

---

# 계산과학 분야의 교육 및 융합연구 지원을 위한 EDISON 플랫폼

진두석\* · 정영진\* · 이종숙\* · 조금원\* · 정회경\*\*

\*한국과학기술정보연구원 · \*\*배재대학교

## EDISON Platform to Supporting Education and Integration Research in Computational Science

Du-Seok Jin\* · Young jin Jung\* · JongSuk Ruth Lee\* · Kumwon Cho\* · Hoe-Kyung Jung\*\*

\*Korea Institute of Science and Technology Information

\*\*Paichai University

E-mail : dsjin@kisti.re.kr

### 요 약

최근에는 열유체, 물리, 화학, 구조동역학, 전산설계 등의 응용과학 분야의 교육 및 연구에 실제 실험이 아닌 슈퍼컴퓨터 및 고성능 네트워크 기반의 사이버 인프라에서 과학적 가정에 의해 복잡한 공학문제를 수치적 모델링과 컴퓨터 시뮬레이션을 통해 해결하는 계산과학을 이용하는 최적의 방법론 및 기법들의 연구의 필요성이 증대되고 있다. 본 논문에서는 컴퓨팅 시뮬레이션 기법을 활용한 실험 체험형 교육의 일환으로, 이공계 교수, 학생, 연구자, 산업체 인력 등이 사이버 인프라스트럭처 기반으로 최신 시뮬레이션 SW를 활용하여 차세대 교육 연구를 융합할 수 있는 EDISON 개방형 통합 플랫폼을 제시한다. EDISON 플랫폼은 사용자들에게 보다 쉽고, 편하고, 효과적인 서비스 제공을 위해 3계층(EDISON 응용 프레임워크, EDISON 미들웨어, EDISON 인프라 자원)으로 구성되고 5개 분야(열유체, 화학, 물리, 구조동역학, 전산설계) 문제해결 환경을 위한 교육 연구용 웹 포털 서비스를 제공한다.

### ABSTRACT

Recently, a new theoretical and methodological approach for computational science is becoming more and more popular for analyzing and solving scientific problems in various scientific disciplines such as Computational fluid dynamics, Chemistry, Physics, Structural Dynamics, Computational Design and applied research. Computational science is a field of study concerned with constructing mathematical models and quantitative analysis techniques and using large computing resources to solve the problems which are difficult to approach in a physical experimentally. In this paper, we present R&D of EDISON open integration platform that allows anyone like professors, researchers, industrial workers, students etc to upload their advanced research result such as simulation SW to use and share based on the cyber infrastructure of supercomputer and network. EDISON platform, which consists of 3 tiers (EDISON application framework, EDISON middleware, and EDISON infra resources) provides Web portal for education and research in 5 areas (CFD, Chemistry, Physics, Structural Dynamics, Computational Design) and user service.

### 키워드

EDISON platform, Education-research integration, Computational Science, Computer Simulation

### 1. 서 론

본 논문에서는 컴퓨팅 시뮬레이션 SW를 활용한 응용과학 교육 및 연구를 보다 쉽고, 편하고, 효과적으로 수행할 수 있도록 지원하는 EDISON(EDucation & research INtegration through Simulation On the Net) 플랫폼을 제시한다. EDISON 플랫폼은 연구자 또는 개발자들이 웹 포털 개발환경에 접속하여 연구 성과를 최신 IT기술과 접목하여 시뮬레이션 SW를 개발한 후, 사용자들이 공동으로 사용할 수 있도록 EDISON 플랫폼에 등록하면, 사용자들은 웹 포털을 통해 문제해결을 위한 시뮬레이션 SW를 EDISON 플랫폼에서 선택한 후, 사이버 인프라스트럭처를 활용하여 문제를 해결하고 결과를 확인할 수 있다. 이와 같이 구성된 EDISON 플랫폼은 열유체, 화학, 물리, 구조동역학, 전산설계 등 다양한 분야의 문제해결 환경을 위한 교육 및 연구용 웹 포털 서비스를 제공한다.

### II. 관련 연구

Nanohub[1]는 미국 퍼듀(Purdue) 대학의 PUNCH(Purdue University Network Computing Hubs) 프로젝트에서 시작하여 NCN(Network for Computational Nanotechnology) 사업을 통해 개발되었으며, 풍부한 시뮬레이션 도구와 콘텐츠를 172개국 175,000여명의 사용자가 활용하고 있다. Nanohub는 편리한 사용자 인터페이스를 제공하는 HUBzero[2]를 기반으로 2011년 5월까지 350,000건의 시뮬레이션이 수행되었으며 연구분야에서 활용되는 문헌이 575건에 이른다. 또한, 시뮬레이션 도구 개발을 위한 Rappture(Rapid application Intrastructure)[3], 화상회의, 시뮬레이션 공유, 콘텐츠 변환 도구, 등의 서비스를 제공한다.

e-AIRS[4]는 웹 기반에서 원격으로 풍동실험을 요청하고, 글로벌 컴퓨팅 자원을 공동 활용해 수치해석을 하는 것은 물론 풍동실험과 수치해석 결과를 한 눈에 비교·분석까지 할 수 있는 환경을 제공하는 시스템이다. 2008년부터 전문 지식 없이도 쉽게 웹상에서 열유체 시뮬레이션 수업과 R&D를 수행할 수 있도록 e-AIRS 포털을 구축하여 제공한다.

### III. EDISON 플랫폼

EDISON 플랫폼은 사이버 인프라스트럭처를 기반으로 이공계 교수, 학생, 연구자, 산업체 인력 등이 시뮬레이션 SW 및 콘텐츠를 자유롭게 올리거나 실행하여 계산과학 분야의 교육 및 융합연구를 지원하는 웹 포털 서비스를 제공하는 것을

목표로 하고 있다. 이러한 문제해결 환경을 효과적으로 지원하기 위한 EDISON 플랫폼은 크게 3개의 계층(EDISON 응용 프레임워크, EDISON 미들웨어, EDISON 인프라 자원)으로 구성된다. 최상위 계층에는 시뮬레이션 관련 서비스 인터페이스를 담당하는 응용 프레임워크가 있고, 중간에는 자원과 서비스를 연계해주는 미들웨어 계층, 그리고 하단에는 컴퓨팅 자원관리 부분을 담당하는 인프라스트럭처 계층이 있다.

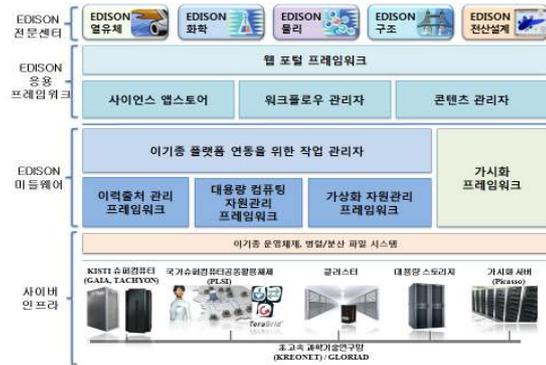


그림 1. EDISON 플랫폼 구조

#### 3.1 EDISON 응용 프레임워크

EDISON 응용 프레임워크는 그림 2와 같이 4개의 서브시스템(웹 포털 프레임워크, 사이언스 앱스토어, 워크플로우 관리자, 콘텐츠 관리자)으로 구성되며, 하위 계층의 EDISON 미들웨어 및 인프라 자원과 유기적으로 밀접하게 연계된다.



그림 2. EDISON 응용 프레임워크

EDISON 응용 프레임워크의 사이언스 앱스토어는 연구자들이 기존에 가지고 있거나 또는 새롭게 연구한 결과물을 웹 기반 시뮬레이션 수행 환경으로 손쉽게 제공할 수 있도록 시뮬레이션 SW 개발에 필요한 도구와 환경을 제공한다. 주요 기능으로는 연구자들이 시뮬레이션 SW를 웹을 통해 등록하는 코드스토어(Code Store) 기능과 시뮬레이션 SW 개발 및 테스트에 필요한 라이브

러리/도구/API를 포함하고 있는 개인 가상 서버 기반의 통합개발 환경을 제공한다. 또한, 개발된 시뮬레이션 SW를 웹 기반 수행환경으로 손쉽게 제공할 수 있도록 웹 인터페이스 자동 생성 기능을 제공한다.

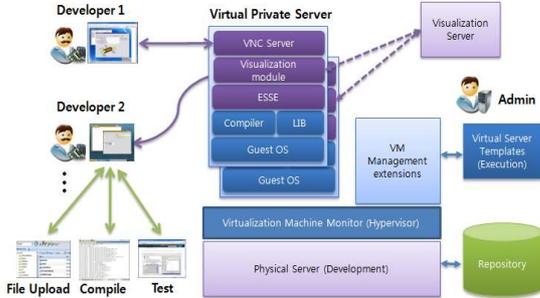


그림 3. 개인 가상 서버(Private Virtual Server)

시뮬레이션 워크플로우 관리자는 전처리기-시뮬레이션도구-후처리기로 워크플로우 과정을 조합하여 사용하는 방식을 지원한다. 즉, 사용자가 시뮬레이션 수행에 필요한 전처리기, 시뮬레이션 도구, 후처리기를 각각 쉽고 정확하게 찾을 수 있는 방법 제공을 위해 키워드 기반 탐색, 시뮬레이션 대상 구조 형태에 따른 탐색 등의 방법을 제공하며, 동시에 해당 분야에 특화된 문제 기반 시뮬레이션 도구 필터링을 제공한다.

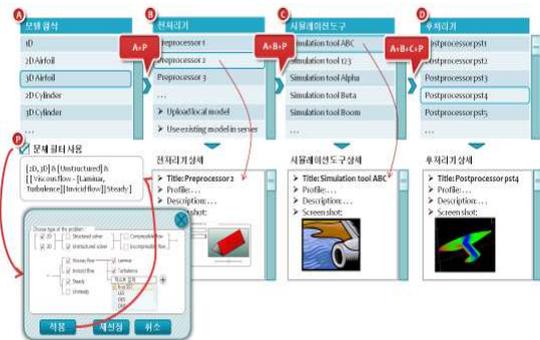


그림 4. 워크플로우 관리자

### 3.2 EDISON 미들웨어

EDISON 미들웨어는 EDISON 응용 프레임워크에서 요청하는 사용자 시뮬레이션 작업을 효율적으로 수행하고 관리하기 위하여 그림 5와 같이 이기종 플랫폼 연동 지원 작업 관리자, 이력출처 관리 프레임워크, 대용량 컴퓨팅 자원 관리 프레임워크, 가상화 자원관리 프레임워크, 가시화 프레임워크 등의 5개의 서비스시스템으로 구성된다.



그림 5. EDISON 미들웨어 구성도

대용량 컴퓨팅 자원을 활용하기 위해서는 이기종 컴퓨팅 자원 간 세션 유지 및 인증 기술이 필요하다. 이를 위해서 EDISON 미들웨어 자원관리 프레임워크에서는 그림 6과 같이 인증서 위임서버(MyProxy)와 인증키 저장소(LDAP)를 구성하여 이기종 자원을 이용한 시뮬레이션 작업 수행 흐름을 정의하였다.

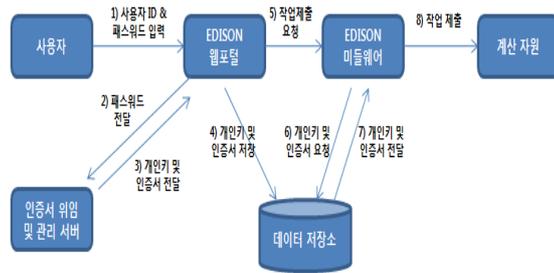


그림 6. 세션 유지기법 기반 작업 제출 흐름

EDISON 미들웨어에서는 컴퓨팅 자원의 활용성을 높이기 위해서 그림 7과 같이 가상화 자원관리 프레임워크를 개발하여 사용자 요구(CPU 개수, 메모리 크기, 디스크 용량)에 따라 가상머신을 동적으로 할당할 수 있도록 구성하였다. 이때 최적의 물리서버에 가상머신을 배치하는 스케줄링 알고리즘 기법을 이용하여 할당된 가상머신에 작업 제출, 작업 실행, 작업 상태 모니터링을 할 수 있도록 XML-RPC 형태의 인터페이스를 제공한다.

### 3.3 EDISON 인프라스트럭처

EDISON 인프라스트럭처에서는 시뮬레이션 수행에 빠르고 안정적인 환경을 제공을 위해 물리적인 계산 자원을 국가 슈퍼컴퓨팅 공동 활용체제 구축(PLSI)[5] 사업을 통해 구축된 컴퓨팅 자원을 활용한다. 그리고, 고성능 네트워크를 위해서는 국가 과학기술 연구망(KREONET)[6]을 이용하여 1Gbps 로 연결된 네트워크를 활용한다. 또

한, 대용량 시뮬레이션 데이터 전송 및 관리를 위해서 고성능 공유 디스크 파일 시스템인 GPFS(General Parallel File System)를 이용하여 클러스터 파일 시스템을 사용하고, 시뮬레이션 결과 정보 가시화를 위해서 전용 가시화 서버를 활용한다. 그림 8은 EDISON 인프라스트럭처 구조를 나타낸다.



그림 7. 가상화 자원 관리 프레임워크

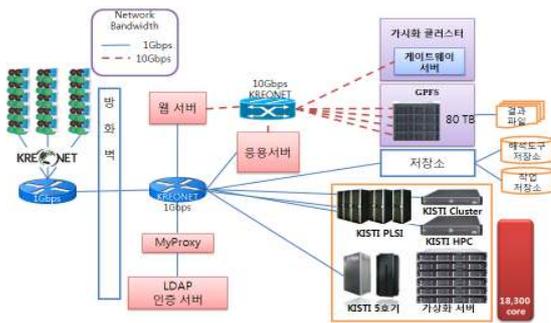


그림 8. EDISON 인프라스트럭처

#### IV. EDISON 플랫폼 서비스

EDISON 플랫폼은 계산과학 교육 및 연구 분야의 시뮬레이션 수행 기능뿐만 아니라 시뮬레이션 SW 개발환경을 제공하고, 이와 연관된 고급 콘텐츠 관련 웹 서비스를 제공한다.

EDISON 시뮬레이션 수행 과정은 일반적으로 전처리(Pre-processing), 계산 수행(Computation), 후처리(Post-processing)의 세 단계로 나눌 수 있다. 전처리 과정은 계산을 수행하기 위한 입력 정보 생성단계로 열유체 분야의 경우에는 계산을 수행하기 위한 공간격자 생성 과정을 의미하며, 계산 화학 분야에서는 분자 모형을 설계하고 편집하는 과정을 의미한다. 계산 수행 과정은 지정된 해석자가 주어진 입력 파라미터 정보를 가지고 계산을 수행하는 과정이며, 후처리 과정은 복

잡한 계산 결과 값을 분석에 용이한 형태로 가시화하는 단계이다. 그림 9는 사용자가 EDISON 시뮬레이션을 수행하는 서비스의 예를 보여준다.

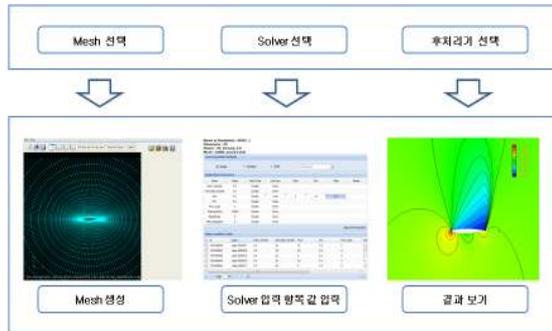


그림 9. EDISON 시뮬레이션 수행 과정

#### V. 결 론

본 논문에서는 사이버 인프라스트럭처 기반으로 최신 시뮬레이션 SW를 활용하여 차세대 교육 연구를 융합할 수 있는 EDISON 개방형 통합 플랫폼을 제시하였다. 즉, EDISON 플랫폼은 사용자들이 응용과학 분야 전문이론과 원리를 보다 쉽고, 편하고 빠르게 이해할 수 있도록 능동적으로 참여할 수 있는 교육 연구용 웹 포털 서비스를 제공한다. 따라서 응용과학 분야를 연구하는 연구자, 교수, 학생 등이 언제 어디서나 시뮬레이션 SW를 활용한 교육 및 연구를 수행할 수 있는 환경으로 이용될 수 있을 것이다.

또한, EDISON 플랫폼을 통해 개발된 대용량 컴퓨팅 자원과의 연동 기술, 응용 프레임워크, 서버 가상화 기술, 가시화 기술, 워크플로우 관리 기술 등은 향후 계산과학 분야에서의 교육 및 융합연구 지원을 위한 다양한 서비스를 제공할 수 있을 것으로 기대된다.

#### 참고문헌

- [1] Nanohub, <http://nanohub.org>
- [2] HUBzero, <http://hubzero.org>
- [3] Rappture, <http://rappture.org>
- [4] eAIRS, <http://eairs.kisti.re.kr>
- [5] PLSI, <http://www.plsi.or.kr>
- [6] KREONET, <http://www.kreonet.re.kr>