

# 슈퍼컴퓨터의 응용분야 및 소프트웨어 기술현황

임 철 호

(한국과학기술연구원 시스템공학센터 선임연구원)

## 1. 머리말

미국 항공우주국(NASA) Ames연구소의 계산유체 역학분야 연구원들은 수치공기역학 시뮬레이션(Numerical Aerodynamics Simulation) 프로젝트를 수행하기 위하여 중앙처리장치(CPU)가 4개이고 주기억장치가 256Mword인 초고속의 CRAY-2/4256슈퍼컴퓨터를 보유하고 있지만 아직도 완전한 Navier-Stokes방정식을 해석할 수 있는 차세대 슈퍼컴퓨터의 출현을 기대하고 있다.

이와 같이 현재 이용되고 있는 슈퍼컴퓨터의 기원은 복잡한 응용 문제해석을 위하여 컴퓨터 시뮬레이션을 수행하고자 할때 기존의 순차처리(Sequential Processing) 컴퓨터의 한계성이 주된 이유가 되었다.

1970년도 초기에 시작된 Burroughs사의 IliacIV, CDC사의 STAR100 및 Texas Instrument사의 ASC 등과 같은 1세대 슈퍼컴퓨터는 벡터처리(Vector Processing)나 병렬처리(Parallel Processing)등의 개념을 도입하여 기존의 순차처리 컴퓨터보다 성능이 우수하였으나 여러 응용분야에서 이용되지 못하고 생산이 중단되고 말았다. 2세대 슈퍼컴퓨터는 1980년도 초기부터 이용되기 시작한 미국 Cray Research사의 CRAY-1, X-MP, -2, Y-MO, CDC/ETA사의 CYBER205, ETA-10과 일본 Fujitsu사의

FACOM VP시리즈, NEC사의 SX 시리즈, Hitachi사의 S시리즈 등으로 여러응용분야에서 이용되고 있으며 현재 세계적으로 300여대이상의 시스템이 여러 분야에 걸쳐 설치 운영되고 있다.

본고는 세계적으로 200여대 이상이 설치된 CRAY 시리즈와 일본에 50여대 이상이 설치된 Fujitsu사의 VP시리즈를 중심으로 그 응용분야와 한국과학기술연구원 시스템 공학센터에서 이용가능한 응용 소프트웨어의 기술현황을 분석하는데 그 목적이 있다.

## 2. 응용분야 현황

국내의 슈퍼컴퓨터 응용분야는 아직 초기단계이므로 외국의 응용현황을 중심으로 대규모 과학기술계산에서의 컴퓨터 시뮬레이션, 응용분야의 분류, 간단한 하드웨어 및 소프트웨어 설치현황 및 앞으로의 전망 등을 중심으로 언급하기로 하겠다.

### 2.1 컴퓨터 시뮬레이션

미국, 유럽, 일본 등의 과학기술 관련 기관에서는 근 20여년 이래로 컴퓨터가 가장 많이 이용되고 있는 과학적 도구로 인식되고 있다. 물리적현상에 대한 상세한 수치적 시뮬레이션이 실제의 실험을 대신 하여 수행되어 왔고 잘 알려진 이론을 증명하기도

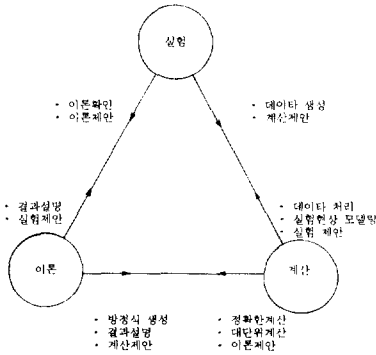


그림 1. 대단위 과학, 기술분야 해석에 있어서 실험, 이론 및 계산들의 상호작용

하였다. 또한 과학, 기술, 자원, 의학, 군관계, 인공지능 및 기초과학 등의 여러분야에서 빠르고 효율적인 컴퓨터들의 요구가 증대되고 있다. 특히 대규모 계산이 필요한 과학, 기술 분야에서 슈퍼컴퓨터가 널리 이용되고 있는데 이러한 슈퍼컴퓨터는 일반적으로 중요한 응용분야에서의 계산 필요성으로 부터 설계 개념이 도입되고 있다.

각 분야의 과학기술문제는 이론과 실험의 두가지 해석 방법으로 수행되어져 왔는데 컴퓨터의 발달과 응용분야 소프트웨어의 발전으로 최근에는 컴퓨터 시뮬레이션 기법이 추가되어 3가지 방법이 서로 밀접한 관계를 유지하면서 이용되고 있다(그림 1). 이론으로부터 수학적인 모델이 세워지면 컴퓨터를 이용하여 그 해를 구하고 그 수치적 결과가 새로운 이론을 제안할 수 있게 된다.

실험에서 얻어진 결과를 수치계산에 이용될 수 있으며 실험실에서 수행하기 힘든 과학적 현상을 수치계산으로 시뮬레이션 할 수가 있다. 컴퓨터 시뮬레이션은 몇가지 잇점이 있는데, 우선 실험보다 경비가 훨씬 적게들고 기존의 실험장비로 수행할 수 없는 현상까지 해석할 수 있으며 컴퓨터의 속도나 기억 용량의 한계외에는 어떠한 문제라도 컴퓨터 시뮬레이션이 가능하다는 점이다.

2.2 분야별 이용현황

슈퍼컴퓨터응용분야는 매우 광범위할 뿐만 아니라 분류하기가 쉽지 않고 서로 중복되는 부분이 많지만 편의상 다음과 같이 크게 네개의 연구분야로 나눌

수가 있다.

- 기초분야연구
- 공공분야연구
- 에너지 분야연구
- 공학분야 연구

2.2.1 기초분야연구

기초분야연구는 물리학, 화학, 수학, 통계학 등의 분야에서 슈퍼컴퓨터를 널리 이용하고 있다. 각 분야별로 사용되는 예를 열거하면 다음과 같다.

- 화학: 화학분야에서 필요한 대단위 해석문제는 Schroedinger 방정식을 변분법(Variational Method)으로 해석하는 양자역학, 분자의 특성을 연구하는 분자역학이나 Monte



그림 2. 미국 국립 암센터에 의해 제공된 인간의 DNA 구조 모델

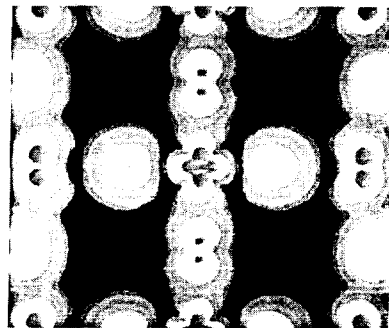


그림 3. Northwestern 대학의 S. Massidda, Jaejun Yu, A.J. Freeman과 Argonne국립 연구소의 D.D. Koelling에 의해 제공된 초전도체 YBa2Cu307의 구리와 산소 원자 둘레의 전하량

Carlo기법 등의 통계역학, 농축용액 등에서 뒤엉켜 있는 커다란 분자구조들의 시뮬레이션을 수행하는 고분자 화학, 아주 복잡한 형상의 단백질 구조를 분석하는 결정학(Chrystallography) 등이 있다(그림 2).

—물리학: 이 분야에서의 슈퍼컴퓨터이용은 6차 및 8차 적분이 필요한 양자역학분야, 기호조작(Symbolic Manipulation)이 필요한 복잡한 쿼크이론(Quark Theory)의 대수 방정식 해석, 복잡한 액체 시스템의 해석에 필요한 통계역학, 분자역학 및 Monte Carlo기법, 농축상태에서의 물질구조연구, 복잡한 고체, 고분자, 생체재료 등의 전자적 구조특성연구, 자장 및 레이저 핵융합 해석, 원자핵의 꺾질모델, 고에너지 산란(Scattering), 중 이온 충돌등의 해석이 필요한 핵물리학 등이 있다(그림 3).

—천체물리학: 이 분야에서도 슈퍼컴퓨터가 폭넓게 이용되고 있는데 특히 항성진화(Stellar Evolution) 해석, 자기유체역학(Magneto-hydrodynamics), 방사성 전달(Radiative Transport)해석, 원자물리학, 정상상태에서 혼란상태로의 천이(Transition)해석, 초신성 물리학, 충격유체역학, 핵 물리학, 일반상대성 이론, 우주물리학 등이 있다.

—수학 및 통계: 이 분야의 연구는 주로 대단위 선형 방정식이나 희박한 요소를 갖는 행렬식(Sparse Matrix) 해석, 수학 프로그래밍 문제해석, 수학 및 통계 함수 라이브러리, 비선형 편미분방정식의 모델링과 시뮬레이션, Fast Fourier변환(FFT)등 다른 응용 분야의 보조수단으로 널리 이용되고 있다.

### 2.2.2 공공분야연구

공공분야 연구는 대체적으로 기상학, 해양학 등의 환경분야, 약학, 의학, 유전공학, 생물공학 등의 보건의학 분야, 원자로 안정성 분석과 같은 원자력 분야, 사회경제학 등의 사회현상 연구분야로 분류할 수가 있다.

—환경분야: 기상예보를 하기 위한 분야는 스펙트럼 표현(Spectral Representation)에 의한 지구의 대기 시뮬레이션, 2차원 및 3차

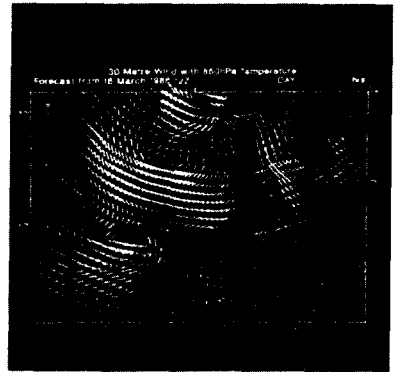


그림 4. ECMWF 제공의 10일 동안의 북대서양 기상 예보

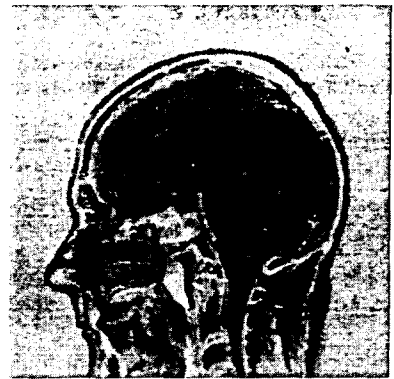


그림 5. Minnesota 대학의 M. Mixel 제공의 자기 공명 영상 처리

원 모델의 유한차분법(Finite Difference Method)을 이용한 난류현상 해석 등의 유체역학분야와 물의 증발 및 농축현상, 태양열 가열 및 적외선 냉각, 지표면 마찰항력 해석, 구름 물리학 등이 있다(그림 4).

해양학분야는 기상학과 함께 기후, 어업, 기상예보, 해양자원개발 등에 연관되어있는 중요한 응용분야로 특히 소용돌이 분석모델, 조류 및 해양의 밀도 등이 관련된 해양의 순환 시뮬레이션 기법은 슈퍼컴퓨터로 많은 계산시간이 필요한 분야이다.

—보건, 의학분야: 의학분야의 슈퍼컴퓨터 응용분야

는 컴퓨터 보조 단층촬영해석(Computer-assisted Tomography), 인공심장 설계, 간장진단(Liver Diagnosis), 뇌 손상예측연구 등이 있는데 심장의 3차원 정지운동 및 반대운동(Stop-action Crossaction) 촬영에 이용되는 단층촬영영이나 심장의 혈류(Blood Flow)의 3차원 모델링 등은 특히 계산 시간이 많이 소요되는 연구분야이다.

또한 단백질과 같은 복잡한 유기물질 분자의 합성을 위한 분자생물학, 결정학, 생의학용 영상처리, 돌연변이 유전 연구등의 유전공학 뿐만 아니라 계산화학등을 이용한 제약 연구등이 최근 슈퍼컴퓨터를 많이 이용하고 있는 보전, 의학분야들이다(그림 5).

—원자로 안정성 분석: 이 분야의 연구로는 원자로 상태의 직결분석(On-Line Analysis), 정상 및 비정상 가동에 대한 자동 조정, 운용요원의 교육용 시뮬레이션, 잠재적인 사고에 대한 완화장치의 신속한 평가등인데 중요한 점은 위와 같은 원자로 운영에 있어서 실시간(Real Time) 시뮬레이션이 필요하다는 점이다. 고온 증기의 비평형, 비균일 유동해석이나 고속 증식로 내에서의 핵융합 해석은 슈퍼컴퓨터만이 거의 실시간으로 수행할 수 있다(그림 6).

—사회현상연구분야: 이 분야에 있어서는 계량 경제학(Econometrics), 사회공학(Social Engineering), 여론조사나 인구조사 또는 국제조사 등의 통계자료분석, 범죄조정(Crime Control) 및 세계경제의 모델등을 시뮬레이션 할 수 있는데 특히 세계 경제의 시뮬레이션으로 부터 부분적인 무기 감축이 빈부차이를 줄일 수 있으려면 국제적인 경제 관계가 어떻게 구성되어져야 하는 것과 같은 방법론을 제시하기도 하였다. 특히 은행이나, 주식관련 회사들도 최근에 들어서는 슈퍼컴퓨터에 큰 관심을 갖고 그 이용을 시작하는 단계에 있다.

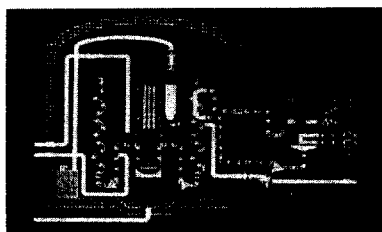


그림 6. Los Alamos 국립 연구소의 Patrick Hodson에 의해 제공된 고압수 핵원자로 모델

### 2.2.3 에너지 분야 연구

에너지 분야연구는 크게 나누어 에너지 자원 탐사 분야와 원자력 에너지 이용분야로 분류할 수가 있는데, 지진파 석유탐사, 석유층 모델링(Reservoir Modeling) 등이 전자에 속하고 원자력 발전소 설계나 관성 및 자성 핵융합연구(Inertial and Magnetic Fusion Research) 등이 후자에 속한다.

—자원탐사: 지하에 폭약이나 강력한 수압 충격(Hydraulic Ram)을 집어넣어 지각을 진동시킨 후 음파(Sonic Wave)를 측정하여 석유가 포함된 지층구조를 파악하는 지진파 석유탐사는 처리할 데이터자료가 엄청나게 많기 때문에 슈퍼컴퓨터를 이용하여야만 지진파 신호처리가 가능하다(그림 7).

거대한 지하석유층을 3차원으로 모델링하고 유한차분법을 이용하여 시뮬레이션을 수행하는 석유층 모델링 방법은



그림 7. Rice대학의 C. Dawson, W. Wheeler에 의해 제공된 탄화수소의 모의 분해 실험에 의한 지하산소의 밀도 변화

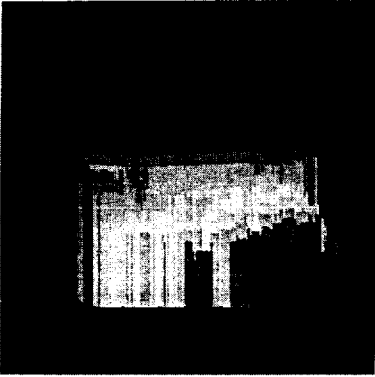


그림 8. ARCO Oil and Gas Company가 제공한 지진 데이터의 3차원 표현

유층(Oil Field)의 예상되는 거동을 시간에 따라 예측할 수 있도록 하여 석유 채취에 많은 도움을 주고있다(그림 8).

—발전소설계 및 핵융합: 원자력 발전소 설계에서는 정상상태의 대단위 그룹인 중성자의 확산 이론을 유한 차분 방법으로 계산하게 되는데 수많은 반복계산으로 시간이 많이 소요되기 때문에 슈퍼컴퓨터가 필요하게 된다.

레이저 광(Laser Beam)과 같은 드라이버를 이용하여 적은 양의 DT 연료를 압축시켜 원자핵 융합으로 부터 에너지를 얻는 관성핵융합 방법은 대체에너지 연구에 널리 이용되고 있다. 이 분야에서는 레이저 광 흡수현상, 에너지 전달, 수력학(Hydrodynamics), 내파(Impllosion), 열 원자핵 연소 등의 고도의 비선형 해석이 필요하게 된다. 마찬가지로 자성핵융합 반응연구도 대체에너지 연구에 이용되고 있는데 난류(Turbulence) 및 플라즈마 불안정성에 대한 미시적, 전자장, 입자분포 함수해석이나 플라즈마의 거시적, 장시간 해석을 위한 유체현상해석 등의 연구가 필요하게 되어 슈퍼컴퓨터의 사용이 많은 분야이다.

## 2.2.4 공학분야연구

공학분야연구는 기계, 항공, 우주, 조선, 자동차, 건축, 토목 등의 광범위한 분야에서 이용되고 있는 구조해석, 유체해석 분야가 있고 전기제품설계나 반도체설계 이용되는 전기전자분야, 인공위성에서 수신된 데이터를 처리하는 영상처리나 원격탐사(Image Processing and Remote Sensing)분야 및 공학분야에서 널리 이용되는 CAD/CAM/CAE 및 그래픽스 등이 있다.

—구조해석: 유한요소해석(Finite Element Analysis)

기법은 구조물의 총체적인 연구를 수행하는 수학적 방법론으로 비행기 및 우주선 설계, 선박설계, 자동차설계, 토목건축분야 설계에 폭넓게 이용된다. 이 방법은 비행기 날개, 자동차 프레임, 다리등과 같은 구조물 전체를 미리 정의된 유한요소로 나누어 2차원 및 3차원 절점(Grid)을 정의한 후 설계과정의 일부로서 여러종류의 하중이나 구속조건(Constraint Condition)에 대한 구조물의 정적 및 동적 반응을 시뮬레이션 할 수 있다. 따라서 대단위 구조물의 해석이나 자동차 충돌 문제와 같은 비선형 동적해석을 하기 위하여는 슈퍼컴퓨터의 이용이 필수적이다(그림 9).

—유체해석: 자동차, 비행기, 우주선 등의 양력 및 난류 현상연구에 풍동(Wind Tunnel)의 3차원 실험을 수행하는 외에 컴퓨터 시

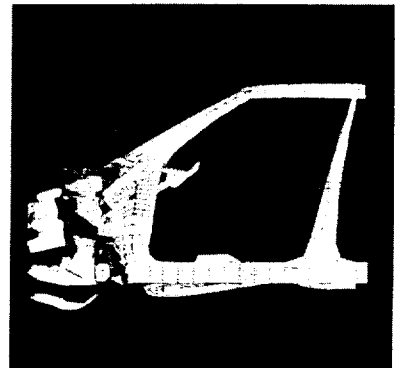


그림 9. Peugeot S.A에 의해 제공된 BX car 모델의 차체 충돌 해석

물레이션을 이용하는 연구가 활발해지고 있다. 풍동실험을 수행하는 경우 모델의 크기, 풍속(Wind Velocity), 밀도, 온도, 벽면의 간섭(Wall Interference), 공탄성 변형(Aeroelastic Distortions), 대기, 유선(Stream line)의 균일성등에 있어서 실험의 한계에 이르게 되나 유동의 수치 시물레이션인 경우는 컴퓨터의 속도 및 기억용량의 크기에 있어서만 한계가 있어서 컴퓨터 시물레이션 방법이 실험적방법의 한계성을 상당한 부분까지 보완해 주고 있다. 완전한 Navier-Stokes 방정식을 해석하기 위하여는 유한차분법이나 유한요소법을 이용하게 되는데 절점(Mesh Points)의 수가 많아짐에 따라 대단위 해석 문제가 되어 슈퍼컴퓨터의 이용은 필수불가결한 분야가 되었다(그림 10).

—전기전자: 컴퓨터 설계나 집적회로 설계는 대단히 복잡한 연구분야로 전자회로 시물레이션이나 컴퓨터 구조설계에 슈퍼컴퓨터가 널리 이용되고 있다. 위와 같은 설계분야의 매 단계에서 각 부품에 대한 실험을 수행하여 조립하기 보다는 컴퓨터를 이용하여 각각의 부품을 모델링하고 설계하는 시물레이션을 수행하는 방법이 경비를 절감하고 생산성을 높이고 있다. 특히 오늘날 LSI, VLSI 등 전자 부품의 복잡성과 세계적인 제품생산 경쟁으로 말미암아 논리 및 기억회로 설계, 시스템 구성, 설계규정검사 등에서 슈

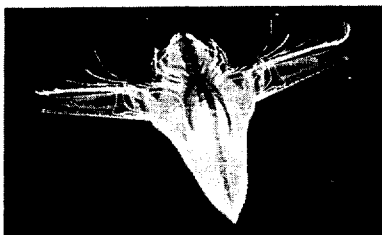


그림 10. NASA Ames 연구소 제공의 F-16 형상 위의 유선

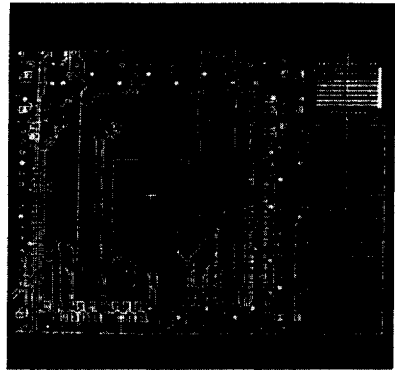


그림 11. 미래의 Cray 컴퓨터 시스템을 위해 디자인된 기판의 회로

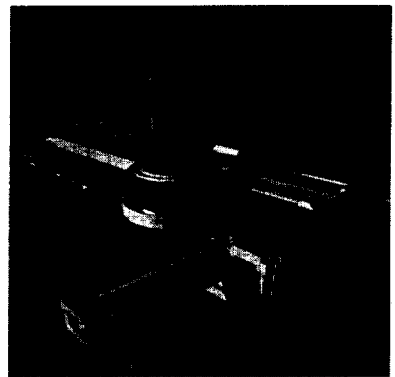


그림 12. Cray 컴퓨터 시스템에 의해 작성된 예술 회관 모델

퍼컴퓨터가 많이 이용되고 있다(그림 11).

—영상처리 및 원격탐사: 인공위성등을 통하여 지상 자원데이터를 원격지에서 수신하여 컴퓨터로 처리하는 원격탐사기법이 농업, 산림, 지리학, 수자원 등의 여러분야에 이용되고 있다. 영상의 수많은 데이터가 처리되어야 하는데 매 15일마다 지구 전체의 표면을 영상처리하기 위하여는 슈퍼컴퓨터가 아니면 수행할 수 없는 연구분야이다. 이와 같은 영상처리 분야의 연구는 초신성에서 도달한 빛의 분석, 악성 종양의 탐지, 정밀한 지도의 제작 등 광범위하게 분포되어

있다.

-CAD/CAM/CAE 및 그래픽스: 컴퓨터 시뮬레이션 기법중 중요한 분야의 하나는 해석 결과를 그래픽스로 처리하는 분야이다. 수많은 결과 데이터를 숫자적으로 해석하기는 쉽지 않기 때문에 이 결과를 그림으로 표현하는 방법이 컴퓨터 시뮬레이션의 거의 모든 분야에 걸쳐 이용되고 있다. 속도가 빠르고·용량이 큰 그래픽스 워크 스테이션(Graphics Workstation)이 최근에 개발되어 슈퍼컴퓨터에서 얻어진 결과들을 거의 실시간 애니메이션(Real Time Animation)을 수행할 수 있는 기술에 까지 도달하였다. 따라서 계산결과를 정지하고 있는 영상 보다는 움직이는 영상으로 처리함으로써 그것을 해석하고 이해하기가 매우 쉬워져 건축구조물 설계의 3차원 애니메이션과 같은 과학기술용은 물론이러니와 최근에는 영화나 선전광고등에서도 슈퍼컴퓨터가 널리 이용되고 있다. (그림 12)

CAD/CAM/CAE는 컴퓨터 보조 설계, 제작 및 공학(Computer Aided Design, Manufacturing and Engineering) 기법으로 컴퓨터를 이용하여 여러제조분야

의 공학적해석을 수행하고 전반적인 설계를 한후 설계도면을 작성하여 생산계획작성, 생산자동화 등을 통하여 제품을 생산하는 포괄적인 의미로 특히 구조해석이나 유체해석, 회로해석 등의 CAE 분야에서 슈퍼컴퓨터가 사용되며 그외의 분야에서는 주로 공학 워크스테이션(Engineering Workstation)이 널리 이용되고 있다.

## 2.3 하드웨어 및 응용 소프트웨어 현황

### 2.3.1 하드웨어 현황

1989년 3월 현재 세계적으로 설치된 슈퍼컴퓨터는 346대로 Cray 220대 Fujitsu 57대, CDC/ETA 43대, NEC 14대, Hitachi 12대 순으로 Cray와 CDC/ETA는 미국 회사이고 Fujitsu, NEC, Hitachi는 일본회사인데 일본제품은 주로 일본에만 설치되어 있다(그림 13). CRAY 시스템의 분야별 설치현황은 정부기관 71대, 대학 및 연구기관 29대, 석유관련기관 28대, 에너지 관련기관 22대 등으로 구성되어 있다(그림 14).

### 2.3.2 응용 소프트웨어 현황

Cray Research사의 응용 소프트웨어 현황은 COS 및 UNICOS의 운용체제(Operating System)에 걸쳐

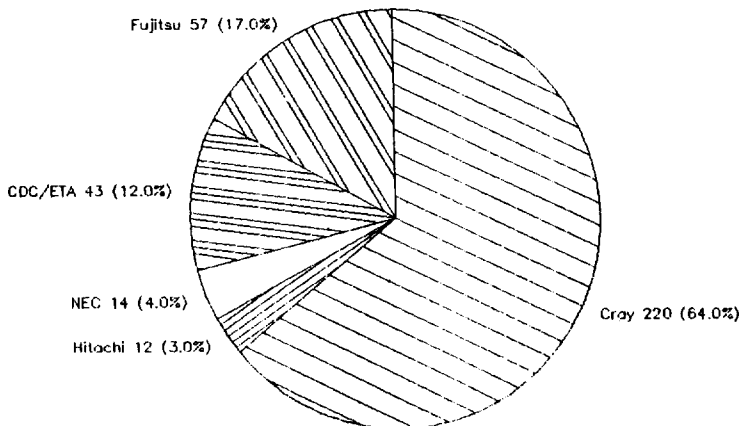


그림 13. 슈퍼 컴퓨터의 설치 현황

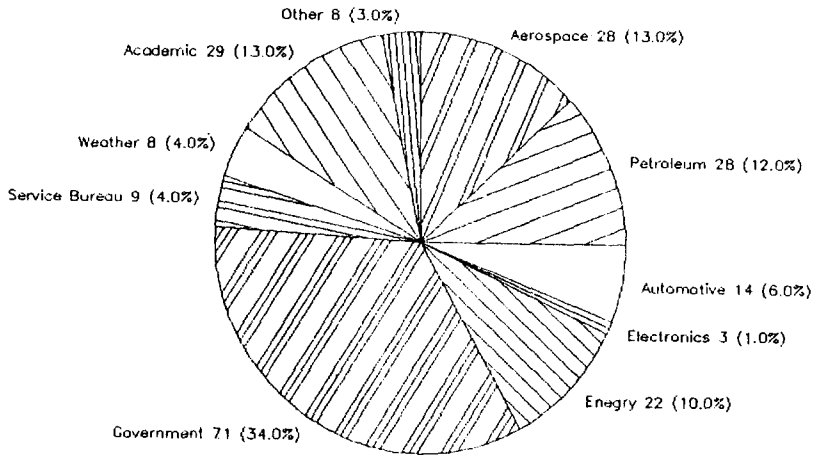


그림 14. Cray 슈퍼 컴퓨터의 응용 분야별 설치 현황

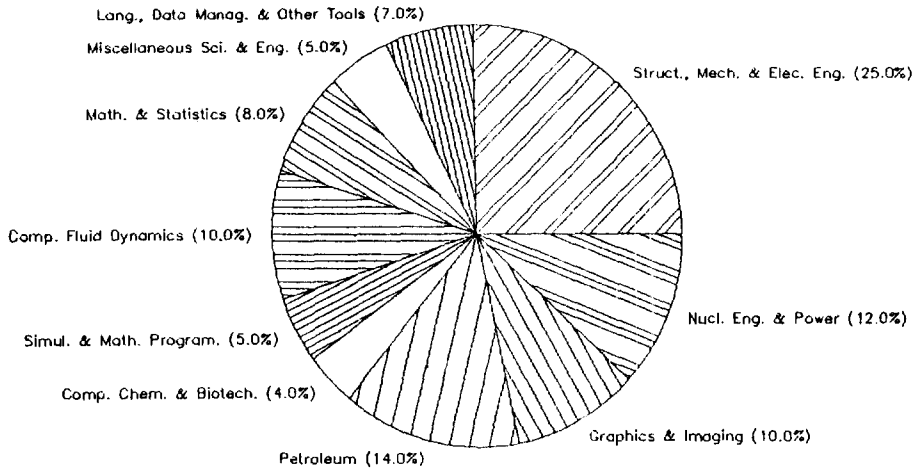


그림 15. Cray 슈퍼 컴퓨터의 응용 소프트웨어 사용분야

600여개 정도가 이용되고 있다. Fujitsu사는 250여개의 응용소프트웨어가 이용될 수 있다.

Cray Research사의 응용분야별 현황은 그림 15와 같이 구조, 기계 및 전기공학분야에서 25%, 석유탐사분야 14%, 원자력분야 12%, 계산유체 역학 10%, 그래픽스 분야 10% 등으로 구성되어 있어 현재에는 공학분야 및 에너지 분야의 이용도가 높음을 알 수 있다.

#### 2.4 응용현황 종합 및 앞으로의 전망

슈퍼컴퓨터의 응용분야는 하드웨어 기능과 밀접한

관계를 맺고 있는데 1980년도 초기에는 주로 벡터화(Vectorization) 기법응용이 주류를 이루었고 1980년도 후반경에는 다중처리(Multiprocessing) 기법응용이 많아지고 있는데 1990년도 이후에는 슈퍼컴퓨터 응용분야가 더욱 다양화될 것으로 예상되고 있으며 슈퍼컴퓨터의 새로운 설계방식은 응용분야와 서로 밀접한 관계를 맺으며 발전해 나갈것으로 예상된다.

초기의 벡터화기법 응용에 이용된 분야는 지진파 석유탐사, 에너지 및 국방, 교육 및 환경, 자동차, 항공 및 우주산업분야, 전기 및 전자 산업분야, 레이저 및 자성 핵융합 반응로 설계 분야, 핵분열 장



치의 안정성 해석 등으로 속도가 빠른 벡터 컴퓨터가 널리 이용되었다.

위와 같은 연구분야가 여러개의 중앙처리장치를 갖는 다중처리 컴퓨터 시스템이 이용되면서 실제 작업시간(Turn-around Time)이 줄어들게 되고 실시간 컴퓨터 시뮬레이션 (Real-Time Computer Simulation)에 가까운 결과를 얻을 수 있게 되어 특히 기상예보나 원자로 안정성 분석 등에서 효과가 입증되어 가고 있다.

또한 인공지능 분야와 사회경제분야에서의 슈퍼컴퓨터 이용이 많아질 것으로 예상되는데 인공지능 분야는 영상이나, 언어등으로 인간과 직접적으로 통할 수 있는 판단가능 입, 출력 인터페이스(Intelligent I/O Interface)가 개발되어 영상처리, 패턴 인식, 컴퓨터시력(Computer Vision), 언어 인식, 판단가능 로보틱스, 전문가컴퓨터시스템, 지식공학(Knowledge Engineering) 등에서 이용될 것이 예상되며, 사회경제 분야에서는 인구 및 국제 조사 또는 여론 조사의 처리, 금융 및 주식관련 시뮬레이션, 통계 경제학 등에서 널리 이용되리라 예상된다.

### 3. 응용소프트웨어 기술현황

각종 슈퍼컴퓨터에 이용되고 있는 응용소프트웨어는 분야별로 종류가 많고 계속 개발이 되고 있어 기술현황을 분석하기가 쉽지 않기 때문에 국내에서 공동으로 이용되고 있는 응용소프트웨어의 분야별 기술현황을 간략히 언급하기로 한다. 한국과학기술연구원 부설 시스템공학센터에 1988년 9월에 도입설치된 CRAY-2S/4128 슈퍼컴퓨터에는 1989년 6월 현재 분야별로 50여개이상의 응용소프트웨어가 이용되고 있으며 앞으로도 국내의 과학기술분야에 필요한 프로그램은 계속 도입할 예정으로 있다. 각 분야별로 주로 이용되고 있는 응용소프트웨어와 중요한 프로그램의 설명은 다음과 같다.

#### 3.1 기초과학분야

기초과학분야에서는 수학 및 통계 함수 라이브러리로 AMOSLIB, BATCHLP, EISPACK, LINPACK, IMSL 등이 있으며 물리, 화학, 생물학 등의 분야에서는 AMBER, CHARMm, DISCOVER,

GAUSSIAN, IDEAS, MOPAC, XPLOR 등의 프로그램이 이용되고 있다.

수학 및 통계분야의 AMOSLIB는 Error, Gamma, Beta, Bessel, Airy, Sine/Cosine Integral 등의 함수 루틴을 포함한 라이브러리고, BATCHLP는 수정된 Simplex방법을 이용한 선형 프로그래밍 루틴이다. 또한 EISPACK은 표준 고유치문제 (Eigen Problems)를 해석하기 위한 서브루틴을 포함한 프로그램이고, LINPACK은 선형대수 방정식을 해석하는 FORTRAN 루틴이며, IMSL은 대부분의 수학 및 통계 서브루틴 라이브러리가 포함된 프로그램으로 각종 분야의 연구에 이용되고 있다.

물리, 화학, 생물학분야의 AMBER는 화학 및 약제학 등에서 이용되는 소프트웨어로 최소화 분자구조 및 분자역학 등을 시뮬레이션할 수 있다.

CHARMm은 경험적 에너지 함수를 이용하여 고분자 시스템을 모델링해서 분자역학 시뮬레이션을 수행하는 프로그램이며, DISCOVER는 제약학에서 주로 이용되고 있는데 분자역학 등의 광범위한 시뮬레이션을 수행하여 분자설계에 응용하고 있다.

GAUSSIAN은 양자화학 분야의 프로그램으로 안정상태의 분자나 불안정상태의 분자 구조 계산을 수행할 수 있다.

MOPAC에서는 분자나 이온, 선형 폴리머를 포함하는 화학반응 연구에서 분자의 궤도를 계산할 수 있다.

X-PLOR는 수정구조 물질의 고분자 모델링 프로그램으로 X-ray회절(Diffraction) 데이터를 이용하고 구조의 에너지를 최소화 시켜 분자역학 시뮬레이션을 수행한다.

#### 3.2 에너지 분야

에너지 분야로는 GEOVECTEUR 프로그램이 있는데 2차원 및 3차원 지진과 처리 시스템으로 석유탐사에 이용된다(89년도 하반기 도입예정임).

#### 3.3 공학분야

이 분야에서는 구조해석, 유체해석, 전기 및 전자공학, 영상처리 및 그래픽스 등의 소프트웨어가 있다.

구조해석분야에서는 ABAQUS, DYNA-3D, MSC/NASTRAN 등의 소프트웨어가 설치되어 있는데 이들은 모두 유한요소해석 기법을 이용한 프로그램들이다.

ABAQUS는 주로 기하적 및 재료적 비선형 구조해석 문제에 중점을 둔 범용 프로그램으로 금속성형(Metal Forming), 암반해석, 고무제품해석 등에서 널리 쓰이고 있다.

DYNA-3D는 외연적(Explicit) 3차원 구조해석 방법을 이용한 프로그램으로 자동차 충돌해석이나 폭발 등 비탄성 구조의 대변위, 대회전 등의 기하적 비선형 동적해석을 수행한다.

MSC/NASTRAN은 대단위 구조물의 선형해석에 주안점을 두고 자동차, 항공기, 선박 등의 구조설계에 이용되는 프로그램으로 유한요소기법을 이용한 최초의 대형 프로그램인데 미국의 NASA에서 처음 개발되었다.

유체해석 프로그램에는 FLOTRAN, PHOENICS 및 VSAERO 등이 있는데 FLOTRAN은 유한요소기법을 이용하여 물체의 내부 및 외부의 유체해석과 열전달 문제를 해석할 수 있는 프로그램으로 각종 엔진설계에 이용되고 있다.

PHOENICS는 유한 체적법(Finite Volume Method)를 이용하여 유동장 해석을 수행하는 범용 프로그램으로 자동차, 항공, 조선, 화공, 해양, 환경, 원자력 등의 분야에서 널리 이용되고 있다.

VSAERO는 패널법(Panel Method)으로 와류나 흐름의 분리현상등의 비선형 유체해석을 수행하여 자동차, 항공기 및 선박 등의 설계에 이용되는 프로그램이다. 전기전자분야에는 HSPICE와 MAGNA/FIM 등이 있는데 HSPICE는 불연속 증폭기(Discrete Amplifier)에서 부터 복잡한 집적회로(Integrated Circuit)까지 설계할 수 있는 전자회로 시뮬레이터 프로그램으로 트랜지스터, 다이오드, 레지스터, 커패시터, 인덕터 및 전송라인(Transmission Line)과 같은 부품들을 이용하여 회로의 전기적인 특성을 시뮬레이션 할 수 있다.

MAGNA/FIM은 유한적분법(Finite Integral Method)을 사용하여 축대칭 자장 해석을 수행하는 프로그램으로 정상 및 비정상 자장 문제를 해석할 수 있다. 그래픽스 및 영상처리분야에는 CSADIE, MOVIE, BYU, OASIS, PATRANII, UNIRAS 등의

프로그램이 있는데 CSADIE 및 OASIS는 디지털 영상데이터를 처리할 수 있는 영상처리 소프트웨어이다.

MOVIE, BYU 및 PATRAN II는 수학, 위상학, 구조 등의 모델을 나타낼 수 있고 그림을 그릴 수 있는 범용 그래픽 시스템으로 유한요소법이나 유한차분법의 전후처리 시스템(Pre-and Post-Processor)으로 널리 이용되고 있다.

UNIRAS는 데이터 처리, 위상매핑(Topological Mapping), 지리적 매핑, 석유탐사나 석탄산업등에 응용될 수 있는 범용 그래픽 소프트웨어로 영상처리, 원격탐사, 석유탐사 등에서 이용될 수 있다.

### 3.4 공공 및 기타분야

공공분야에서는 기상분야의 NCAR-GKS 그래픽스 라이브러리가 있는데 이는 여러 분야의 그림을 생성할 수 있는 고도의 그래픽 루틴으로 구성되어 3차원면, 지도 작성, 속도벡터 및 X-Y 플롯, 유선 및 특수문자의 생성등에 이용되고 있다. 인공지능 분야로는 GLIPS와 PROLOG가 있는데 CLIPS는 전문가시스템을 형성하는 도구로 이용되며 PROLOG는 1차원 술어계산(Predicate Calculus)에 기초한 비절차적(Nonprocedural) 프로그래밍 언어이다.

## 4. 맺음말

지금까지 세계적으로 슈퍼컴퓨터에서 주로 이용되고 있는 응용분야의 개요와 국내에서 공동으로 이용가능한 응용소프트웨어의 간략한 설명을 하였다. 자료에서 알 수 있는 바와 같이 미국이나 유럽 또는 일본 등의 선진국에서는 새로운 과학기술분야나 최첨단 기술을 더욱 발전시켜 나가기 위하여 300여대 이상의 슈퍼컴퓨터를 설치하여 이용하고 있다. 국내에도 1988년도에 Cray슈퍼컴퓨터가 도입가동되고 있어 과학기술분야의 발전에 도움이 크리라 예상된다.

외국의 과학기술연구의 거의 모든 분야가 1990년도 이후에는 슈퍼컴퓨터를 필요로 할 것으로 예상되기 때문에 국내에서도 슈퍼컴퓨터를 이용한 연구가 더욱 활성화되어 국내 과학 기술분야에 이바지할 수 있기를 바란다.

---

참 고 문 헌

- [ 1 ] K. Hwang, F.A. Briggs, Computer Architecture and Parallel Processing, pp.40-49, McGraw-Hill, 1984.
- [ 2 ] S. Fembach, Applications of Supercomputers in the USA-Today and Tomorrow, pp. 421-428, Tutorial-Supercomputer ; Design and Applications, IEEE, 1984.
- [ 3 ] G. Rodrigue, E.D. Giroux, M. Pratt, Large-Scale Scientific Computation, pp. 429-451, Tutorial-Supercomputers ; Design and Applications, IEEE, 1984
- [ 4 ] D. Fuss, C.G. Tull, Centralized Supercomputer Support for Magnetic Fusion Energy Research, pp. 452-461, Tutorial-Supercomputers ; Design and Applications, IEEE, 1984
- [ 5 ] V.L. Peterson, Impact of Computers on Aerodynamics Research and Development, pp. 462-475, Tutorial-Supercomputers ; Design and Applications, IEEE, 1984.
- [ 6 ] N.P. Smith(Editor), Superomputing Review-The Magazine of High-Performance Computing, London Manhattan, Dec, 1988, Jan, Feb, Mar & Apr, 1989
- [ 7 ] J.L. Martin(Editor), Internatinal Journal of Supercomputer Applications, Vol. 1/No. 1,2,3,4 (1988), vol. 2/no. 1,2,3,4 1989
- [ 8 ] E.J. Pitcher(Editor), Science and Engineering on Cray Supercomputers, Proceedings of the International Symposium, 1985, 1986, 1987, 1988
- [ 9 ] S.F. Lundstrom(Editor), Supercomputing 88 ; Proceedings, IEEE, 1988
- [10] J.L. Martin, F. Lundstrom(Editor), Supercomputing 88 ; Science and Applications, IEEE, 1988
- [11] K. Winget(Editor), Proceedings of CRAY User Group Meeting, 1987. Vol. 1,2, 1988, Vol. 1,2, CRAY Research
- [12] C. Marino(Editor), Proceedings of the International Conference on Supercomputer Applications in the Automotive Industry, 1986 & 1988, CRAY Research
- [13] FACOM VP-2000 Catalog, Fujitsu, 1989
- [14] SX-3 Catalog, NEC, 1989
- [15] CRAY-2 Catalog, CRAY Research, 1988
- [16] Supercomputer Applications, CRAY Research, 1988
- [17] Directory of Applications Softwares for Cray Supercomputers, CRAY Research, 1988