

계산과학공학 시뮬레이션 플랫폼을 위한 모듈 인터페이스 서비스 공유 기법 연구

권예진*, 전인호*, 이종숙*, 서정현*

*한국과학기술정보연구원 계산과학플랫폼센터

e-mail : yejinkwon@kisti.re.kr, inojeon@kisti.re.kr, jsruthlee@kisti.re.kr, jerry@kisti.re.kr

Study on Module Interface Service Sharing Scheme for Computational Science and Engineering Simulation Platform

Ye-Jin Kwon*, In-ho Jeon*, Jong-Suk Ruth Lee*, Jerry H. Seo*

* National Institute of Supercomputing and Networking, Korea Institute of Science and Technology Information (KISTI), Daejeon, Republic of Korea

요 약

계산과학공학은 사용자에게 다양한 계산 공학 문제의 해결을 위한 수치적 해석을 컴퓨터 자원을 이용하여 해석 결과를 도출해 내는 과정이다.

현재 EDISON 서비스의 시뮬레이션 환경은 통합적인 하나의 소프트웨어로 구성되어 있지 않고 각 모듈 별로 서비스를 연계하고 데이터를 공유 할 수 있도록 시스템 플랫폼을 구축하고 있는 중이다. 하나의 계산과학공학 시뮬레이션 서비스를 제공하기 위해서는 각 모듈간의 유기적인 서비스 공유가 필요하다. 따라서 본 논문에서는 각 모듈간의 서비스 공유 및 시스템 리소스 사용을 위해 모듈간의 커뮤니케이션을 위한 인터페이스를 설계 하고, 각 시스템 모듈을 등록하여 플랫폼 내 시뮬레이션 시스템을 구축하였다.

1. 서론

계산과학공학 분야는 현대 컴퓨터의 발전과 함께 고사양과 고성능이 필요한 과학공학적인 문제를 해결하기 위해 같이 발전해 왔다[1][2]. 다양한 계산과학공학 시뮬레이션 소프트웨어가 있지만 그 중에서 세계적으로 많이 쓰이는 계산과학공학 시뮬레이션 플랫폼은 HUBZero 이다[4][5][6][7]. 국내에서는 계산과학공학 시뮬레이션 서비스를 제공하고 교육 분야에 활용하기 위해 EDISON 플랫폼을 구축하여 서비스를 하고 있다 [10][11].

현재 EDISON 서비스의 시뮬레이션 환경은 통합적인 하나의 소프트웨어로 구성되어 있지 않고 각 모듈별로 서비스를 공유하고 데이터를 공유 할 수 있도록 시스템 플랫폼을 구축 하고 있는 중이다. 하나의 계산과학공학 시뮬레이션 서비스를 제공하기 위해서는 각 모듈간의 유기적인 서비스 공유가 필요하다. 시뮬레이션을 수행하기 위한 계산과학공학 계산 애플리케이션, 전처리를 수행하기 위한 전처리 모듈, 결과를 분석하기 위한 후처리 모듈, 시뮬레이션 히스토리 관리 모듈 등이 필요하다. 여러 시뮬레이션 모듈이 유기적으로 서비스 되기 위해서는 각 모듈간의 인터페이스가 정의되고 공유되어야 한다.

따라서 본 논문에서는 각 모듈간의 서비스 공유 및 시스템 리소스 사용을 위해 모듈간의 커뮤니케이션을 위한 인터페이스를 설계 하고, 각 시스템 모듈을 등

록하여 플랫폼 내 시뮬레이션 시스템을 구축하였다.

2. 관련 연구

2.1. 계산과학공학

계산과학공학 분야는 현대 컴퓨터의 발전과 함께 고사양과 고성능이 필요한 과학공학적인 문제를 해결하기 위해 같이 발전해 왔다[1][2]. 계산과학공학은 과학 및 공학 분야의 계산 문제를 해결하기 위해 수치해석적으로 필요한 다양한 모델링과 시뮬레이션을 수행하기 위해 연구되어 왔다. 또한 수학적 모델링 및 병렬 처리 계산 등을 통해 컴퓨터 과학 분야와 응용수학, 계산 과학의 융·복합적인 학문 분야이다[3].

현재 다양한 계산과학공학 분야의 소프트웨어가 발전되어 왔으며, 최근에는 계산과학공학 문제를 해결하기 위한 시뮬레이션 소프트웨어를 웹 기반 환경에서 제공할 수 있도록 많은 시뮬레이션 서비스 플랫폼이 구축되고 있다.

2.2. 계산과학공학 시뮬레이션 플랫폼

다양한 계산과학공학 시뮬레이션 소프트웨어가 있지만 그 중에서 세계적으로 많이 쓰이는 계산과학공학 시뮬레이션 플랫폼은 HUBZero 이다[4][5][6][7].

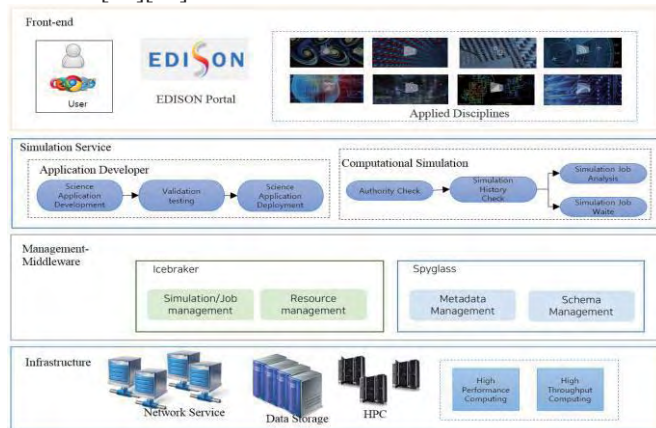
HUBzero 사이버 인프라는 과학자들이 온라인으로 함께 작업하여 시뮬레이션 및 모델링 도구를 개발할 수 있도록 한다. 다른 연구자는 일반 웹 브라우저를

사용하여 결과 도구에 액세스 할 수 있으며 코드를 다운로드하거나 컴파일 할 필요없이 국가 그리드 인프라에서 실행 시뮬레이션을 실행할 수 있다. HUBzero 는 제약 공학 (pharmaHUB.org), 열 전달 (thermalHUB.org), 마이크로 전기 기계 시스템 (memsHUB.org), 건강 관리 (IndianaCTSI.org), 암 치료 (cceHUB.org) 등의 허브를 지원하기 위해 확대되었습니다. , 공학 교육 (globalHUB.org), 나노 기술 (nanoHUB.org) [9]. nanoHUB.org 는 172 개국에서 56,000 명 이상의 사용자를 지원해왔다 [7, 8].

2.3. EDISON 시뮬레이션 플랫폼

현재 국내에서 제공하는 계산과학공학 분야의 시뮬레이션 환경을 제공하는 플랫폼은 EDISON 시뮬레이션 플랫폼이다.

EDISON 플랫폼은 세계적인 추세와 국가 정책 방향에 맞추어 계산과학공학 교육 및 연구의 융합 환경을 구축하고 다양한 사용자들에게 서비스 하기 위해 노력해 왔다. 또한 전면 무료 개방형 플랫폼을 통해 기초과학, 응용 공학, 산업 분야의 전 주기적인 융합을 위한 통합 서비스를 위해 다양한 포털 응용 서비스를 제공하여 새로운 인재를 육성하고 융합 과정을 지원해 왔다[10][11].



(그림 1) EDISON Architecture

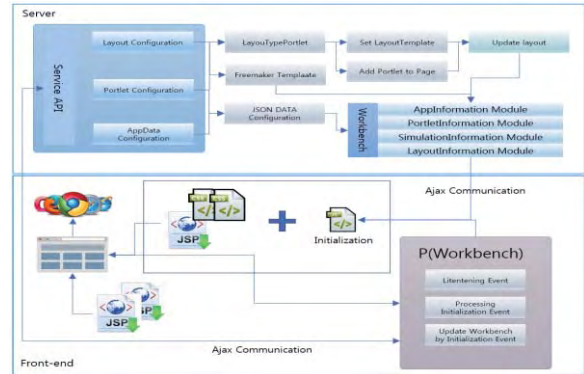
(그림 1)은 EDISON 시뮬레이션 시스템의 전체적인 아키텍처를 나타낸다. 다양한 플랫폼 엔진들의 통합적인 서비스의 지원으로 인해 계산과학공학 시뮬레이션 서비스를 제공하고 있으며, 그에 따른 플랫폼 개발 지원 및 서비스 지원을 할 수 있도록 라이브러리를 제공하고 있다.

3. 모듈 인터페이스 설계 및 구축

3.1. 경진대회 사용자 분석

현재 EDISON 서비스의 시뮬레이션 환경은 통합적인 하나의 소프트웨어로 구성되어 있지 않고 각 모듈별로 서비스를 연계하고 데이터를 공유 할 수 있도록 시스템 플랫폼을 구축하고 있는 중이다. 하나의 계산과학공학 시뮬레이션 서비스를 제공하기 위해서는 각 모듈간의 유기적인 서비스 공유가 필요하다. 따라서

본 논문에서는 각 모듈간의 서비스 공유 및 시스템 리소스 사용을 위해 모듈간의 커뮤니케이션을 위한 인터페이스를 설계 하고, 각 시스템 모듈을 등록하여 플랫폼 내 시뮬레이션 시스템을 구축하였다. 전체 시뮬레이션 환경을 구축하기 위한 아키텍처를 그리면 다음 (그림 2)와 같다.



(그림 2) Simulation Architecture

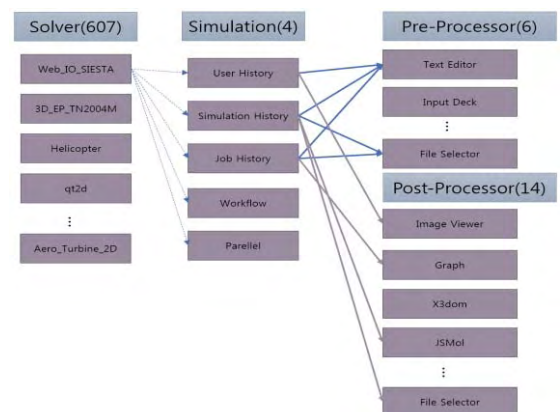
사용자에게 적절한 시뮬레이션 환경을 제공하기 위해서는 (그림 2)와 같이 각 시뮬레이션 환경에 맞는 레이아웃 설정, 각 모듈이 동작하게 되는 포틀릿 설정, 또한 각 계산과학공학 시뮬레이션에서 수행하게 될 사이언스 앱의 정보가 종합적으로 반영되어야 한다. 이러한 정보는 JSON 데이터 형태와 Freemake 를 이용한 사용자에게 정보를 종합하여 설정하게 된다. 해당 시뮬레이션을 종합하여 각 사용자의 환경에 맞게 설정해 주면 각 모듈에서는 독립적으로 동작할 수 있는 환경이 구성되게 된다.

현재 EDISON 플랫폼에서 서비스 중인 소프트웨어 모듈은 아래 <표 1>과 같다.

<표 1> EDISON 내 서비스 중인 소프트웨어 모듈

Type	Solver	Pre Processor	Post Processor
No	607	6	14

시뮬레이션을 실행할 때 내부적으로 필요한 모듈들을 호출하여 각 시뮬레이션에서 필요한 실행 환경을 구성하게 된다. 이러한 시뮬레이션 환경 구성은 다음 (그림 3)과 같이 표현 될 수 있다.



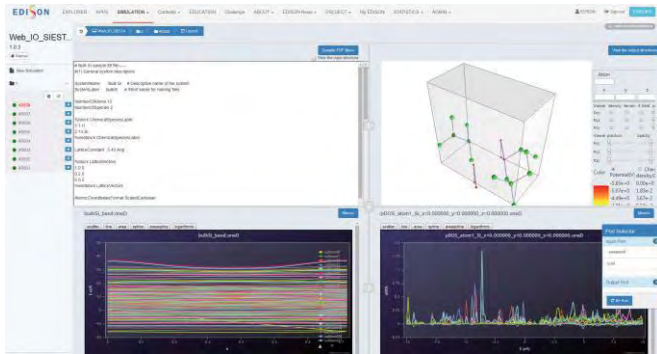
(그림 3) Simulation Configuration

위와 같이 구성될 때, 시뮬레이션 환경을 구성할 경우 사용자에게 제공될 수 있는 환경은 최소한의 확률로 계산할 경우 다음 식 1의 확률을 가진다.

$$\prod_{i=1}^{|Pre-Processor|} Solver(x) \cup \prod_{i=1}^{|Post-Processor|} Solver(x) \quad (\text{식 1})$$

만약 각 계산 해석 사이언스 애플리케이션의 하나의 전처리기와 하나의 후처리기와 조합만을 가진다고 가정하였을 경우 50988 가지의 시뮬레이션 서비스를 제공할 수 있다고 볼 수 있다.

다음 그림 4는 시뮬레이션 환경이 모듈별로 구성되어 사용자에게 제공된 화면이다.



(그림 4) Simulation Execution

4. 결론

지금까지 본 논문에서는 계산과학공학 분야를 위한 사이언스 시뮬레이션 실행 플랫폼인 EDISON 시스템에서 사이언스 시뮬레이션 실행 환경 절차에 따른 실행 환경을 모듈별로 서비스를 공유하고 시뮬레이션 데이터를 공유할 수 있는 환경을 구축하였다. 사용자의 시뮬레이션 내역과 서비스 구성 환경을 다양하게 구성하여 데이터와 환경 설정에 맞게 서비스를 구성하고 제공하는 시뮬레이션 시스템에 대하여 연구하였다. 또한 실제 서비스 되고 있는 사용자 시뮬레이션 환경에서 사용자에게 최적화된 서비스 구성 요소를 조합하여 실시간으로 제공하는 통합된 시뮬레이션 시스템을 제공함으로써 기존의 시뮬레이션 시스템에서 필요로 하는 시스템 프로세스를 단축시킬 수 있었다.

향후 연구로는 사용자에게 맞춤형 선택적인 서비스 조합 및 모듈 구성에 대한 분석을 다각적으로 진행할 예정이며, 각 사용자에게 따라 또한 사이언스 시뮬레이션을 수행하는 실행 환경에 따라 실시간으로 구성되는 서비스의 구성 단계에 따른 모듈의 서비스 조합을 세분화하여 서비스할 예정이다.

또한 각 사용자에게 제한된 서비스 접근 제한 및 조건, 권한 등을 조직화된 사용자 그룹에 따라 세분화하여 특정 사용자에게 최적화된 서비스를 제공할 예정이다. 다양한 사용자가 공통적으로 사용하는 서비스 모듈 조합에 대한 결과를 통해 가장 보편적으로 사용되는 사이언스 시뮬레이션을 위한 서비스 시스템에서 제공하는 기본적인 시뮬레이션 서비스와의 비교 분석을 통해 발전 방향에 대한 연구를 진행할 것이다. 이러한 사용자 지원 웹 기반 시뮬레이션 시스템을 사

용자에게 최적화된 서비스를 제공함에 있어 다양한 시나리오를 가지고 접근해야 하며, 각 서비스 모듈에 따라 사용자 이벤트 기반 최적화된 사용자 행동 분석 시나리오를 통해 사용자 요구를 반영하는 시뮬레이션 시스템을 제공할 예정이다.

This research was supported by the EDISON Program through the National Research Foundation of Korea(NRF) (No. NRF-2011-0020576), and the KISTI Program (No. K-18-L12-C06-S01)

참고문헌

- [1] Rde, Ulrich, et al. "Research and education in computational science and engineering." Siam Review 60.3, pp.707-754, 2018.
- [2] Johanson, Arne, and Wilhelm Hasselbring. "Software Engineering for Computational Science: Past, Present, Future." Computing in Science & Engineering, pp1-31 2018.
- [3] Post, Douglass. "The changing face of scientific and engineering computing." Computing in Science & Engineering 15.6, pp. 4-6, 2013.
- [4] FALTENS, Tanya; STRACHAN, Alejandro; KLIMECK, Gerhard. "nanoHUB as a Platform for Implementing ICME Simulations in Research and Education". In: Proceedings of the 3rd World Congress on Integrated Computational Materials Engineering (ICME 2015). Springer, Cham, p. 269-276, 2015.
- [5] MCLENNAN, Michael; KENNEL, Rick. "HUBzero: a platform for dissemination and collaboration in computational science and engineering". Computing in Science & Engineering, 12.2, 2010.
- [6] KLIMECK, Gerhard, et al. "nanohub. org: Advancing education and research in nanotechnology". Computing in Science & Engineering, 10.5, pp. 17-23, 2008,
- [7] KLIMECK, Gerhard, et al. nanoHUB. org-online simulation and more materials for semiconductors and nanoelectronics in education and research. In: Nanotechnology, 2008. NANO'08. 8th IEEE Conference on. IEEE, p. 401-404, 2008.
- [8] Madhavan, Krishna, et al. "nanoHUB. org: Cloud-based services for nanoscale modeling, simulation, and education." Nanotechnology Reviews 2.1, pp. 107-117, 2013.
- [9] McLennan, Michael, and Rick Kennell. "HUBzero: a platform for dissemination and collaboration in computational science and engineering." Computing in Science & Engineering 12.2, pp. 48-53, 2010.
- [10] Suh, Young-Kyoon, et al. "EDISON: A Web-based HPC Simulation Execution Framework for Large-scale Scientific Computing Software." Cluster, Cloud and Grid Computing (CCGrid), 2016 16th IEEE/ACM International Symposium on. IEEE, 2016.
- [11] EDISON (EDucation-research Integration through Simulation On the Net), www.edison.re.kr