

УДК: 681.3.01
PACS: 02.70.-c

Основные направления развития информационных технологий Национальной академии наук Азербайджана

А. С. Бондяков

Лаборатория информационных технологий, Объединенный институт ядерных исследований,
Россия, 141980, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, д. 6
Институт Физики НАН Азербайджана,
Азербайджан, AZ1143, г. Баку, ул. Г. Джавида, д. 33

E-mail: aleksey@jinr.ru

Получено 30 сентября 2014 г.

Грид-инфраструктура — компьютерная инфраструктура нового типа, обеспечивающая глобальную интеграцию информационных и вычислительных ресурсов. Грид-сегмент в Азербайджане был создан в 2008 году в Институте физики НАН при активной поддержке международных организаций ОИЯИ и CERN. Грид приобретает все большую популярность в научно-исследовательских и образовательных центрах Азербайджана. Среди основных направлений использования грид на данный момент можно выделить научные исследования в физике высоких энергий, физике твердого тела, энергетике, астрофизике, биологии, науках о Земле, а также в медицине.

Ключевые слова: грид-инфраструктура, информационные технологии, грид-сегмент, облачная инфраструктура

Basic directions of information technology in National Academy of Sciences of Azerbaijan

A. S. Bondyakov

Laboratory of Information Technologies, Joint Institute for Nuclear Research, 6 Joliot Curie st., Dubna, 141980, Russia
Institute of Physics, 33 H. Javid st., Baku, AZ1143, Azerbaijan

Grid is a new type of computing infrastructure, is intensively developed in today world of information technologies. Grid provides global integration of information and computing resources. The essence Conception of GRID in Azerbaijan is to create a set of standardized services to provide a reliable, compatible, inexpensive and secure access to geographically distributed high-tech information and computing resources a separate computer, cluster and supercomputing centers, information storage, networks, scientific tools etc.

Keywords: grid infrastructure, information technology, grid segment, cloud infrastructure

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2015, vol. 7, no. 3, pp. 657–660 (Russian).

В настоящее время в Азербайджане при активной поддержке Национальной академии наук интенсивно развиваются информационные технологии. Можно выделить несколько основных направлений:

- грид-инфраструктура;
- облачная инфраструктура;
- информационная безопасность.

На данный момент дата-центр Института физики включает в себя 300 двухпроцессорных и 8 блейд-серверов. Все серверы — на базе процессора Intel Xeon. Общая память составляет 200 ТВ. Общее количество ядер 950. 200 ядер — для грид-сегмента. 150 ядер выделено для локального кластера. 600 ядер — для учебного класса. Вся внутренняя сеть дата-центра построена на базе 1GbE.



(а)

(б)

Рис. 1. Серверное оборудование грид-сегмента.
(а) группа блейд-серверов, (б) хранилище данных)

Дата-центр Института физики НАН Азербайджана (ИФ) построен как единый информационно-вычислительный ресурс для всех направлений исследований, в которых участвуют сотрудники ИФ [Abdinov O. et al., 2013]. Все счетные ресурсы и ресурсы для хранения данных обслуживаются единым базовым программным обеспечением, позволяющим использовать ресурсы комплекса как в международных проектах распределенных вычислений, так и локально пользователями НАН. Системное программное обеспечение оптимизировано таким образом, чтобы обеспечить наиболее эффективное использование вычислительных ресурсов вместе с максимально защищенным и в то же время наиболее универсальным доступом к данным. Базовой операционной системой является ОС Linux. Дата-центр ИФ состоит в виртуальных организациях SEE-GRID (страны Черноморского бассейна) и EDU — учебно-исследовательская и тестовая грид-инфраструктура (ОИЯИ, Россия). Кроме того, в рамках виртуальной организации SEE-GRID дата-центр ИФ участвует в таких организациях, как EGI (European Grid Infrastructure) и NGI (National Grid Initiatives).

Серверное и сетевое оборудование представлено продукцией Supermicro и Cisco. Дата-центр Института физики работает в режиме 24/7. Защита оборудования от различных перепадов в электрической сети осуществляется средствами UPS и генератора. Климат-контроль обеспечивается прецизионными кондиционерами. Температура в машинном зале не превышает 18 °С.

Подготовлены необходимые условия для подключения к ресурсам грид-центра Института физики, научных и образовательных центров Азербайджана. Для этой цели используется сеть провайдера НАН–AZRENA.

Мониторинг ЦПУ, локальной сети и интернет-соединения в режиме реального времени осуществляется средствами GANGLIA и CACTI (рис. 4). Мониторинг грид-сервисов осуществляется средствами Nagios.

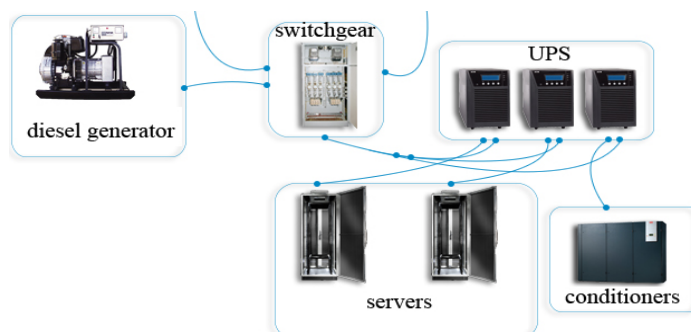


Рис. 2. Структура дата-центра Института физики

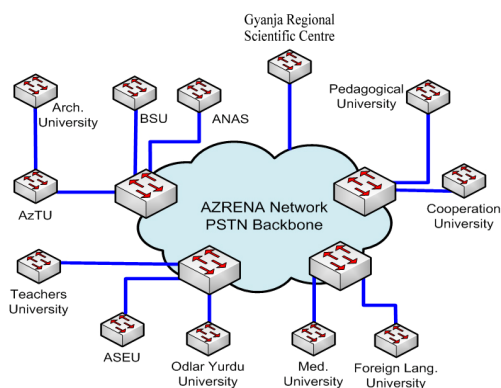


Рис. 3. Сеть провайдера НАН–AZRENA

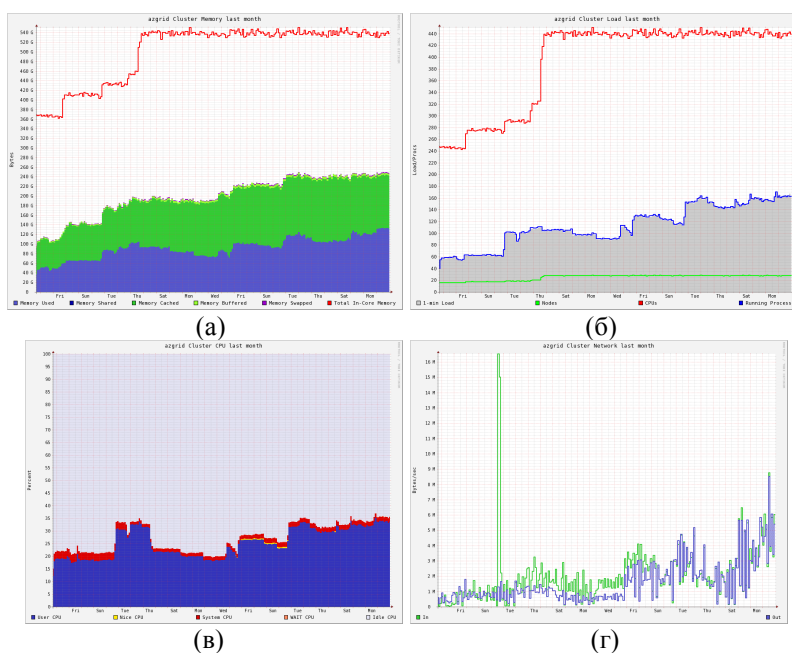


Рис. 4. Результаты мониторинга с 01.07.2014 по 01.08.2014: (а) ОЗУ; (б) выполняемые процессы; (в) ЦПУ; (г) локальная сеть и интернет-соединение

Для сложных математических расчетов были установлены следующие компиляторы: g77/gcc/g++ — GNU Fortran 77, C and C++ compilers version 3.4.6; gfortran/gcc4/g++4 — GNU Fortran 95, C and C++ compilers version 4.1.2; ifort/icc/icpc — Intel Fortran, C, C++ compilers version 11.1. GCC (GNU Compiler Collection).

Также были установлены следующие пакеты программного приложения:

Abinit — свободное программное обеспечение, распространяемое по GNU General Public License3 и предназначенное для расчетов полной энергии, электронной плотности и т. д. систем электронов и ядер (с использованием периодических граничных условий) в рамках метода функционала плотности с использованием базиса из плоских волн и псевдопотенциалов.

Quantum ESPRESSO — позволяет оптимизировать геометрию системы, минимизируя силы или напряжения, проводить молекулярно-динамическое моделирование, вычислять распределение электронной плотности, определять динамическую матрицу, эффективный заряд и многое другое.

Функциональность программ значительно расширяется имеющимися утилитами.

Авторами [Hashimzade et al., 2010; Huseinova et al., 2011; Allakhverdiev et al., 2012] с помощью пакета Abinit были рассчитаны зависимости структурных параметров кристаллической решетки, координаты атомов в зависимости от давления, линейные сжимаемости, а также фоновые частоты слоистых кристаллов TlGaSe2 при гидростатическом давлении в диапазоне 0–5.0 GPa (рис. 5).

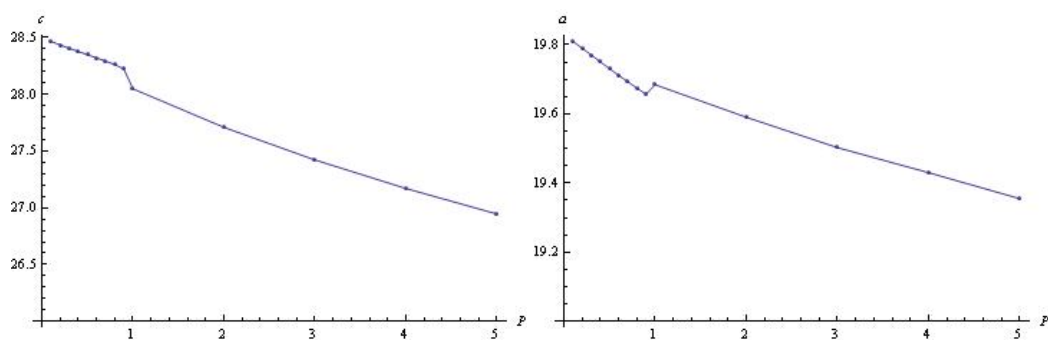


Рис. 5. Результаты расчета параметров решетки кристалла TlGaSe2

Список литературы

- Abdinov O., Bondyakov A., Khalilova Sh., Orujova N. Conception GRID Infrastructure in Azerbaijan // XXIV International Symposium NEC 2013. — 2013. — P. 9–12.
- Allakhverdiev K. R., Hashimzade F. M., Huseinova D. A., Nizametdinova M. A., Orudzhev G.S., Ulubey A. M., Kir M. H. Lattice dynamics of Ferroelectric TlInS2 crystal // Can. J. Phys. — 2012. — Vol. 90 — P. 407–412.
- Huseinova D. A., Hashimzade F. M., Orudzhev G. S., Nizametdinova M. A., Allakhverdiev K. R. Abinitio Lattice Dynamics and Gruneisen Parameters of TlGaSe2 // Japanese Journal of Applied Physics. — 2011. — Vol. 50. — DOI: 10.1143/JJAP.50.05FE05.
- Hashimzade F. M., Huseinova D. A., Orudzhev G. S., Nizametdinova M. A. Lattice dynamics of layered ferroelectric semiconductor compound TlGaSe // Materials Research Bulletin. — 2010. — Vol. 45. — P. 1438–1442.