

Розвиток високопродуктивних розрахункових комп'ютерних технологій в Інституті фізики напівпровідників

В.П. Брикса, О.Є. Беляєв¹

¹ Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, пр. Науки 45, Київ 03028, Україна

bryksa@isp.kiev.ua

Протягом останніх років різні наукові групи Інституту фізики напівпровідників (ІФН) НАН України займалися як фундаментальними, так і прикладними дослідженнями в галузі наноелектроніки і нанотехнологій. Накопичений значний досвід використання чисельних методів моделювання, прогнозування фізичних властивостей напівпровідникових матеріалів і комп'ютерної обробки даних, отриманих з використанням різних діагностичних методів дослідження напівпровідникових наноструктур в центрі колективного користування приладами НАН України "Діагностика напівпровідникових матеріалів, структур та приладних систем" при ІФН, серед яких, нанозондова ємнісна і електропровідна, атомно- і магнітно-силова мікроскопія, конфокальна скануюча Раманівська мікроскопія і 2D рентгеноструктурний аналіз. Великі масиви даних, які отримуються взаємодоповнюючими методиками під час комплексного вивчення напівпровідникових наноструктур, проведення моделювання фізичних властивостей та подальше здійснення неруйнівної діагностики робочих параметрів напівпровідникових приладів неминуче змушують застосовувати високопродуктивні обчислення з допомогою суперкомп'ютерів та кластерів з продуктивністю більше 100 GFLOP на вузол.

Внаслідок співробітництва ІФН НАН України та компанії ТОВ "Ентрі" був створений кластер на базі п'ятих серверів з 20-ма AMD Opteron Quad Core 8354 процесорами та Infiniband архітектурою сітки міжсерверного обміну даних. Пікова продуктивність створеного кластера на основі AMD Opteron серверів складає близько 400 GFLOP. Проте відомо, що реальна продуктивність кластера може сильно відрізнятись від пікової в залежності від архітектури материнських плат, пропускної здатності сітки та типу розрахункових задач. Виходячи із цих позицій ми запропонували побудувати кластер на основі AMD Opteron серверів з використанням AMD технології прямого доступу процесорів Opteron до оперативної пам'яті та з Hyper Transport архітектурою материнських плат. За допомогою Infiniband сітки реалізується міжсерверний обмін даними з швидкостями близько 20/40 Gbs. Також більшість задач, які вирішуються локальними користувачами інституту передбачає великі об'єми оперативної пам'яті на один вузол кластера (32-64 GB). Ці факти значно впливають на реальну продуктивність кластера, який створено на основі AMD Opteron серверів та наближують розрахункову продуктивність кластера до пікової.

Одним із найголовніших елементів кластера є операційна система і програмне забезпечення, яке встановлене на кожному вузлі. Всі сервери (обчислювальні вузли і сервер керування) функціонують під управлінням операційної системи Debian 5.0 на базі Linux ядра 2.6. Вибір лінукс сумісної системи обґрунтовується, тим що це операційна система реального часу в якій реалізується всі сервіси необхідні для роботи високопродуктивного та надійного розрахункового кластера, наприклад, підтримка Raid масивів та мережевих файлових систем зберігання даних, а також TFTP, DHCP, NTP, HTTP, FTP, SSH сервісів.

Запропонована логічна структура обчислювального кластеру повністю задовільняє одну з основних вимог щодо масштабованості кластерної системи – потребу в забезпеченні плавного розширення системи без реструктуризації всього кластеру та значних фінансових затрат. При виникненні необхідності дана задача легко вирішується простим додаванням додаткових серверів до вже існуючої HPC інфраструктури кластера.

Створений кластер був об'єднаний в національну грид-мережу і доступний як грид-ресурс: grid.semicond.kiev.ua. Даний високопродуктивний кластер дозволив співробітникам ІФН: i)розв'язувати ряд прикладних задач обробки і зберігання багатомірних топограм мікро-Раманівських і рентгеноструктурних експериментів з метою подальшого використання їх для фізичних, геологічних і біологічних аплікацій; ii)проводити розрахунки дво- і трьохвимірних карт розподілу рухливості і концентрації заряджених носіїв для GaN і ZnO структур, використовуючи дані раманівських та люмінесцентних досліджень напівпровідників; iii)розраховувати механічні напруження в тонкоплівкових структурах GaN вирощених на різних підкладках; iv)провести діагностику розподілу домішок В і N в полікристалічних плівках та розрахунки напружень в полікристалічних діамантових плівках зумовлених домішками і границями зерен; v)вивчити вплив легуючих домішок N, Co, Mn на електро-оптичні властивості ZnO і SiC матеріалів.