

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Аксёнов Александр Викторович
Должность: Декан химического факультета
Дата подписания: 19.06.2026 14:42:46
Уникальный программный ключ:
073635787274402487435acab3ab854864d48641

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«СЕВЕРО-КАВКАЗСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета
д-р хим. наук, проф. Аксенов А.В.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Методы расчетной химии для моделирования химических процессов

Направление подготовки	18.03.01 Химическая технология
Направленность (профиль)	Химический инжиниринг и цифровые технологии
Форма обучения	Очная
Год начала обучения	2026
Реализуется	<u>6 семестре</u>

Разработано

Профессор кафедры физической химии
д-р техн. наук, проф. Овчаров С.Н.

Ставрополь, 2026

1. Цели и задачи освоения дисциплины

Целью изучения дисциплины является формирование набора профессиональных компетенций выпускника по направлению подготовки 18.03.01 Химическая технология.

В задачи изучения дисциплины входит формирование у студентов знаний о современных информационных технологиях и возможностях их применения для решения технологических задач в процессах химии и химической технологии, в том числе обработки информации с использованием прикладных программных средств.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к части, формируемой участниками образовательных отношений. Ее освоение происходит в 6 семестре.

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы

3.1. Наименование компетенций

Код и наименование профессиональной компетенции	Код и наименование индикатора достижения профессиональной компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующиеся этапы формирования компетенций, индикаторов
---	---	--

ПК-3. Способен определять тематику и инициировать научно-исследовательские и опытно-конструкторские работы, изучать научно-техническую информацию, опыт по тематике исследования, организовывать его осуществление, анализировать и обобщать результаты с использованием современных методов и информационных технологий	ИД-1 ПК-3 знает передовой отечественный и зарубежный опыт в области нефтегазохимии;	Знает технологию производства товарной продукции Знает технологию переработки нефти. Знает технологические схемы. Знает перспективы технического развития организации.
	ИД-2 ПК-3 знает стандарты, технические условия и другие руководящие материалы по разработке и оформлению научно-технической документации;	Знает технические требования, предъявляемые к сырью, материалам, готовой продукции. Знает передовой научно-технический отечественный и зарубежный опыт в области технологии нефти.
	ИД-3 ПК-3 умеет проводить работу по совершенствованию действующих и освоению новых технологических процессов;	Знает технические требования, предъявляемые к сырью, материалам, готовой товарной продукции. Знает методы измерений расхода сырья, материалов, топлива, реагентов. Знает методы измерений, контроля качества товарной продукции и компонентов
	ИД-4 ПК-3 умеет работать на современном технологическом и лабораторном оборудовании;	Умеет проводить сверку сходимости баланса потребляемого сырья и выработки товарной продукции. Умеет рассчитывать планируемую потребность присадок, реагентов, материалов для выполнения производственных заданий на планируемый период с указанием срока поставки.
	ИД-5 ПК-3 владеет методами анализа и систематизации научно-технической информации	Знает технические требования, предъявляемые к сырью, материалам, готовой товарной продукции. Знает методы измерений расхода сырья, материалов, топлива, реагентов. Знает методы измерений, контроля качества товарной продукции и компонентов.
ПК-4. Способен разрабатывать и реализовывать проекты в области нефтегазохимии, промышленного органического синтеза, полимерных и функциональных материалов с применением соответствующего	ИД-1 ПК-4 знает технологию нефтегазохимии и технологические схемы основных процессов	Знает технологию производства товарной продукции Знает технологию переработки нефти. Знает технологические схемы. Знает перспективы технического развития организации.
	ИД-2 ПК-4 знает современные программные продукты в проектировании технологий производства новой продукции	Знает технические требования, предъявляемые к сырью, материалам, готовой продукции. Знает передовой научно-технический отечественный и зарубежный опыт в области технологии нефти.
	ИД-3 ПК-4 умеет	Знает технические требования,

инструментария, цифровых технологий, а также методов моделирования	разрабатывать технологические проекты производства новой продукции	предъявляемые к сырью, материалам, готовой товарной продукции. Знает методы измерений расхода сырья, материалов, топлива, реагентов. Знает методы измерений, контроля качества товарной продукции и компонентов
	ИД-4 ПК-4 умеет проводить работу по совершенствованию действующих и освоению новых технологических процессов	Умеет проводить сверку сходимости баланса потребляемого сырья и выработки товарной продукции. Умеет рассчитывать планируемую потребность присадок, реагентов, материалов для выполнения производственных заданий на планируемый период с указанием срока поставки.
	ИД-5 ПК-4 владеет методами проведения научных исследований и экспериментов испытания новой техники и технологии в производстве продукции	Знает технические требования, предъявляемые к сырью, материалам, готовой товарной продукции. Знает методы измерений расхода сырья, материалов, топлива, реагентов. Знает методы измерений, контроля качества товарной продукции и компонентов.

4. Объём учебной дисциплины (модуля) и формы контроля

Объём занятий: всего: 3 з.е. 108 акад.ч.	ОФО, в акад. часах
Контактная работа:	54
Лекции/из них практическая подготовка	36
Лабораторных работ/из них практическая подготовка	-
Практических занятий/из них практическая подготовка	18/4
Самостоятельная работа	54
Формы контроля	
Экзамен семестр	-
Зачет семестр	-
Зачет с оценкой 6 семестр	-
Курсовая работа	нет

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием количества часов и видов занятий

№	Раздел (тема) дисциплины и краткое содержание	Формируемые компетенции, индикаторы	очная форма				
			Контактная работа обучающихся с преподавателем /из них в форме практической подготовки, часов			Самостоятельная работа, часов	Формы текущего контроля успеваемости
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы		
6 семестр							
1	Введение. Возникновение и этапы становления информационных технологий. Информационные технологии как инструмент решения задач химии и химической технологии. Основные области применения информационных технологий в химии и химической технологии	ПК-3 ПК-4	4	2		6	Собеседование
2	Базовые информационные технологии. Мультимедиа технологии. Геоинформационные технологии. Технологии защиты информации. ASE-технологии. Телекоммуникационные технологии. Технологии искусственного интеллекта. Технологии программирования. Облачные технологии.	ПК-3 ПК-4	4	2		6	Собеседование

3	Прикладные информационные технологии в области химии и химической технологии. Информационно-поисковые системы химической информации. Хемоинформатика, хеометрика и вычислительная химия.	ПК-3 ПК-4	4	2		6	Собеседование
4	Экспериментально-статистические модели химических объектов на основе пассивного эксперимента. Дисперсионный анализ. Корреляционный и регрессионный анализ.	ПК-3 ПК-4	4	2		6	Собеседование
5	Экспериментально-статистические модели химических объектов на основе активного эксперимента. Факторный эксперимент: понятийный аппарат, планы первого порядка, статистический анализ модели. Последовательность действий по планированию, проведению и расчету полного факторного эксперимента	ПК-3 ПК-4	4	2		6	Собеседование
6	Экспериментально-статистические модели химических объектов на основе активного эксперимента. Планы второго порядка. Последовательность действий по планированию, проведению и расчету результатов эксперимента на основе ортогонального центрального композиционного плана	ПК-3 ПК-4	4	2		6	Собеседование

7	Основные понятия и общая характеристика химикотехнологических систем. Понятие химикотехнологической системы. Химическое предприятие как сложная кибернетическая система. Классификация моделей ХТС. Характеристика технологических операторов. Понятие технологической топологии ХТС. Виды технологических связей между операторами. Постановка задач анализа и синтеза ХТС.	ПК-3 ПК-4	4	2		6	Собеседование
8	Расчет материально-энергетических балансов химико-технологических систем. Общий вид системы уравнений балансов. Совместность и обусловленность систем уравнений балансов ХТС. Методы решения систем уравнений балансов ХТС. Прямые методы решения систем линейных алгебраических уравнений. Итерационные методы решения систем линейных алгебраических уравнений. Системы нелинейных уравнений. Общая методика составления и решения систем уравнений балансов ХТС	ПК-3 ПК-4	4	2/2		6	Собеседование

9	Определение числа степеней свободы ХТС. Информационные потоки ХТС и их структура. Математические модели технологических операторов. Формы представления символических математических моделей технологических операторов ХТС. Матрицы преобразования технологических операторов. Матричный и детерминантный методы анализа химико-технологических систем.	ПК-3 ПК-4	4	2/2		6	Собеседование
	ИТОГО за 6 семестр		36	18/4	-	72	

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

Фонд оценочных средств (ФОС) для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине «Методы расчетной химии для моделирования химических процессов» базируется на перечне осваиваемых компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения дисциплины. ФОС обеспечивает объективный контроль достижения запланированных результатов обучения. ФОС включает в себя:

- описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания;
- методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций;
- типовые контрольные задания и иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений и уровня овладения формируемыми компетенциями в процессе освоения дисциплины.

ФОС является приложением к данной программе дисциплины.

7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Приступая к работе, каждый студент должен принимать во внимание следующие положения.

Дисциплина (модуль) построена по тематическому принципу, каждая тема представляет собой логически завершённый раздел.

Лекционный материал посвящён рассмотрению ключевых, базовых положений курсов и разъяснению учебных заданий, выносимых на самостоятельную работу студентов.

Практические занятия проводятся с целью закрепления усвоенной информации, приобретения навыков её применения при решении практических задач в соответствующей предметной области.

Лабораторные работы направлены на приобретение опыта практической работы в соответствующей предметной области.

Самостоятельная работа студентов направлена на самостоятельное изучение дополнительного материала, подготовку к практическим и лабораторным занятиям, а также выполнения всех видов самостоятельной работы.

Для успешного освоения дисциплины, необходимо выполнить все виды самостоятельной работы, используя рекомендуемые источники информации.

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины 10.1.

Перечень основной и дополнительной литературы, необходимой для освоения дисциплины

8.1.1. Перечень основной литературы:

1. Капустин, В. М. Технология переработки нефти : в 4 ч. / В. М. Капустин, А. А. Гуреев. - М. : Химия, 2015. - 400 с. : ил. - (Учебники и учебные пособия для студентов высших учебных заведений). - Библиогр.: с. 394-395. - ISBN 978-5-98109-099-8.
2. Капустин, В. М. Технология производства автомобильных бензинов / В. М. Капустин. - М. : Химия, 2015. - 256 с. : ил. - (Учебники и учебные пособия для студентов высших учебных заведений). - Библиогр.: с. 253-254. - ISBN 978-5-98109-106-3.
3. Ахметов, С. А. Технология глубокой переработки нефти и газа : учеб. пособие для вузов / С. А. Ахметов. - СПб. : Недра, 2013. - 544 с. : ил. - Библиогр.: с. 541. - ISBN 978-5-905153-44-2..

8.1.2. Перечень дополнительной литературы:

1. Элверс, Б. Топлива. Производство, применение, свойства / Б. Элверс ; [пер. с англ.] ; под ред. Т.Н. Митусовой. - СПб.: ЦОП «Профессия», 2012. - 416 с. : ил. - ISBN 978-3-527-30740-1 (англ.). - ISBN 978-5-91884-037-5.
2. Анчита, Х. Переработка тяжелых нефтей и нефтяных остатков. Гидрогенизационные процессы / Х. Анчита, Дж. Спейт ; [пер. с англ.] ; под ред. О.Ф. Глаголевой. - СПб. : ЦОП «Профессия», 2012. - 384 с. : ил. - ISBN 978-0-8493-7033-5 (англ.) - ISBN 978-5-91884-040-5.

3. Переработка нефти : теоретические и технологические аспекты / под ред. Н. Г. Дигурова, Б. П. Туманяна. - М. : Издательство «Техника», ТУМА ГРУПП, 2012. - 496 с. : ил. - ISBN 5-93969-040-8.

4. Ченников И.В. Альтернативные моторные топлива: Учеб. пособие/Кубан. гос. технол. ун-т. - Краснодар: Изд. КубГТУ, 2006 - 192 с. - ISBN 5-8333-0236-6

5. Мановян, А. К. Технология переработки природных энергоносителей : учеб. пособие / А. К. Мановян. - М. : Химия : КолосС, 2004. - 456 с. - (Для высшей школы). - Библиогр.: с.453-455. - ISBN 5-98109-004-9

8.2.Перечень учебно-методического обеспечения самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

1. Электронный курс лекций.
2. Методические рекомендации к практическим занятиям.
3. Методические рекомендации к самостоятельной работе.

8.3.Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

1. [http:// biblioclub.ru](http://biblioclub.ru) - Университетская библиотека онлайн
2. <http://elanbook.com> - Издательство «Лань»
3. <http://www.chem.msu.ru> - сайт библиотеки химического факультета Московского государственного университета.
4. <http://lib.muctr.ru> - сайт Информационно-библиотечного центра Российского химико-технологического университета им. Д.И. Менделеева.
5. <http://library.spbu.ru> - сайт научной библиотеки им. М. Горького Санкт-Петербургского государственного университета.

9. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем *Информационные справочные системы:*

Поисковые системы: Yandex; Google; Bing. *Перечень программного обеспечения и информационных справочных систем*

Программное обеспечение:

1	Альт Рабочая станция 10
2	Альт Рабочая станция К
3	Альт «Сервер»
4	Пакет офисных программ - Р7-Офис

10. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Лекционные занятия	Учебная аудитория для проведения учебных занятий, оснащенная мультимедийным оборудованием и техническими средствами обучения.
Практические занятия	Учебная аудитория для проведения учебных занятий, оснащенная мультимедийным оборудованием и техническими средствами обучения.
Самостоятельная работа	Помещение для самостоятельной работы обучающихся оснащенное компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и возможностью доступа к электронной информационно-образовательной среде университета
Практическая подготовка	Осуществляется в структурных подразделениях университета и (или) в организациях, осуществляющих деятельность по профилю соответствующей образовательной программы, в том числе ее структурном подразделении

11. Особенности освоения дисциплины лицами с ограниченными возможностями здоровья

Обучающимся с ограниченными возможностями здоровья предоставляются специальные учебники, учебные пособия и дидактические материалы, специальные технические средства обучения коллективного и индивидуального пользования, услуги ассистента (помощника), оказывающего обучающимся необходимую техническую помощь, а также услуги сурдопереводчиков и тифлосурдопереводчиков.

Освоение дисциплины обучающимися с ограниченными возможностями здоровья может быть организовано совместно с другими обучающимися, а также в отдельных группах.

Освоение дисциплины обучающимися с ограниченными возможностями здоровья осуществляется с учетом особенностей психофизического развития, индивидуальных возможностей и состояния здоровья.

В целях доступности получения высшего образования по образовательной программе лицами с ограниченными возможностями здоровья при освоении дисциплины обеспечивается:

1) для лиц с ограниченными возможностями здоровья по зрению:

- присутствие ассистента, оказывающий студенту необходимую техническую помощь с учетом индивидуальных особенностей (помогает занять рабочее место, передвигаться, прочесть и оформить задание, в том числе, записывая под диктовку),

- письменные задания, а также инструкции о порядке их выполнения оформляются увеличенным шрифтом,

- специальные учебники, учебные пособия и дидактические материалы (имеющие крупный шрифт или аудиофайлы),

- индивидуальное равномерное освещение не менее 300 люкс,

- при необходимости студенту для выполнения задания предоставляется увеличивающее устройство;

2) для лиц с ограниченными возможностями здоровья по слуху:

- присутствие ассистента, оказывающий студенту необходимую техническую помощь с учетом индивидуальных особенностей (помогает занять рабочее место, передвигаться, прочитать и оформить задание, в том числе, записывая под диктовку),

- обеспечивается наличие звукоусиливающей аппаратуры коллективного пользования, при необходимости обучающемуся предоставляется звукоусиливающая аппаратура индивидуального пользования;

- обеспечивается надлежащими звуковыми средствами воспроизведения информации;

3) для лиц с ограниченными возможностями здоровья, имеющих нарушения опорно-двигательного аппарата (в том числе с тяжелыми нарушениями двигательных функций верхних конечностей или отсутствием верхних конечностей):

- письменные задания выполняются на компьютере со специализированным программным обеспечением или надиктовываются ассистенту;

12. - по желанию студента задания могут выполняться в устной форме.

12. Особенности реализации дисциплины с применением дистанционных образовательных технологий и электронного обучения

Согласно части 1 статьи 16 Федерального закона от 29 декабря 2012 г. № 273-ФЗ «Об образовании в Российской Федерации» под *электронным обучением* понимается организация образовательной деятельности с применением содержащейся в базах данных и используемой при реализации образовательных программ информации и обеспечивающих ее обработку информационных технологий, технических средств, а также информационно-телекоммуникационных сетей, обеспечивающих передачу по линиям связи указанной информации, взаимодействие обучающихся и педагогических работников. Под *дистанционными образовательными технологиями* понимаются образовательные технологии, реализуемые в основном с применением информационно-телекоммуникационных сетей при опосредованном (на расстоянии) взаимодействии обучающихся и педагогических работников.

Реализация дисциплины может быть осуществлена с применением дистанционных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично. Компоненты УМК дисциплины (рабочая программа дисциплины, оценочные и методические материалы, формы аттестации), реализуемой с применением дистанционных образовательных технологий и электронного обучения, содержат указание на их использование.

При организации образовательной деятельности с применением дистанционных образовательных технологий и электронного обучения могут предусматриваться асинхронный и синхронный способы осуществления взаимодействия участников образовательных отношений посредством информационно-телекоммуникационной сети «Интернет».

При применении дистанционных образовательных технологий и электронного обучения в расписании по дисциплине указываются: способы осуществления взаимодействия участников образовательных отношений посредством информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (ВКС-видеоконференцсвязь, ЭТ – электронное тестирование); ссылки на электронную информационно-образовательную среду СКФУ, на образовательные платформы и ресурсы иных организаций, к которым предоставляется открытый доступ через информационно-телекоммуникационную сеть «Интернет»; для синхронного обучения - время проведения онлайн-занятий и преподаватели; для асинхронного обучения - авторы онлайн-курсов.

При организации промежуточной аттестации с применением дистанционных образовательных технологий и электронного обучения используются Методические рекомендации по применению технических средств, обеспечивающих объективность результатов при проведении промежуточной и государственной итоговой аттестации по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета и программам магистратуры с применением дистанционных образовательных технологий (Письмо Минобрнауки России от 07.12.2020 г. № МН-19/1573-АН "О направлении методических рекомендаций").

Реализация дисциплины с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий осуществляется с использованием электронной информационно-образовательной среды СКФУ, к которой обеспечен доступ обучающихся через информационно-телекоммуникационную сеть «Интернет», или с использованием ресурсов иных организаций, в том числе платформ, предоставляющих сервисы для проведения видеоконференций, онлайн-встреч и дистанционного обучения (МТС-Линк), а также с использованием возможностей социальных сетей для осуществления коммуникации обучающихся и преподавателей.

Учебно-методическое обеспечение дисциплины, реализуемой с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий, включает представленные в электронном виде рабочую программу, учебно-методические пособия или курс лекций, методические указания к выполнению различных видов учебной деятельности

обучающихся, предусмотренных дисциплиной, и прочие учебно-методические материалы, размещенные в информационно-образовательной среде СКФУ.