Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение

высшего образования

«Камчатский государственный университет имени Витуса Беринга»

|  |
| --- |
| Рассмотрено и утверждено на заседании кафедры математики и физики |
| «12» апреля 2022 г., протокол № 07 |

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

**2.1.4 СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ТЕХНОЛОГИИ**

**Область науки:** 1. Естественные науки

**Группа научных специальностей:** 1.2. Компьютерные науки и информатика

**Научная специальность:** 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

**Форма обучения:** очная

**Курс** 1-3 **Семестр** 1-6

**Зачет:** 2 семестр

**Зачет с оценкой:** 4 семестр

**Экзамен:** 6 семестр

Петропавловск-Камчатский 2022 г.

Рабочая программа составлена с учетом федеральных государственных требований к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), условиям их реализации, срокам освоения этих программ с учетом различных форм обучения, образовательных технологий и особенностей отдельных категорий аспирантов (адъюнктов) (утв. приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 20.10.2021 № 951).

Разработчик:

доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры математики и физики

Р.И. Паровик

СОДЕРЖАНИЕ

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 1. | Цели и задачи освоения дисциплины……………………………………………….. | 4 |
| 2. | Место дисциплины в структуре ОП ВО…………………………………………….. | 4 |
| 3. | Планируемые результаты обучения по дисциплине……………………………….. | 4 |
| 4. | Содержание дисциплины…………………………………………………………….. | 5 |
| 5. | Тематическое планирование…………………………………………………………. | 6 |
| 6. | Самостоятельная работа……………………………………………………………… | 13 |
| 7. | Тематика заданий текущего контроля……………………………………………..... | 19 |
| 8. | Перечень вопросов к экзамену………...…………………………………………….. | 20 |
| 9. | Учебно-методическое и информационное обеспечение…………………………... | 21 |
| 10. | Формы и критерии оценивания учебной деятельности аспиранта……………….. | 23 |
| 11. | Материально-техническая база……………………………………………………… | 24 |

**1. Цель и задачи освоения дисциплины**

Целью освоения дисциплины является ознакомление аспирантов с методами атомистического моделирования, а также получение навыка использования современных суперкомпьютеров для проведения численных экспериментов с применением указанных методов.

В результате выполнения заданий по курсу аспиранты приобретают навыки:

- постановки численного эксперимента с использованием методов атомистического моделирования для прикладных и фундаментальных исследований в естественных науках;

- создания программ молекулярно-динамического моделирования, а также использования готовых пакетов программ;

- работы на суперкомпьютерных вычислительных системах в качестве пользователя;

- разработки параллельных программ для систем с общей и распределенной памятью.

Для усвоения дисциплины «Суперкомпьютерное моделирование и технологии» обучаемый должен обладать базовой естественнонаучной подготовкой и навыками специалиста или магистра.

**2. Место дисциплины в структуре ОП ВО**

Место дисциплины в структуре ОП ВО 2. Образовательный компонент.

Содержание дисциплины 2.1.4 «Суперкомпьютерное моделирование и технологии»

опирается на содержание дисциплин: 2.1.3 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»2.1.1 «История и философия науки».

Содержание дисциплины «Суперкомпьютерное моделирование и технологии» выступает опорой для освоения содержания следующих дисциплин: «Нелинейные математические модели», «Высокопроизводительные вычисления», «Жесткие системы дифференциальных уравнений», «Математические модели и методы в гидродинамике».

Содержание дисциплины выступает опорой для прохождения научно-исследовательской практики, для подготовки диссертационного исследования; осуществления научной деятельности, направленной на подготовку диссертации к защите.

**3. Планируемые результаты обучения по дисциплине**

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

|  |  |
| --- | --- |
| **Код**  **компетенции** | **Содержание** |
| ПК-1 | Способность обладать теоретическими знаниями и практическими умениями при осуществлении педагогической деятельности в области профессиональной подготовки обучающихся |
| ПК-2 | Способность разработки новых математических моделей объектов и явлений |
| ПК-3 | Способность разработки новых приближенных и аналитических методов для исследования математической модели |
| ПК-4 | Способность разработки эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов программ для проведения вычислительного эксперимента |
| ПК-5 | Способность разработки новых математических методов и алгоритмов проверки адекватности модели на основе экспериментальных данных |
| ПК-6 | Способность разработки новых математических методов и алгоритмов интерпретации экспериментальных данных на основе математической модели |

**4. Содержание дисциплины**

**Раздел 1. Методы атомистического моделирования.**

Тема 1. История и направление развития методов атомистического моделирования. Примеры применения методов молекулярной динамики для задач физики плазмы и конденсированного вещества. Многомасштабная модель. Сферы применения суперкомпьютеров, необходимость их применения в задачах атомистического моделирования. Обзор высокопроизводительных систем в России и за рубежом. Обсуждение последних редакций рейтингов Top-500 и Top-50.

Тема 2. Основы метода молекулярной динамики. Потенциал Леннарда-Джонса. Решение уравнений движения частиц. Ошибки интегрирования и ошибки округления. Точность сохранения энергии в МД системе. Выбор оптимального шага по времени.

Тема 3. Граничные условия при интегрировании уравнений движения в методе молекулярной динамики. Метод ближайшего образа. Структура программ МД моделирования, простейшая программа для Леннард-Джонсоновского потенциала.

Тема 4. Начальные условия, способы расстановки частиц. Применение термостатов Берендсена и Нозе-Хувера. Расчет давления и использование баростатов.

Тема 5. Метод Монте-Карло для моделирования систем многих частиц. История и обоснование метода. Алгоритм Метрополиса. Выбор амплитуды случайных источников.

Тема 6. Расчет корреляционных функций и равновесных функций распределения. Стохастические свойства динамических систем. Моделирование неравновесных процессов.

Тема 7. Иерархия потенциалов взаимодействия частиц для различной степени детализации моделируемой системы. Модели взаимодействия нейтральных атомов и молекул, силовые поля для биологических систем, многочастичные потенциалы для металлов.

**Раздел 2. Многоядерные процессоры. Параллельное программирование для систем с общей памятью.**

Тема 1. Качественный переход от последовательных к массивно-параллельным архитектурам и алгоритмам. Классификация вычислительных систем. Внутренний параллелизм современных процессоров, скалярная и суперскалярная архитекутры, конвейер команд. Многоядерные процессоры. Модели взаимодействия с памятью UMA и NUMA. Перспективы наращивания числа ядер, проблема когерентности кэша. (лекции – 2 часа)

Тема 2. Особенности создания параллельных программ для систем с общей памятью.

Поддержка параллелизма на уровне операционной системы. Процессы (process) и потоки (threads). Создание многопоточных программ с использованием базовых средств операционных систем.

Тема 3. Синхронизация потоков и детерминированность результатов работы программы. Локальные и общие переменные потоков, безопасный доступ к общим переменным. Побочные эффекты, реентерабельность процедур. Избыточная синхронизации потоков, тупики.

Тема 4. Распараллеливание программ с использованием технологии OpenMP. Параллелизм по задачам и по данным. Использование высокоуровневых библиотек и параллель-ных языков программирования. Отладка параллельных программ.

Тема 5. Теоретические основы параллельных алгоритмов. Понятия загруженности, производительности и ускорения. Информационная зависимость операций, графы исполнения. Достаточные условия Бернстайна. Распараллеливание циклов с информационными зависимостями.

**Раздел 3. Архитектура суперкомпьютеров. Параллельное программирование для систем с распределенной памятью.**

Тема 1. Технологические проблемы повышения быстродействия компьютеров, путь к экзафлопсной производительности. Проблемы энергопотребления и надежности суперкомпьютеров. Архитектура и программное обеспечение типичного суперкомпьютерного

кластера. Системы управления очередями задач (PBS, SLURM).

Тема 2. Технология MPI. Классификация функций MPI и основные понятия. Компиляция и запуск программ. Функции двухточечного обмена сообщениями. Функции коллективного обмена сообщениями.

Тема 3. Односторонняя и двухсторонняя модели обмена сообщениями. Дополнительные возможности стандарта MPI-2.

**Раздел 4. Оптимизация и распараллеливание в задачах атомистического моделирования.**

Тема 1. Оптимизация расчета взаимодействия частиц, списки Верле, связанные списки. Параллельные алгоритмы: декомпозиция по частицам и по пространству. Эффектив-ность распараллеливания. Оптимизация для дальнодействующих потенциалов.

Тема 2. Применение графических ускорителей (ГУ) для вычислений, не связанных с обработкой графических изображений. Архитектура ГУ, организация памяти и избежание задержек, связанных с обращением к памяти. Средства разработки программ для ГУ. Кластеры на основе гибридных систем, включающих ГУ. Эффективность применения ГУ для задач атомистического моделирования.

Тема 3. Обзор пакетов молекулярно-динамического моделирования. Классическая и квантовая молекулярная динамика.

**5. Тематическое планирование**

Дисциплина

Шифр по учебному плану, наименование: 2.1.4 «Суперкомпьютерное моделирование и технологии».

Научная специальность

1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Группа

Шифр группы, курс, семестр: Ма, 1-3 курс, 1-6 семестр.

Фамилия Имя Отчество, должность, кафедра: Паровик Роман Иванович, профессор кафедры математики и информатики.

**Модули дисциплины**

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **№** | **Наименование модуля** | **Лекции** | **Практики** | **Сам. работа** | **Всего, часов** |
| 1 | Методы атомистического моделирования | 12 | 12 | 57 | **81** |
| 2 | Многоядерные процессоры. Параллельное  программирование для систем с общей  памятью | 12 | 12 | 57 | **81** |
| 3 | Архитектура суперкомпьютеров. Параллельное программирование для систем с  распределенной памятью | 12 | 12 | 57 | **81** |
| 4 | Оптимизация и распараллеливание в задачах атомистического моделирования | 12 | 12 | 57 | **81** |
| **Всего** | | **48** | **48** | **228** | **324** |

**Тематический план**

**Модуль 1**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **№ темы** | **Тема** | **Кол-во часов** | **Компетенции по теме** |
|  | **Лекции** | **12** |  |
| 1 | История и направление развития методов атомистического моделирования | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 2 | Основы метода молекулярной динамики. | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 3 | Граничные условия при интегрировании уравнений движения в методе молекулярной динамики | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 4 | Начальные условия, способы расстановки частиц | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 5 | Метод Монте-Карло для моделирования систем многих частиц | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 6 | Расчет корреляционных функций и равновесных функций распределения | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
|  | **Практические занятия** | **12** |  |
| 1 | Примеры применения методов молекулярной динамики для задач физики плазмы и конденсированного вещества | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 2 | Потенциал Леннарда-Джонса. Решение уравнений движения частиц | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 3 | Метод ближайшего образа | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 4 | Применение термостатов Берендсена и Нозе-Хувера | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 5 | История и обоснование метода. Алгоритм Метрополиса | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 6 | Стохастические свойства динамических систем | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
|  | **Самостоятельная работа** | **57** |  |
| 1 | Многомасштабная модель. Сферы применения суперкомпьютеров, необходимость их применения в задачах атомистического моделирования | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 2 | Обзор высокопроизводительных систем в России и за рубежом | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 3 | Ошибки интегрирования и ошибки округления | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 4 | Точность сохранения энергии в МД системе. Выбор оптимального шага по времени | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 5 | Структура программ МД моделирования, простейшая программа для Леннард-Джонсоновского потенциала | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 6 | Стохастические свойства динамических систем | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 7 | Иерархия потенциалов взаимодействия частиц для различной степени детализации моделируемой системы | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 8 | Модели взаимодействия нейтральных атомов и молекул, силовые поля для биологических систем | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 9 | Многочастичные потенциалы для металлов | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 10 | Моделирование неравновесных процессов | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 11 | Обсуждение последних редакций рейтингов Top-500 и Top-50 | 7 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |

**Модуль 2**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **№ темы** | **Тема** | **Кол-во часов** | **Компетенции по теме** |
|  | **Лекции** | **12** |  |
| 1 | Качественный переход от последовательных к массивно-параллельным архитектурам и алгоритмам | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 2 | Особенности создания параллельных программ для систем с общей памятью | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 3 | Синхронизация потоков и детерминированность результатов работы программы | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 4 | Распараллеливание программ с использованием технологии OpenMP | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 5 | Теоретические основы параллельных алгоритмов | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 6 | Понятия загруженности, производительности и ускорения | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
|  | **Практические занятия** | **12** |  |
| 1 | Классификация вычислительных систем | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 2 | Поддержка параллелизма на уровне операционной системы | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 3 | Локальные и общие переменные потоков, безопасный доступ к общим переменным | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 4 | Параллелизм по задачам и по данным | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 5 | Информационная зависимость операций, графы исполнения | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 6 | Достаточные условия Бернстайна | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
|  | **Самостоятельная работа** | **57** |  |
| 1 | Внутренний параллелизм современных процессоров, скалярная и суперскалярная архитекутры, конвейер команд | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 2 | Многоядерные процессоры | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 3 | Перспективы наращивания числа ядер, проблема когерентности кэша | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 4 | Процессы (process) и потоки (threads) | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 5 | Побочные эффекты, реентерабельность процедур | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 6 | Использование высокоуровневых библиотек и параллельных языков программирования | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 7 | Отладка параллельных программ | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 8 | Распараллеливание циклов с информационными зависимостями | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 9 | Избыточная синхронизации потоков, тупики | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 10 | Создание многопоточных программ с использованием базовых средств операционных систем | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 11 | Модели взаимодействия с памятью UMA и NUMA | 7 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |

**Модуль 3**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **№ темы** | **Тема** | **Кол-во часов** | **Компетенции по теме** |
|  | **Лекции** | **12** |  |
| 1 | Архитектура суперкомпьютеров | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 2 | Параллельное программирование для систем с распределенной памятью | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 3 | Технологические проблемы повышения быстродействия компьютеров, путь к экзафлопсной производительности | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 4 | Технология MPI | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 5 | Односторонняя и двухсторонняя модели обмена сообщениями | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 6 | Дополнительные возможности стандарта MPI-2 | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
|  | **Практические занятия** | **12** |  |
| 1 | Проблемы энергопотребления и надежности суперкомпьютеров | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 2 | Архитектура и программное обеспечение типичного суперкомпьютерного кластера | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 3 | Системы управления очередями задач (PBS, SLURM) | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 4 | Классификация функций MPI и основные понятия | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 5 | Компиляция и запуск программ | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 6 | Функции двухточечного обмена сообщениями | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
|  | **Самостоятельная работа** | **57** |  |
| 1 | Функции коллективного обмена сообщениями | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 2 | Архитектура суперкомпьютеров | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 3 | Параллельное программирование для систем с распределенной памятью | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 4 | Технологические проблемы повышения быстродействия компьютеров, путь к экзафлопсной производительности | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 5 | Технология MPI | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 6 | Односторонняя и двухсторонняя модели обмена сообщениями | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 7 | Дополнительные возможности стандарта MPI-2 | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 8 | Системы управления очередями задач (PBS, SLURM) | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 9 | Классификация функций MPI и основные понятия | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 10 | Компиляция и запуск программ | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 11 | Функции двухточечного обмена сообщениями | 7 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |

**Модуль 4**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **№ темы** | **Тема** | **Кол-во часов** | **Компетенции по теме** |
|  | **Лекции** | **12** |  |
| 1 | Оптимизация расчета взаимодействия частиц, списки Верле, связанные списки | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 2 | Применение графических ускорителей (ГУ) для вычислений, не связанных с обработкой графических изображений | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 3 | Обзор пакетов молекулярно-динамического моделирования | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 4 | Параллельные алгоритмы: декомпозиция по частицам и по пространству | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 5 | Архитектура ГУ, организация памяти и избежание задержек, связанных с обращением к памяти | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 6 | Классическая и квантовая молекулярная динамика | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
|  | **Практические занятия** | **12** |  |
| 1 | Эффективность распараллеливания | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 2 | Средства разработки программ для ГУ | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 3 | Кластеры на основе гибридных систем, включающих ГУ | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 4 | Эффективность применения ГУ для задач атомистического моделирования | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 5 | Оптимизация для дальнодействующих потенциалов | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 6 | Классическая и квантовая молекулярная динамика | 2 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
|  | **Самостоятельная работа** | **57** |  |
| 1 | Оптимизация расчета взаимодействия частиц, списки Верле, связанные списки | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 2 | Применение графических ускорителей (ГУ) для вычислений, не связанных с обработкой графических изображений | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 3 | Обзор пакетов молекулярно-динамического моделирования | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 4 | Параллельные алгоритмы: декомпозиция по частицам и по пространству. | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 5 | Архитектура ГУ, организация памяти и избежание задержек, связанных с обращением к памяти | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 6 | Классическая и квантовая молекулярная динамика | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 7 | Эффективность распараллеливания | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 8 | Средства разработки программ для ГУ | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 9 | Кластеры на основе гибридных систем, включающих ГУ | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 10 | Эффективность применения ГУ для задач атомистического моделирования | 5 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |
| 11 | Оптимизация для дальнодействующих потенциалов | 7 | ПК-1; ПК-2; ПК-3; ПК-4; ПК-5; ПК-6 |

**6. Самостоятельная работа**

Самостоятельная работа включает две составные части: аудиторная самостоятельная работа и внеаудиторная.

*Самостоятельная аудиторная работа* включает выступление по вопросам практических занятий, выполнение практических заданий.

*Внеаудиторная самостоятельная работа* аспирантов заключается в следующих формах:

* проработка (изучение) материалов лекций;
* чтение и проработка рекомендованной основной и дополнительной литературы;
* поиск и проработка материалов из ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», периодической печати;
* выполнение домашних заданий в форме докладов;
* подготовка к текущему и итоговому (промежуточная аттестация) контролю знаний по дисциплине.

**6.1. Планы практических занятий**

Модуль 1 «Методы атомистического моделирования».

Практическое занятие № 1.

Примеры применения методов молекулярной динамики для задач физики плазмы и конденсированного вещества.

**План.**

1. Моделирование воздействия импульсных энерговкладов на конденсированную фазу: нагрев электронов и откольное разрушение
2. Моделирование динамики белков в водной среде

Практическое занятие № 2.

Потенциал Леннарда-Джонса. Решение уравнений движения частиц.

**План.**

Решение задач МД

Практическое занятие № 3.

Метод ближайшего образа.

**План.**

Решение задач МД методом ближайшего образа.

Практическое занятие № 4.

Применение термостатов Берендсена и Нозе-Хувера.

**План.**

Решение задач на применение термостатов Берендсена и Нозе-Хувера

Практическое занятие № 5.

История и обоснование метода. Алгоритм Метрополиса.

**План.**

Решение задачи Изинга по алгоритму Метрополиса и сопоставление с алгоритмами Монте-Карло.

Практическое занятие № 6.

Стохастические свойства динамических систем.

**План.**

1. Эргодические свойства стохастических динамических систем: неэргодичность, эргодичность, перемешивание, K-свойство (точность для эндоморфизмов)
2. Редукция и интегрируемость стохастических динамических систем

Модуль 2 «Многоядерные процессоры. Параллельное программирование для систем с общей памятью».

Практическое занятие № 1.

Классификация вычислительных систем.

**План.**

1. Актуальность современных вычислительных систем
2. Классификация Флинна
3. Средства параллельного программирования

Практическое занятие № 2.

Поддержка параллелизма на уровне операционной системы.

**План.**

1. Модели RAM и PRAM. Теорема об эмуляции.
2. Понятия ускорения, эффективности, стоимости параллельных алгоритмов.
3. Лемма Брента. Закон Амдала.

Практическое занятие № 3.

Локальные и общие переменные потоков, безопасный доступ к общим переменным.

**План.**

1. Потоки, блокировки и условные переменные в C++
2. Синхронизация потоков

Практическое занятие № 4.

Параллелизм по задачам и по данным.

**План.**

1. Параллелизм на уровне потоков
2. Функциональный параллелизм
3. Конвейерный параллелизм

Практическое занятие № 5.

Информационная зависимость операций, графы исполнения.

**План.**

1. Граф операции–операнды.
2. Методы вычислений.

Практическое занятие № 6.

Достаточные условия Бернстайна**.**

**План.**

1. Применение условий Бернстейна для определения возможности распараллеливания простых и вложенных циклов.
2. Эквивалентные преобразования и устранение истинных зависимостей в циклах

Модуль 3 «Архитектура суперкомпьютеров. Параллельное программирование для систем с распределенной памятью».

Практическое занятие № 1.

Проблемы энергопотребления и надежности суперкомпьютеров.

**План.**

1. Стратегия решения проблем энергопотребления
2. Стратегия решения проблем надежности

Практическое занятие № 2.

Архитектура и программное обеспечение типичного суперкомпьютерного кластера.

**План.**

1. Массивно-параллельные системы (MPP)
2. Симметричные мультипроцессорные системы (SMP)
3. Системы с неоднородным доступом к памяти (NUMA)
4. Кластеры

Практическое занятие № 3.

Системы управления очередями задач (PBS, SLURM).

**План.**

1. Система очередей PBS
2. Система очередей SLURM

Практическое занятие № 4.

Классификация функций MPI и основные понятия**.**

**План.**

1. Важнейшие функции MPI
2. Стандартный способ передачи сообщений
3. Групповые имена и недействительные процессы
4. Измерение времени
5. Способы передачи сообщений
6. Коллективные взаимодействия

Практическое занятие № 5.

Компиляция и запуск программ**.**

**План.**

1. Сборка MPI-программы на языке C/С++
2. Запуск программы через систему управления кластером SLURM

Практическое занятие № 6.

Функции двухточечного обмена сообщениями**.**

**План.**

1. Двухточечный (point-to-point, p2p) обмен
2. Стандартный блокирующий двухточечный обмен
3. Двухточечный обмен с буферизацией

Модуль 4 «Оптимизация и распараллеливание в задачах атомистического моделирования».

Практическое занятие № 1.

Эффективность распараллеливания.

**План.**

Расчет эффективности параллельной программы.

Практическое занятие № 2.

Средства разработки программ для ГУ.

**План.**

1. Технология CUDA
2. Технология OpenCL
3. Технология OpenACC

Практическое занятие № 3.

Кластеры на основе гибридных систем, включающих ГУ.

**План.**

1. Вычислительные кластеры на основе гетерогенных систем с участием графических ускорителей.

Практическое занятие № 4.

Эффективность применения ГУ для задач атомистического моделирования.

**План.**

1. Расчет эффективности применения GPU для задач атомистического моделирования

Практическое занятие № 5.

Оптимизация для дальнодействующих потенциалов**.**

**План.**

1. Потенциал Леннарда-Джонса
2. Потенциал Ми
3. Потенциал Морзе

Практическое занятие № 6.

Классическая и квантовая молекулярная динамика**.**

**План.**

* + - 1. МД-метод интегрирование Верле. Метод Эвальда.
      2. Уравнение Шредингера. Метод функционала плотности. Метод суперячейки. Метод итерационной диагонализации.

**6.2 Внеаудиторная самостоятельная работа**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **№ п/п** | **Наименование раздела** | **Наименование темы** | **Вид СР** |
| 1. | Методы атомистического моделирования | Многомасштабная модель. Сферы применения суперкомпьютеров, необходимость их применения в задачах атомистического моделирования | 1. изучение литературы; осмысление изучаемой литературы; 2. работа в информационно-справочных системах; 3. аналитическая обработка текста (конспектирование, реферирование); 4. составление плана и тезисов ответа в процессе подготовки к занятию; 5. решение задач; 6. подготовка сообщений по вопросам семинарских занятий |
| Обзор высокопроизводительных систем в России и за рубежом |
| Ошибки интегрирования и ошибки округления |
| Точность сохранения энергии в МД системе. Выбор оптимального шага по времени |
| Структура программ МД моделирования, простейшая программа для Леннард-Джонсоновского потенциала |
| Стохастические свойства динамических систем |
| Иерархия потенциалов взаимодействия частиц для различной степени детализации моделируемой системы |
| Модели взаимодействия нейтральных атомов и молекул, силовые поля для биологических систем |
| Многочастичные потенциалы для металлов |
| Моделирование неравновесных процессов |
| Обсуждение последних редакций рейтингов Top-500 и Top-50 |
| 2. | Многоядерные процессоры. Параллельное  программирование для систем с общей  памятью | Внутренний параллелизм современных процессоров, скалярная и суперскалярная архитекутры, конвейер команд |
| Многоядерные процессоры |
| Перспективы наращивания числа ядер, проблема когерентности кэша |
| Процессы (process) и потоки (threads) |
| Побочные эффекты, реентерабельность процедур |
| Использование высокоуровневых библиотек и параллельных языков программирования. |
| Отладка параллельных программ |
| Распараллеливание циклов с информационными зависимостями |
| Избыточная синхронизации потоков, тупики |
| Создание многопоточных программ с использованием базовых средств операционных систем |
| Модели взаимодействия с памятью UMA и NUMA |
| 3 | Архитектура суперкомпьютеров. Параллельное программирование для систем с  распределенной памятью | Функции коллективного обмена сообщениями |
| Архитектура суперкомпьютеров |
| Параллельное программирование для систем с распределенной памятью |
| Технологические проблемы повышения быстродействия компьютеров, путь к экзафлопсной производительности |
| Технология MPI |
| Односторонняя и двухсторонняя модели обмена сообщениями |
| Дополнительные возможности стандарта MPI-2 |
| Системы управления очередями задач (PBS, SLURM) |
| Классификация функций MPI и основные понятия |
| Компиляция и запуск программ |
| Функции двухточечного обмена сообщениями |
| 4 | Оптимизация и распараллеливание в задачах атомистического моделирования | Оптимизация расчета взаимодействия частиц, списки Верле, связанные списки |
| Применение графических ускорителей (ГУ) для вычислений, не связанных с обработкой графических изображений |
| Обзор пакетов молекулярно-динамического моделирования |
| Параллельные алгоритмы: декомпозиция по частицам и по пространству. |
| Архитектура ГУ, организация памяти и избежание задержек, связанных с обращением к памяти |
| Классическая и квантовая молекулярная динамика |
| Эффективность распараллеливания |
| Средства разработки программ для ГУ |
| Кластеры на основе гибридных систем, включающих ГУ |
| Эффективность применения ГУ для задач атомистического моделирования |
| Оптимизация для дальнодействующих потенциалов |

**7. Тематика заданий текущего контроля**

Ниже приведены примеры заданий для выполнения на практических занятиях и в форме домашнего задания.

1. **Синхронизация потоков в системах с общей памятью**. Добавить функции синхронизации в предложенную преподавателем программу, чтобы исключить потенциальную возможность конкуренции потоков («race condition»). Скомпилировать и проверить правильность работы полученной программы.

2. **Блочное распараллеливание на POSIX Threads**. Написать программу вычисления определенного интеграла методом трапеций с блочным распараллеливанием, используя POSIX Threads. Убедиться в правильности вычисления интеграла для произвольного числа потоков. Используя утилиту time построить зависимость ускорения от числа потоков. Для уменьшения погрешности результата время работы последовательной программы должно составлять не менее 30 сек.

3. **Блочное распараллеливание на OpenMP**. Написать программу вычисления определенного интеграла методом трапеций с блочным распараллеливанием, используя OpenMP. Убедиться в правильности вычисления интеграла для произвольного числа потоков. Используя утилиту time построить зависимость ускорения от числа потоков. Для уменьшения погрешности результата время работы последовательной программы должно составлять не менее 30 секю

4. **Блочно-циклическое распараллеливание на OpenMP**. Написать программу численного интегрирования, в которой сложность расчета подынтегральной функции зависит от аргумента (пример: f(x) = x\*exp(x) при a < x < x0 и f(x) = x\*exp(sin(x)\*cos(x))/(2+cos(x\*x)) при x0 <x < b). Реализовать схему блочно-циклического распараллеливания на OpenMP. Построить зависимость ускорения от числа потоков для минимального, промежуточного и максимального размера блока.

5. **Блочное распараллеливание на MPI.** Вычисление определенного интеграла с блочным распараллеливанием на MPI. Необходимо подобрать функцию и число шагов так, чтобы характерное время работы последовательного варианта программы (один процесс) было около 1 минуты. В качестве результата требуется построить график зависимости времени выполнения программы и эффективности распараллеливания от числа процессов в интервале 1-16 процессов.

6. **Блочно-циклическое распараллеливание на MPI.** Вычисление определенного интеграла с блочно-циклическим распараллеливанием на MPI. Необходимо подобрать функцию и число шагов так, чтобы характерное время работы последовательного варианта программы (один процесс) было около 1 минуты. В качестве результата требуется построить график зависимости времени выполнения программы и эффективности распараллеливания от числа процессов в интервале 1-16 процессов.

7. **Индивидуальное задание по методу молекулярной динамики или Монте-Карло**. Написать программу моделирования Леннард-Джонсоновской жидкости с периодическими граничными условиями (методом ближайшего образа). Вывести системы на равновесие при заданной температуре и плотности, рассчитать термодинамические параметры и равновесные функции распределения (по выбору преподавателя). Проверить правильность работы программы, сравнив результат с имеющимися в литературе данными. Определить скорость работы последовательного алгоритма в зависимости от размера системы. Распараллелить программу с использованием OpenMP или MPI (по согласованию с преподавателем). Исследовать эффективность распараллеливания, построив зависимость ускорения от числа процессов (потоков исполнения).

8. **Работа с пакетом молекулярно-динамического моделирования LAMMPS.** Изучение формата входных параметров, запуск последовательной и параллельной версий, проведение тестового моделирования леннард-джонсоновской жидкости, исследование быстродействия, эффективности распараллеливания, ускорения на ГУ, обработка выходных данных.

**8. Перечень вопросов к экзамену**

1. Классификация вычислительных систем, таксономия Флинна. Примеры систем различного типа.

2. Параллельные алгоритмы: распараллеливание по задачам и по данным.

3. Параллельные системы с общей памятью (SMP): ограничение на количество процессоров. Архитектуры UMA и NUMA.

4. Потоки (threads) и процессы (process) в многозадачных операционных системах. Выделение памяти, процессорного времени и других ресурсов процессам и потокам.

5. Создание потоков с использованием API POSIX Threads.

6. Синхронизация потоков. Примеры ошибок, связанных с отсутствием синхронизации. Объекты синхронизации POSIX Threads: взаимное исключение, сигнал, объект condvar.

7. Синхронизация потоков. Тупики (deadlocks) и необходимые условия их возникновения, принципы обнаружения и устранения тупиков.

8. Принцип программирования и компиляция программ с использованием OpenMP. Общие и локальные переменные потоков. Директивы распараллеливания.

9. Блочное и циклическое распараллеливание циклов. Алгоритмы распределения работы по потокам в OpenMP, директивы omp for и omp task.

10. Системы с распределенной памятью (MPP): особенности программирования по сравнению с SMP системами.

11. Общая схема программы с использованием библиотеки MPI. Компиляция и запуск MPI-программ.

12. Запуск последовательных и MPI-программ с использованием системы очередей PBS.

13. Функции передачи сообщений между двумя процессами в MPI. Классификация функций по способу синхронизации.

14. Блокирующие и неблокирующие функции приема-передачи в MPI.

15. Способы передача разнородных данных в одном сообщении в MPI.

16. Функции коллективного обмена сообщениями в MPI.

17. Односторонние коммуникации в MPI-2.

18. Использование графических ускорителей (ГУ) для научных вычислений. Особенности архитектуры ГУ. За счет чего достигается ускорение по сравнению с обычными процессорами? Основные проблемы и ограничения при написании программ для ГУ.

19. Численное интегрирование уравнений движения частиц в молекулярно-динамической (МД) системе c применением разностных схем Эйлера и Верле (Leap-Frog). Требования к потенциалу взаимодействия.

20. Выбор шага интегрирования и оптимальной разностной схемы. Точность сохранения полной энергии и импульса при моделировании NVE ансамбля.

21. Основные типы потенциалов взаимодействия для жидкостей и конденсированного состояния. Потенциал Леннарда-Джонса.

22. Граничные условия для МД ячейки. Метод ближайшего образа. Критерии выбора числа частиц.

23. Схема МД эксперимента. Как задать начальное состояние системы? Вывод МД системы на равновесие, использование терпостатов.

24. Метод Монте-Карло (МК) для моделирования систем многих частиц. Алгоритм Метрополиса.

25. Распараллеливание расчета взаимодействий между частицами: декомпозиция по пространству и по частицам.

**9. Учебно-методическое и информационное обеспечение**

9.1. Основная учебная литература:

1. Маликов, Р. Ф.  Основы математического моделирования : учебное пособие для вузов / Р. Ф. Маликов. — 2-е изд. — Москва : Издательство Юрайт, 2023. — 403 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-15279-1. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/520383> (дата обращения: 30.01.2023).
2. Советов, Б. Я.  Информационные технологии : учебник для вузов / Б. Я. Советов, В. В. Цехановский. — 7-е изд., перераб. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2023. — 327 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-00048-1. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/510751> (дата обращения: 30.01.2023).
3. Малявко, А. А.  Параллельное программирование на основе технологий openmp, cuda, opencl, mpi : учебное пособие для вузов / А. А. Малявко. — 3-е изд., испр. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2023. — 135 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-14116-0. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/514199> (дата обращения: 30.01.2023).

9.2. Дополнительная учебная литература:

1. Термодинамика необратимых процессов и нелинейная динамика : учебное пособие для вузов / Э. М. Кольцова, Л. С. Гордеев, Ю. Д. Третьяков, А. А. Вертегел. — 2-е изд., перераб. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2023. — 430 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-06923-5. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/516053> (дата обращения: 30.01.2023).
2. Бабичев, С. Л.  Распределенные системы : учебное пособие для вузов / С. Л. Бабичев, К. А. Коньков. — Москва : Издательство Юрайт, 2023. — 507 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-11380-8. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/518274> (дата обращения: 30.01.2023).
3. Акопов, А. С.  Имитационное моделирование : учебник и практикум для вузов / А. С. Акопов. — Москва : Издательство Юрайт, 2023. — 389 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-02528-6. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/511425> (дата обращения: 30.01.2023).
4. Замятина, О. М.  Вычислительные системы, сети и телекоммуникации. Моделирование сетей : учебное пособие для вузов / О. М. Замятина. — Москва : Издательство Юрайт, 2022. — 159 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-00335-2. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/490257> (дата обращения: 30.01.2023).
5. Лаврищева, Е. М.  Программная инженерия и технологии программирования сложных систем : учебник для вузов / Е. М. Лаврищева. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2023. — 432 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-07604-2. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/513067> (дата обращения: 30.01.2023).
6. Гостев, И. М.  Операционные системы : учебник и практикум для вузов / И. М. Гостев. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2022. — 164 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-04520-8. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/490157> (дата обращения: 30.01.2023).
7. Кубенский, А. А.  Функциональное программирование : учебник и практикум для вузов / А. А. Кубенский. — Москва : Издательство Юрайт, 2023. — 348 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-9916-9242-7. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/511994> (дата обращения: 30.01.2023).

9.3. Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети Интернет:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **Название электронного ресурса** | **Описание электронного ресурса** | **Используемый для работы адрес** |
| eLibrary – Научная электронная библиотека | Полныетекстыжурналовболее 40 издательств (ИНИОНРАН, Elsevier Science, Academic Press, Kluwer, Springer, Birkhauser Publishing, Blackwell Science, Pergamon идр.) | [www.elibrary.ru](http://fulltext/fulltextdb_redirect.php?fulltextdb_id=10) |
| ЭБС Юрайт | Ресурс для поиска изданий и доступа к тексту издания в отсутствие традиционной печатной книги.  Для удобства навигации по электронной библиотеке издания сгруппированы в каталог по тематическому принципу. Пользователям доступны различные сервисы для отбора изданий и обеспечения с их помощью комфортного учебного процесса.  В электронной библиотеке представлены все книги издательства Юрайт. Некоторые издания и дополнительные материалы доступны только в электронной библиотеке | https://urait.ru |
| ЭБС IPR BOOKS | Важнейший ресурс для получения качественного образования, предоставляющий доступ к учебным и научным изданиям, необходимым для обучения и организации учебного процесса в нашем учебном заведении. Объединяет новейшие информационные технологии и учебную лицензионную литературу, предназначенную для разных направлений обучения, с помощью которого вы сможете получить необходимые знания, подготовиться к семинарам, зачетам и экзаменам, выполнить необходимые работы и проекты | http://www.iprbookshop.ru |

9.4. Информационные технологии:

Каждый обучающийся в течение всего периода обучения обеспечен индивидуальным неограниченным доступом к электронно-библиотечной системе и к электронной информационно-образовательной среде организации.

Функционирование электронной информационно-образовательной среды обеспечивается соответствующими средствами информационно-коммуникационных технологий и квалификацией работников, ее использующих и поддерживающих. Функционирование электронной информационно-образовательной среды соответствует законодательству Российской Федерации.

**10. Формы и критерии оценивания учебной деятельности аспиранта**

На основании разработанной компетентностной модели выпускника образовательные цели представлены в виде набора компетенций как планируемых результатов освоения образовательной программы. Определение уровня достижения планируемых результатов освоения образовательной программы осуществляется посредством оценки уровня сформированности компетенции и оценки уровня успеваемости обучающегося по пятибалльной системе («отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно», «зачтено», «не зачтено»).

Основными критериями оценки в зависимости от вида работы обучающегося являются: сформированность компетенций (знаний, умений и владений), степень владения профессиональной терминологией, логичность, обоснованность, четкость изложения материала, ориентирование в научной и специальной литературе.

**Промежуточная аттестация**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **Уровень сформированности компетенции** | **Уровень освоения дисциплины** | **Критерии оценивания обучающихся** |
| **ЭКЗАМЕН** |
| Высокий | отлично | глубокое знание и понимание теоретического содержания дисциплины; использование новых ресурсов (технологий, средств) в решении профессиональных задач; увеличение доли собственного участия в профессиональных практических видах деятельности, не предусмотренных образовательной программой; расширение среды профессиональной деятельности, не предусмотренной образовательной программой; наличие навыков системной оценки качества своей профессиональной деятельности |
| Базовый | хорошо | полное знание и понимание теоретического содержания дисциплины; достаточная сформированность практических умений, продемонстрированная в ходе осуществлении профессиональной деятельности как в учебной, так и реальной практик; наличие навыков оценивания собственных достижений, определения проблем и потребностей в конкретной области профессиональной деятельности |
| Пороговый | удовлетворительно | понимание теоретического содержания дисциплины с незначительными пробелами; несформированность некоторых практических умений при применении знаний в конкретных ситуациях, наличие мотивационной готовности к самообразованию, саморазвитию |
| Компетенции не сформированы | неудовлетворительно | отсутствует понимание теоретического содержания дисциплины, несформированность практических умений при применении знаний в конкретных ситуациях, отсутствие мотивационной готовности к самообразованию, саморазвитию |

**11. Материально-техническая база**

Для реализации дисциплины оборудована учебная аудитория, укомплектованная учебной мебелью, мультимедийной техникой (проектор и ноутбук), экраном. Для самостоятельной подготовки аспирантов оборудовано помещение с учебной мебелью, компьютерами и подключением к сети Интернет и eLibrary – Научная электронная библиотека, ЭБС Юрайт, ЭБС IPR BOOKS.