z și testul t pe un eșantion, material de referință certificat (2 ore)
8.1.7. Compararea a doua medii. Testul t pe două eșantioane independente. Testul t pe perechi. Testul F (Fisher) și compararea gradului de dispersie. Puncte extreme și verificarea lor.	Prelegerea Explicația Conversația	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> testul t pe două eșantioane, testul t pe perechi, testul F, compararea metodelor analitice, testul Dixon, testul Grubbs. (2 ore)
8.1.8. Metode statistice pentru verificarea distribuției datelor. Caracteristicile formei prin momentele statistice. Verificarea distribuției datelor prin reprezentări grafice. Verificarea distribuției datelor prin teste statistice	Prelegerea Explicația Conversația	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> testul χ^2 , testul Kolmogorov-Smirnov, testul Shapiro-Wilk, histograme statistice (2 ore)
8.1.9. Analiza de varianță ANOVA. Teste statistice pentru compararea mai multor varianțe.	Prelegerea Explicația Conversația	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> ANOVA unifactorială, testul Bartlett, testul Cochran, testul Hartley (2 ore)
8.1.10. Teste statistice neparametrice și teste	Prelegerea	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i>

robuste, testul semnelui, testul Wilcoxon, Testul Mann-Whitney, testul Kruskal-Wallis, Metoda Friedmann. Indicatori statistici robuști	Explicația Conversația	teste neparametrice, teste robuste, testul semnelui, testul sumei rangurilor cu semn, testul U (2 ore)
8.1.11. Analiza bivariată a datelor. Analiza de regresie și analiza de corelație. Metoda celor mai mici pătrate.	Prelegerea Explicația Conversația	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> regresie, corelație, calibrare, metoda celor mai mici pătrate, coeficient de determinare și de corelație (2 ore)
8.1.12. Aplicații ale regresiei lineare în chimia analitică: compararea metodelor analitice cu ajutorul analizei de regresie și verificarea erorilor sistematice. Regresia ponderată. Metode de regresie robuste. Metode de liniarizare. Regresie neliniară.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> metoda adaosului standard, limita de detecție și limita de determinare, factor de ponderare, metode de regresie robuste (2 ore)
8.1.13. Metode de optimizare și controlul de calitate în chimia analitică. Proiectarea experimentelor – design experimental. Verificarea stabilității și diagrame de control.	Explicația; Conversația; Descrierea; Dezbaterea;	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> analiza factorială, metoda simplex, diagrame de control, design experimental, suprafață de răspuns (2 ore)
8.1.14. Analiza multivariată a datelor. Metode de clasificare și reducere a dimensionalității. Analiza componentelor principale și analiza clusterilor.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> analiza clusterilor, analiza componentelor principale (2 ore)
Bibliografie: 1. Mihaela Rus, Mihaela Luminița Sandu, <i>Elemente de statistică aplicată</i> , Editura Pro Universitaria, București, 2015 2. J. C. Miller, J. N. Miller, <i>Statistics for analytical chemistry</i> , Ellis Horwood, 5th edition, 2005. 3. D. A. Skoog, D. M. West și J. F. Hooler, <i>Fundamentals of Analytical Chemistry</i> , Saunders, College Publishing, 1992. 4. D. C. Harris, <i>Quantitative Chemical Analysis</i> , Freeman and Comp., New York, 1991. 5. Stephen Kokoska, <i>Introductory Statistics: A Problem-Solving Approach</i> , WH Freeman, 2020. 6. Stephen L. R. Ellison, Vicki J. Barwick, Trevor J. Duguid Farrant, <i>Practical Statistics for the Analytical Scientist: A Bench Guide</i> , Royal Society of Chemistry, 2009. 7. Richard G. Brereton, <i>Chemometrics: Data Driven Extraction for Science</i> , Wiley, 2018. 8. www.chemometrics.com 9. www.statsoft.com/textbook/stathome.html 10. www.onlinestatbook.com 11. https://real-statistics.com/		
8.2 Seminar	Metode de predare	Observații
8.2.1. Operații cu numere. Aplicații practice privind aplicarea regulilor cifrelor semnificative	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizar	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> cifre semnificative, numere aproximative și numere exacte, operații cu aceste numere

	ea;	(2 ore)
8.2.2. Calcule propagarea erorilor. Operații cu incertitudini de măsurare.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizar ea;	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> eroare de măsurare, propagarea erorilor, eroare compusă, incertitudine de măsurare (2 ore)
8.2.3. Tipuri de reprezentări grafice a datelor statistice exemplificate cu probleme din domeniu de studiu.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizar ea;	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> diagrama cutiei cu mustăți, histograma, graficul cu bare, poligonul frecvențelor, graficul de tip „pie”
8.2.4. Aplicații calcul statistică descriptivă exemplificate cu probleme din domeniu de studiu.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizar ea;	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> parametrilor statistici, medie, mediană, dispersie, abatere standard (2 ore)
8.2.5. Utilizarea distribuției normale standard în datele de laborator. Citirea tabelor z, t și F. Utilizarea softurilor statistice pentru calculul scorurilor z și t.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizar ea;	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> distribuția normală, distribuția t, scoruri z, scoruri t, probabilități, funcția densității de probabilitate
8.2.6. Calculul intervalului de încredere al mediei și al varianței. Verificarea erorilor sistematice cu intervalul de încredere.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizar ea;	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> intervalul de încredere al mediei, testelor statistice (2 ore)
8.2.7. Verificarea distribuției normale. Diagrama cuantilelor normale. Diagrama trunchi și frunze. Testul χ^2	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizar ea;	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> cuantile normale standard, testul χ^2 , diagrama trunchi și frunze (2 ore)
8.2.8. Statistică inferențială exemplificată cu probleme din domeniu de studiu. Testul t pe probe dependente și independente. Testul F. Testul Q și Grubbs.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizar ea;	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> testul t, testul t pe perechi, testul F, testul Q, testul Grubbs (2 ore)
8.2.9. Aplicații practice privind aplicarea testelor statistice neparametrice	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizar ea;	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> testul semnelui, testul Wilcoxon, Testul U (2 ore)
8.2.10. Analiza de varianță unifactorială aplicată	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizar ea;	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> Varianță, surse ale varianței, factori calitativi și cantitativi (2 ore)
8.2.11. Rezolvarea problemelor folosind analiza de regresie și analiza de corelație. Dreapta de etalonare. Calibrarea.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizar ea;	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> metoda celor mai mici pătrate, metode robuste de regresie, metoda adaosului standard

		(2 ore)
8.2.12. Probleme de calcul privind utilizarea analizei de regresie în chimia analitică. Calculul statistic al limitei de detecție și limitei de determinare.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> criteriul 3σ, limita de detecție, limita de determinare, (2 ore)
8.2.13. Reducerea dimensionalității datelor. Aplicarea Analizei Componentelor Principale pe date de laborator. Clasificarea probelor prin metode multivariate. Analiza discriminantă și analiza clusterilor	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	<i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> analiza componentelor principale, analiza discriminantă, metoda clusterilor, valoare proprie, vector propriu (2 ore)
8.2.14. Test evaluarea cunoștințelor	-	Test evaluarea cunoștințelor

Bibliografie

1. www.chemometrics.com
2. www.statsoft.com/textbook/stathome.html
4. www.chemdex.org
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 problematicei tratate la curs Rezolvarea corectă a problemelor	Examen scris – Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen. Fraudă 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 problematicei 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"> Nota 5 (cinci) atât la examen conform baremului cât și la testul de la seminar. 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; 			

Data completării

12.04.2024

Semnătura titularului de curs

Lect. Dr. Augustin C. Moț



Semnătura titularului de seminar

Lect. Dr. Augustin C. Moț



Data avizării în departament

16.04.2024

Semnătura directorului de departament
Prof. Dr. habil. ing. Monica TOȘA

