

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1. Instituția de învățământ superior	Universitatea Petrol-Gaze din Ploiești
1.2. Facultatea	Tehnologia Petrolului și Petrochimie
1.3. Departamentul	Ingineria Prelucrării Petrolului și Protecția Mediului
1.4. Domeniul de studii universitare	Inginerie chimică
1.5. Ciclul de studii universitare	Master (1,5 ani)
1.6. Programul de studii universitare	Inginerie chimică asistată de calculator pentru rafinării și petrochimie (MICAZ)

2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei	MODELAREA ȘI SIMULAREA REACȚIILOR ȘI REACTOARELOR CHIMICE
2.2. Titularul activităților de curs	Șef lucr. Dr. Ing. Liviu FILOTTI
2.3. Titularul activităților seminar/laborator	Șef lucr. Dr. Ing. Liviu FILOTTI
2.4. Titularul activității proiect	- - -
2.5. Anul de studiu	1 (Master)
2.6. Semestrul *	1 (Master)
2.7. Tipul de evaluare	Examen (E1)
2.8. Categoria formativă** / regimul*** disciplinei	DD / O

* numărul semestrului este conform planului de învățământ;

** DF – Discipline fundamentale; DD – discipline de domeniu; DS - discipline de specialitate; DC - discipline complementare; DA – disciplină de aprofundare; DSI – disciplină de sinteză

*** obligatorie = O; opțională = A; facultativă = L

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	2	3.4. Proiect	- - -
3.5. Total ore din planul de învățământ	56	din care: 3.6. Curs	28	3.7. Seminar/laborator	28	3.8. Proiect	- - -
3.9. Total ore studiu individual (studiu după suport de curs, bibliografie și notițe, documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate, pregătire seminar/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri)							124
3.10. Total ore pe semestru							180
3.11. Numărul de credite							6

4. Condiții (acolo unde este cazul)

4.1. de curriculum	➤ Diplomă de licență ➤ Chimie fizică ; Reactoare chimice ➤ Matematică ; Metode numerice
4.2. de desfășurare a cursului	➤ Sală de curs, echipată cu tablă și videoproiector și ecran
4.3. de desfășurare a seminarului / laboratorului	➤ Sală înzestrată cu tablă, videoproiector și calculatoare cu software specifice (Mathcad, Excel, Pro-II), cu conexiune la Internet

5. Competențe și rezultatele învățării* asigurate prin programul de studii

Competențe profesionale	Rezultatele învățării*
1. Dezvoltarea și optimizarea proceselor chimice complexe	C1 – Studentul descrie și corelează modele avansate de cinetică chimică și termodinamică aplicată ; C2 – Studentul explică mecanisme de transfer de masă, căldură și impuls în sisteme reactive complexe ;

	C3 - Studentul definește metode computaționale de simulare și optimizare a proceselor. A1 - Studentul aplică software specializat pentru proiectarea și analiza proceselor chimice; A2 - Studentul integrează date experimentale cu modele matematice pentru optimizarea proceselor. RA1 - Studentul ia decizii autonome privind eficiența, siguranța și sustenabilitatea proceselor ; RA2 - Studentul documentează și prezintă rezultatele în rapoarte tehnico-științifice.
2. Proiectarea echipamentelor și instalațiilor pentru industria chimică	C1 – Studentul descrie principiile avansate de dimensionare și funcționare a echipamentelor ; C2 – Studentul identifică soluții tehnologice moderne pentru intensificarea proceselor ; C3 – Studentul definește criterii de selecție a materialelor și echipamentelor în funcție de aplicații. A1 – Studentul utilizează metode de proiectare asistată de calculator ; A2 – Studentul elaborează scheme tehnologice și bilanțuri de masă și energie. RA1 – Studentul își asumă responsabilitatea coordonării proiectelor de inginerie ; RA2 – Studentul colaborează eficient în echipe multidisciplinare.
3. Integrarea principiilor de dezvoltare durabilă și economie circulară	C1 – Studentul descrie concepte avansate de dezvoltare durabilă aplicabile în ingineria chimică ; C2 – Studentul identifică strategii de reducere, reutilizare și valorificare a resurselor ; C3 – Studentul definește indicatori de performanță pentru procese sustenabile. A1 – Studentul evaluează impactul proceselor chimice asupra mediului ; A2 – Studentul propune soluții tehnologice de reducere a poluării și eficientizare energetică. RA1 – Studentul ia decizii în concordanță cu legislația de mediu și principiile de sustenabilitate ; RA2 – Studentul promovează o conduită etică în utilizarea resurselor.
4. Utilizarea tehnicilor avansate de analiză și control a calității	C1 – Studentul descrie metode moderne de analiză instrumentală și caracterizare a materialelor ; C2 – Studentul explică principiile de validare și calibrare a metodelor analitice ; C3 – Studentul definește standardele de calitate și reglementările aplicabile. A1 – Studentul aplică metode experimentale avansate pentru caracterizarea produselor ; A2 – Studentul utilizează instrumente statistice pentru interpretarea datelor analitice. RA1 – Studentul își asumă responsabilitatea validării și raportării rezultatelor ; RA2 – Studentul elaborează rapoarte de calitate conform normelor internaționale.
5. Derularea activităților de cercetare și inovare în ingineria chimică	C1 – Studentul descrie metodologii de cercetare avansată în domeniul ingineriei chimice ; C2 – Studentul identifică direcții inovative pentru dezvoltarea de procese și produse ; C3 – Studentul definește metode de proiectare și interpretare a experimentelor. A1 – Studentul aplică metode experimentale și computaționale pentru obținerea de rezultate originale ; A2 – Studentul redactează articole științifice și proiecte de cercetare. RA1 – Studentul demonstrează autonomie în derularea proiectelor de cercetare. RA2 – Studentul diseminează rezultatele la nivel național și internațional.
6. Conducerea și gestionarea activităților în industria chimică	C1 – Studentul explică metode moderne de management al proceselor și proiectelor ; C2 – Studentul descrie cadrul legislativ și normele de securitate și sănătate în muncă ; C3 – Studentul identifică mecanisme de evaluare economică a proiectelor. A1 – Studentul aplică instrumente de management pentru coordonarea resurselor și echipelor ; A2 – Studentul utilizează metode de analiză economică și financiară a proceselor. RA1 – Studentul își asumă decizii strategice privind dezvoltarea și implementarea proiectelor ; RA2 – Studentul dovedește autonomie și leadership în coordonarea echipelor multidisciplinare.
Competențe transversale	Rezultatele învățării*
1. Dezvoltarea gândirii critice și a capacității de rezolvare a problemelor complexe	C1 – Studentul descrie metode și tehnici de analiză critică și rezolvare de probleme ; C2 – Studentul identifică modele de raționament aplicabile în contexte interdisciplinare. A1 – Studentul aplică metode de analiză și sinteză pentru rezolvarea problemelor complexe ; A2 – Studentul utilizează instrumente moderne pentru evaluarea și fundamentarea deciziilor. RA1 – Studentul își asumă responsabilitatea pentru soluțiile propuse și impactul acestora;

	RA2 – Studentul demonstrează autonomie în abordarea critică a situațiilor complexe.
2. Comunicarea eficientă orală și în scris în limba română și într-o limbă străină de circulație internațională	C1 – Studentul descrie principiile comunicării academice și profesionale; C2 – Studentul explică terminologia de specialitate în limba română și într-o limbă străină. A1 – Studentul redactează rapoarte, prezentări și documente profesionale ; A2 – Studentul susține prezentări orale și dezbateri în contexte academice și profesionale. RA1 – Studentul își asumă responsabilitatea transmiterii corecte și clare a informației ; RA2 – Studentul dovedește autonomie în selectarea mijloacelor și strategiilor de comunicare.
3. Colaborarea eficientă în echipe multidisciplinare și interculturale	C1 – Studentul descrie principiile colaborării în echipe complexe ; C2 – Studentul explică dinamica și rolurile membrilor într-o echipă multidisciplinară. A1 – Studentul participă activ la activități de echipă și contribuie la atingerea obiectivelor comune ; A2 – Studentul utilizează instrumente de management al colaborării și comunicării. RA1 – Studentul își asumă responsabilitatea rolului în echipă și respectă diversitatea culturală ; RA2 - Studentul demonstrează autonomie și inițiativă în rezolvarea conflictelor și facilitarea colaborării.
4. Responsabilitate socială, etică profesională și spirit civic	C1 – Studentul descrie principiile eticii profesionale și responsabilității sociale ; C2 – Studentul explică implicațiile etice ale deciziilor profesionale. A1 – Studentul aplică principii etice în activitățile profesionale și academice. RA1 – Studentul își asumă responsabilitatea pentru consecințele etice ale deciziilor ; RA2 – Studentul dovedește autonomie în promovarea conduitei etice și civice.
5. Gestionarea proiectelor și a resurselor într-un context socio-economic complex	C1 – Studentul explică metode de planificare și evaluare a proiectelor ; A1 – Studentul aplică instrumente și tehnici de management de proiect. A2 – Studentul elaborează planuri și rapoarte pentru utilizarea eficientă a resurselor. RA1 – Studentul își asumă responsabilitatea deciziilor privind implementarea proiectelor. RA2 – Studentul dovedește autonomie și leadership în gestionarea resurselor și echipelor.

* C – cunoștințe ; A – aptitudini ; RA – responsabilitate și autonomie

6. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor specifice acumulate)

6.1. Obiectivul general al disciplinei	➤ Identificarea proceselor chimice și fizice ce au loc într-un reactor chimic, caracterizarea cantitativă a acestora prin ecuații și relații matematice ➤ Cunoașterea relațiilor de bilanț de masă, de energie și de impuls utile pentru elaborarea modelelor matematice ale reactoarelor chimice din industria de prelucrare a petrolului sau petrochimică ➤ Însușirea capacității de a aprecia relațiile relevante dintre diversele fenomene și mărimi și de a formula în consecință ipoteze simplificatoare ➤ Determinarea soluțiilor tehnice pentru ameliorarea performanțelor tehnico-economice ale unui reactor chimic
6.2. Obiectivele specifice	➤ Cunoașterea metodelor de elaborare a modelelor matematice ale reactoarelor chimice reprezentative pentru industria de profil ➤ Însușirea principiilor metodelor matematice și numerice relevante pentru soluționarea ecuațiilor modelelor matematice ➤ Analiza și evaluarea reacțiilor chimice, a reactoarelor chimice, ale parametrilor de operare și soluțiilor constructive necesare respective, funcție de condițiile de reacție, produsele obținute și de performanțele dorite ale reactorului modelat ➤ Dobândirea capacității de a alege parametri de operare optimi pe baza soluțiilor rezultate din modelele formulate, de a analiza critic modelul unui reactor chimic și de a propune soluții pentru ameliorarea modelului, de a folosi un model matematic pentru ameliorarea și optimizarea performanțelor unui reactor chimic ➤ Cunoașterea metodelor de prelucrare a datelor experimentale, industriale

	sau de laborator, pentru determinarea parametrilor cinetici, esențiali pentru formularea modelului matematic al unui reactor chimic
--	---

7. Conținuturi

7.1. Curs	Nr. ore	Metode de predare	Observații*
1-. Introducere, obiectivele disciplinei. Mărimi termodinamice de reacție și elemente de cinetică chimică utile în modelarea reactoarelor chimice	2	Expunere interactivă / Problematizarea / Exemplificarea și comparația cu rezultatele și experiența personală în domeniul de specialitate, cu rezultate din industrie sau resurse online de pe web Predarea și exemplificarea asistată de calculator Conversația euristică/ Analiza comparativă	
2-. Identificarea sistemului unitar reactor chimic. Clasificarea reactoarelor chimice. Identificarea proceselor relevante dintr-un reactor chimic	2		
3-. Algoritmul de elaborare a modelului matematic al unui reactor chimic. Ecuații cinetice (legi de viteză) ale reacțiilor chimice, relații generale de bilanț și de transfer	2		
4-. Modele cu parametri distribuiți în timp : reactoare chimice cu amestecare cu diferite regimuri termice (izoterm, adiabatic, altele)	3		
5-. Modele cu parametri distribuiți în spațiu : reactoare chimice cu deplasare (tubulare), cu diferite regimuri termice	3		
6-. Modelarea reactoarelor catalitice. Ecuații de difuzie intra- și extragranulă de catalizator	3		
7-. Soluționarea modelelor matematice formate din ecuații algebrice și simularea folosind aceste modele. Prezentare generală a metodelor numerice specifice	2		
8-. Soluționarea modelelor matematice formate din ecuații diferențiale ordinare și simularea utilizând astfel de modele. Prezentare generală a metodelor numerice relevante	3		
9-. Soluționarea modelelor matematice folosind ecuații diferențiale cu derivate parțiale și simularea utilizând acest tip de modele. Prezentare generală a metodelor numerice specifice	2		
10-. Instrumente software folosite pentru modelarea și simularea reacțiilor și reactoarelor chimice : programe generale (Mathcad, Origin, Excel) sau specializate (Pro II, Hysys sau ChemKin)	2		
11-. Determinarea parametrilor cinetici din date experimentale - tehnici de regresie și de programarea experiențelor pentru obținerea parametrilor cinetici – descriere generală	2		
12-. Criterii pentru selectarea unei anumit model, a ipotezelor simplificatoare și a metodei relevante de soluționare. Recapitulare	2		
Bibliografie			
a. Cărți, monografii			
1. G. Bozga, O. Muntean, <i>Reactoare chimice</i> , vol. 1 – <i>Reactoare omogene</i> , vol. 2 – <i>Reactoare eterogene</i> , Ed. Tehnică, București, 2000, 2001.			
2. L. M. Ferrareso-Lona, <i>A step by step approach to the modeling chemical engineering processes. Using Excel for simulation</i> , Springer, Cham, 2018.			
3. H. S. Fogler, <i>Elements of chemical reaction engineering</i> , 4th ed., Prentice Hall - Pearson, Upper Saddle River, 2005.			
4. H. S. Fogler, <i>Essential of chemical reaction engineering</i> , Prentice Hall - Pearson, Upper Saddle River, 2010.			
5. G. F. Froment, K. B. Bischoff, J. De-Wilde, <i>Chemical reactor analysis and design</i> , 3rd ed., Wiley, Hoboken, 2010.			
6. O. Levenspiel, <i>Chemical reaction engineering</i> , 3rd ed., Wiley, Hoboken, 1999 (prima ediție și în lb.			

română : O. Levenspiel, *Tehnica reacțiilor în ingineria chimică*, Ed. Tehnică, București, 1967).

7. V. Marinoiu, C. Strătuță, A. Petcu, C. Pătrășcioiu, C. Marinescu, *Metode numerice aplicate în industria chimică*, Ed. Tehnică, București, 1986.
8. J. Villiermaux, *Génie de la réaction chimique. Conception et fonctionnement des réacteurs*, 2ème ed., Tec & Doc – Lavoisier, Paris, 1993.
9. R. Mihail, *Modelarea reactoarelor chimice*, Ed. Tehnică, București, 1976.
10. L. K. Doraiswamy, D. Uner, *Chemical reaction engineering. Beyond the fundamentals*, CRC, Boca Raton, 2014.
11. V. I. Korobov, V. F. Ochkov, *Chemical kinetics with Mathcad and Maple*, Springer, Viena, 2011.
12. L. Filotti, *Modelarea reactoarelor chimice. Note de curs și exemple*, UPG din Ploiești, 2022 (disponibil online pe platforma piazza sau de e-learning a facultății).

b. Periodice

- *Advances in Chemical Engineering ; Studies in Surface Science and Catalysis ; ACS Symposium Series*
- *Chemical Engineering Journal ; Chemical Engineering Research and Design ; Industrial & Engineering Chemistry Research ; Chemical Engineering & Process : Process Intensification*

7.2. Seminar / laborator	Nr. ore	Metode de predare	Observații*
1-. Norme și reguli de SSM generale și specifice sălii de calculatoare	1	Exemplificarea Argumentația Discuția colocvială și interactivă Expunere interactivă Exemplificare Folosirea resurselor online Colocvială, cu participarea studenților la rezolvarea problemelor și discuția rezultatelor obținute Lucrul în echipă	
2-. Ecuații diferențiale : instrument matematic indispensabil pentru descrierea proceselor chimice și fizice cu parametri distribuți	2		
3-. Descrierea platformei de calcul Mathcad și programului Origin de analiză statistică a datelor	2		
4-. Modelarea și simularea reactoarelor chimice discontinue folosind platforma Mathcad	4		
5-. Modelarea și simularea unui reactor continuu cu amestecare perfectă (Mathcad) ; aplicații	4		
6-. Modelarea și simularea reactoarelor chimice tubular (Mathcad) cu și fără transport radial ; model matematic cu derivate parțiale ; aplicații	4		
7-. Determinarea ecuației cinetice și a parametrilor cinetici respectivi pentru o reacție catalitică eterogenă din date experimentale – aplicație	2		
8-. Modelarea și simularea reacțiilor și reactoarelor chimice cu programele Pro-II, Hysys sau ChemKin	4		
9-. Studiu de caz : selectarea ecuațiilor modelului, a ipotezelor simplificatoare, a metodelor de soluționare	5		

Bibliografie

1. *Perry's Chemical Engineers' Handbook* (D. W. Green, R. H. Perry, Eds.), 8th ed., McGraw-Hill, New York, 2008.
2. O. Muntean, A. Woinaroschy & G. Bozga, *Aplicații la calculul reactoarelor chimice*, Ed. Tehnică, București, 1984.
3. M. Schmal, *Chemical reaction engineering. Essentials, exercises and examples*, CRC-Balkema, Leiden, 2014.
4. H. S. Fogler, B. Vicente, M. Nori, *Elements of chemical reaction engineering*, 4th ed., Solutions manual, - Pearson, Upper Saddle River, 2005.
5. R. J. Kee, M. E. Coltrin, P. Glarborg, *Chemically reacting flow - Theory and practice*, Wiley-Interscience, Hoboken (NJ), 2003.
6. U. M. Ascher, L. R. Petzold, *Computer methods for ordinary differential equations and differential-algebraic equations*, SIAM, Philadelphia, 1998.
7. S. C. Chapra, R. P. Canale, *Numerical methods for engineers*, 7th ed., McGraw-Hill, New York, 2015.
8. J. M. Cooper, *Introduction to partial differential equations with Matlab*, Birkhauser, Boston, 1998.
9. A. P. Solodov, V. F. Ochkov, *Differential models. An introduction with Mathcad*, Springer, Berlin, 2005.

7.3. Proiect	Nr. ore	Metode de predare	Observații
---	---	---	

* Se va menționa, dacă este cazul, modul de desfășurare on-line al activităților, conform cu pc. 3.

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

➤ descrierea, analiza și utilizarea conceptelor și teoriilor avansate pentru cunoașterea și operarea instalațiilor industriale ➤ însușirea elementelor de bază despre procesele tehnologice și reactoarele chimice respective, a parametrilor de exploatare a acestora, în corelație cu tipul reacției chimice, produselor dorite și cu varianta constructivă a reactorului ➤ estimarea comparativă, calitativă, a performanțelor în condițiile de exploatare de laborator, la nivel de pilot sau industrial ➤ aprecierea soluțiilor tehnice de mentenanță, durabilitate sau de ameliorare a performanțelor procedurii sau tehnologiei de prelucrare folosind tehnicile de modelare matematică

9. Evaluare

Tip activitate	10.1. Criterii de evaluare	10.2. Metode de evaluare	10.3. Pondere din nota finală
9.1. Curs	- dobândirea cunoștințelor teoretice predate la curs - considerarea proceselor fizico-chimice din reactoarele chimice cu noțiunile teoretice de termodinamică, cinetică și inginerie chimică și transpunerea corectă a acestora într-un model matematic coerent ; soluționarea studiului de caz - corectitudinea soluției studiului de caz - rigurozitatea științifică a prezentării, ce trebuie să cuprindă și discuția rezultatelor	Verificare orală / Prezentare orală a aplicației din studiul de caz (pe echipe)	70 %
9.2. Seminar / laborator	- participarea proactivă, fizică (sau on-line, dacă este cazul) la activitățile didactice desfășurate - întocmirea temelor de studiu	Control vizual / oral, discuție	30%
9.3. Proiect	---	---	---
9.4. Standard minim de performanță			
➤ Nota 5 : - cunoașterea tipurilor de ecuații (cinetică, de bilanț de masă, termic, de impuls) folosite la alcătuirea modelului matematic al unui reactor chimic și a principalelor ipoteze simplificatoare folosite ; - cunoașterea ecuațiilor de bază din modelul folosit în studiul de caz, justificarea principiilor care au stat la baza alegerii acestora ; - corectitudinea din punct de vedere științific a modelului matematic prezentat			

Data
completării
22/09/2025

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de
seminar/laborator

Semnătura titularului de
proiect

Data avizării în
departament
26/09/2025

Director de departament
Conf. dr. ing. Neagu Mihaela
(Semnătură)

Decan
Conf. dr. ing. Cristina Dușescu-Vasile
(Semnătură)