

웹기반 계산화학 실습교육 지원시스템 개발

Web-based Practice Education Supporting System for Computational Chemistry

안 부 영*, 이 중 숙*, 조 금 원*

Bu-young Ahn*, Jong-suk Ruth Lee*, Kum-won Cho*

요 약

계산화학이란 컴퓨터를 이용한 계산을 통하여 이론 화학의 문제를 다루는 화학의 한 분야로 화학실험실을 컴퓨터로 옮겨 놓은 것이라고 말할 수 있다. 컴퓨터 처리 능력이 향상됨에 따라 거대 분자 구조의 복잡한 계산과 시뮬레이션을 수행하여야 하는 계산화학분야에서의 고성능 컴퓨터 활용은 매우 중요하다. 분자 구조 계산과 시뮬레이션 등의 작업을 위하여 고성능 컴퓨터를 이용하려면 Unix 명령어와 콘솔을 활용하여야 하는데 화학과목을 배우는 이공계 학생들 대부분은 컴퓨터 비전공자로서 Unix에 관하여 모르는 경우가 대부분이다. 그래서 Unix 명령어를 모르더라도 계산화학 실습이 가능한 웹 기반 계산화학 실습 교육 지원 시스템이 필요하다. 본 논문에서 개발한 웹 기반 계산화학 실습 교육 지원 시스템(e-Chem)은 다른 웹 포털 플랫폼보다 표준 지향적이고 콘텐츠 관리 및 협업 기능이 뛰어난 자바 오픈소스인 Liferay 포털 플랫폼을 활용하여 개발하였다. 본 시스템을 활용하면 컴퓨터 비전공자들도 쉽게 계산화학 실습 수업에 참여할 수 있고, Unix 명령어 등을 배우는 시간을 절약할 수 있으며, 친숙한 웹 인터페이스로 학습 효과도 높아질 것으로 기대된다.

Key Words : Computational Chemistry, Cyber Education, Cyberinfrastructure, e-Science, Web Service

ABSTRACT

Computational chemistry is one of the chemistry fields that deals with the theoretical chemistry problem using computer calculations and can be described as the chemistry lab moved on computer space. In line with recent enhancement of processing capability of computers, utilization of high performance computer cannot be overemphasized in the field of computational chemistry in performing complex calculation of huge molecular structure and simulation. While they have to use commands and consoles for high performance computer to execute complex calculation of huge molecular structure and simulation, most of students in natural science and engineering, who are not experts in computer technically, are likely to be unaware of UNIX. Under the circumstances, web-based educational support system for computational chemistry is needed to enable them to practice computational chemistry, even not knowing UNIX command. In this study, e-Chem, one of such educational support systems, is developed by using Liferay portal platform, which is a Java open source more oriented to standard and outstanding in its content management and collaboration function than other web portals. By using this system, even students who are not familiar with computer, are expected to take part in lab classes and save time learning Unix command and also enhance the learning efficiency by using familiar interface.

* 한국과학기술정보연구원 슈퍼컴퓨팅본부(ahnyoung@kisti.re.kr, jsruthlee@kisti.re.kr, ckw@kisti.re.kr)

제1저자 (First Author) : 안부영

교신저자 : 이중숙

접수일자 : 2011년 12월 9일

수정일자 : 2012년 1월 15일

확정일자 : 2012년 1월 28일

I. 서론

계산과학(Computational Science)은 과학이나 공학에서 수치적 방법과 컴퓨터 계산을 이용하여 문제를 해결하는 분야이다. 계산과학은 계산과 컴퓨터 그리고 정보처리 자체에 관해 연구하는 전산학과는 구분된다. 계산과학 중에서 계산화학(Computational Chemistry)이란 컴퓨터를 이용한 계산으로 이론화학의 문제를 다루는 화학의 분야 중 하나이다. 사이버 인프라스트럭처란 다양한 컴퓨팅 자원과 서비스를 상호 이용 가능하도록 제공하는 과학과 공학 연구를 지원하는 측면에서 설명된다. 정보기술의 발전은 거대과학 및 공학 사업을 위해 필요한 사이버인프라스트럭처의 개발을 가져왔다.

현재 국내 대학에서 매년 화학과 관련 84개 대학, 144개 학과에서 매년 6,000명 이상의 학생이 배출되고 있다. 이중, 계산화학은 타 분야 과학 연구의 고성능 분석 기기와 같은 역할을 담당하고 있으며, 이론 연구와 신소재 개발 등에 적극적으로 활용되는 등 그 역할이 점점 중요해지고 있다.

이에, KISTI에서 보유하고 있는 고성능 컴퓨팅 자원과 계산화학 도구를 활용하여 국내 계산화학 실습 환경의 개선을 통하여 정보기술 지식이 부족한 화학 과목을 이수해야 하는 이공계 관련 학과 학생이나 교수에게 접근하기 쉬운 Liferay 포털 플랫폼에 기반한 계산화학 실습 교육 지원 시스템(e-Chem)을 개발하여 제공하려고 한다.

II. 이론적 배경

1990년 이후 컴퓨터를 기반으로 한 분자모델링이 가능해지면서 이를 교육에 활용하여 분자구조를 학생들에게 효과적으로 가르치고자 하는 연구가 진행되어왔다. 그 예로, 1993년 Casanova는 유기화학에서 분자모델링에 유용하게 사용할 수 있는 프로그램을 소개하였고[1], 1998년에는 Martin이 유기화학 분자모델링을 학부수준의 커리큘럼에서 사용할 수 있는 프로그램을 소개하였다[2]. 그 이후, 지난 20년 동안 컴퓨터의 메모리 용량 확장과 CPU 속도의 눈부신 발전은 더 정확하고 유용한 컴퓨터 계산들을 가능하게 하였으며 그 결과 분자구조뿐만 아니라 반응의 생성물 예측 그리고 반응의 메커니즘을 규명하는 것까지 가능하게 되었다. 1990년 이후 분자모델링을 이용한 교육에 대한 관심의 증가는 JCE(Journal of

Chemical Education)에서 “molecular modeling”이란 키워드로 논문을 검색해 보면 그 논문 수가 꾸준히 증가해 왔음을 통해 알 수 있다[3]. 또한 최근 발표되는 화학 저널에 실험결과와 컴퓨터를 이용한 시뮬레이션 결과가 같이 보고되는 것을 자주 볼 수 있는데, 이는 계산화학이 그만큼 중요해졌으며 그 수요가 많이 늘었음을 이야기한다. 때문에, 학부 수준에서 계산화학을 가르치는 것이 중요해졌으며 이를 위해 학부수준의 과목인 Organic Chemistry, Physical Chemistry 등의 주요 화학 과목 커리큘럼에 계산화학을 도입하는 노력이 꾸준히 있어 왔다[3,4].

하지만, 각 대학에 비치되어 있는 컴퓨터 자원 및 software의 라이선스 한계 그리고 분자모델링과 실제 계산을 하고 그 결과를 해석할 수 있도록 하는 software교육 등의 어려움은 계산화학을 보다 많은 학생들에게 쉽게 교육하는데 큰 장벽이 되어왔다. 2009년 JCE에 나온 Allen D. Clauss의 저널에 나온 조사 결과를 보면 실제로 계산화학이 아직까지도 널리 교육되고 있지 못하다는 것을 알 수 있다. Allen D. Clauss의 조사에 따르면 71명의 대학원생(미국 국립대 26명, 미국 사립대 31명, 기타 대학 4명 등) 중 12명이 학부수준의 유기화학에서 분자모델링을 배웠으며 24명이 물리화학에서 소개되는 계산화학을 일부 배웠거나 그 이외의 상위 과목에서 배웠고 절반에 해당하는 35명은 교육을 받은 적이 없다고 조사되었다[3].

또한 2008년 Washington대학의 Lewis E. Johnson과 Thomas Engel은 75명의 학생을 대상으로 물리화학에 계산화학 실습을 추가하여 교육하였으며 기말고사가 있기 전 설문조사를 하여 그 결과를 JCE에 2011년에 보고하였다. 설문결과에 따르면 조교의 도움이 있음에도 여전히 소프트웨어를 배우는데 어려움을 겪는 학생들이 있었으며 소프트웨어 라이선스의 한계로 교육 소프트웨어로써 Spartan Student Edition밖에 사용할 수 없었음을 알 수 있다[4].

국내 교육 환경에서도 이와 동일한 문제를 겪고 있는데, KISTI의 고성능 컴퓨팅 자원을 Bioworks의 경험을 이용하여 e-Chem이라는 통합 플랫폼을 개발한다면 이러한 문제들을 완화하는데 큰 역할을 할 수 있을 것이다. 이러한 환경이 구축될 경우, 라이선스 문제를 손쉽게 해결 할 수 있을 뿐만 아니라 학생의 입장에서 보다 쉽고 직관적으로 접근할 수 있는 워크플로우를 제공함으로써 학생들이 계산화학을 배우는데 필요한 진입장벽을 낮출 수 있을 것으로 기대한다.

III. 계산화학 관련 연구 현황

사이버인프라스트럭처란 다양한 컴퓨팅 자원과 서비스를 상호 이용 가능하도록 제공하는 과학과 공학 연구에 지원이라는 측면에서 설명된다. 정보기술의 발전은 거대과학 및 공학 사업을 위해 필요한 사이버인프라스트럭처의 개발을 가져왔다. 그러나 대규모 연구 커뮤니티에서는 가능한 사이버인프라스트럭처의 활용이 소규모 개인 연구자에게는 접근이 어려운 실정이다. 계산화학분야에서는 커뮤니티, 이론 연구자, 실험연구자에 이르기까지 컴퓨터 자원에 대한 필요성이 증가하고 있기에 사이버인프라스트럭처를 기반으로 구축된 GridChem과 같은 계산화학 커뮤니티는 미국의 연구재단(NSF)에서 상당한 예산을 지속적으로 투자하여 슈퍼컴퓨팅센터의 커다란 구성요소로 자리 잡고 있다.

1. GridChem

미국 일리노이대학교 슈퍼컴퓨팅센터(NCSA, National Center for Supercomputing Applications)에서 개발한 그리드기반 계산화학 연구 환경인 GridChem은 사용하기 쉬운 인터페이스로 컴퓨터에 익숙하지 않은 화학 및 생명분야 커뮤니티 연구자들에게 사용 장벽을 낮춤으로써 사이버인프라스트럭처의 활용성을 높였다는 평가를 받고 있다. 이 프로젝트는 미국 연구재단(NSF, National Science Foundation)이 지원하고 있으며, 다른 연구기관과의 연계를 통해 글로벌 사이버인프라스트럭처를 구축하여 연구자들에게 각자의 데스크톱 환경에서 그리드 컴퓨팅을 활용 가능한 서비스를 제공하고 있다[5].

그리드 컴퓨팅 환경이라 함은 보안, 작업 추적, 라이선스 계약, 자원 할당, 대용량 데이터, 사용자 인터페이스를 모두 포함한다. GridChem은 그리드 컴퓨팅에 접근할 수 있는 광범위한 화학분야 커뮤니티에서 활용되고 있다. 또한 high-end 컴퓨팅 활동, 그리드 인프라스트럭처, 협업 도구 등의 활용에 있어 선도적 역할을 수행하고 있다. 그리고 화학분야 연구자의 연구 목적을 기반으로 계산화학 도구 사용을 원활히 제공할 수 있도록 지원하는 컴퓨터 기술자를 포함하고 있다.

GridChem 프로젝트는 화학분야에서의 연구 및 교육의 지원뿐만 아니라 타 분야 커뮤니티에 적용 가능한 기능을 배포할 수 있는 선도적인 사례가 될 것이다. 향후 GridChem 기능들은 전기전자, 생물공학,

의학 등의 분야에서 중요한 신물질을 생산하는 산업에 잠재적으로 영향을 미칠 것으로 예상된다[6]. 특히 나노공학과 의약품 개발에 계산화학이 매우 중요한 분야이기에 국가 경제와 융합 기술의 가용성을 전제로 GridChem의 개발을 지원할 것이다.

GridChem에서는 총 31편의 논문을 조사·분석하였는데 그 중에서 25편의 논문이 Gaussian을 활용하여 논문을 작성한 것으로 나타났다. 나머지 6편의 논문에서는 AMBER, NAMD 등의 도구가 활용되었다.

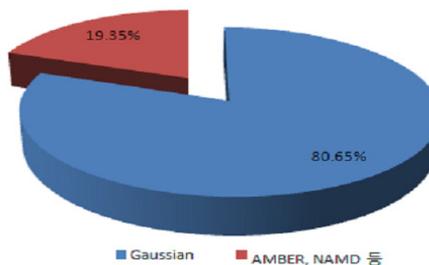


그림 1. GridChem 계산화학도구 활용 현황
Fig. 1. Status of CC tools in GridChem

2. CICC

미국 인디애나대학교에서 개발하여 운영 중인 CICC(Cheical Informatics and Cyberinfrastructure Collaboratory)에서는 GridChem에서와 같이 구체적인 도구를 논문을 통해 확인하기 어려웠다. CICC에서는 총 25개의 논문을 조사하였는데 계산화학보다는 화학정보학에 관한 내용이 많았다. 이러한 특성 때문에 개방된 다양한 데이터베이스를 구축한 웹사이트의 데이터를 이용하여 예를 들어 PubMed, PubChem, PDB를 이용하여 데이터를 모으고 필요한 데이터를 구분하는 연구가 주로 수행되고 있었다.

CICC는 그리드 기술을 사용하여 분산된 화학적 도구, 시뮬레이션, 문서, 데이터베이스를 생물학적 자원과 편리하게 통합 가능하게 구성되어 있다. CICC는 오픈 웹 서비스 기반 구조를 이용하여 NIH Molecular Libraries Initiative 및 PubChem으로부터 받아오는 데이터를 통합할 수 있는 인터페이스와 애플리케이션 및 데이터베이스를 개발하여 제공하고 있다[7]. 또한 화학정보학 교실이라는 가상의 교실을 웹사이트에 구축하여 인디애나대학교의 학부생과 대학원생들이 어디서든 바로 접속할 수 있는 사이버교육의 체계가 잘 갖추어져 있다[7].

CICC와 같은 화학적인 정보 처리가 가능한 사이트를 통해 신약개발과 화학적 조를 컴퓨터를 통해 예측하는 QSAR(Quantitative Structure Activity Relationship) 학문이 더 발전할 수 있을 것이다.

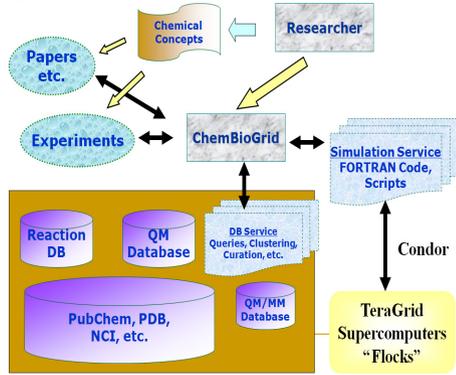


그림 2. 분자모델링을 위한 Varuna 환경
Fig. 2. Environment of Varuna for molecule modeling

3. NBCR

미국 샌디에고대학교에서 개발하고 운영 중인 NBCR(National Biomedical Computation Resource)은 국가 생물학자원을 이용하여 거대 생물 의학 연구를 지원하는 사이트이다. NBCR의 주요 목적은 그리드 인프라스트럭처 기반의 계산화학 환경에 모든 연구자들이 접근을 가능하게 한다는 것이다. 물리, 화학, 생명 분야의 연구자들이 데이터와 실험을 통한 각자의 연구를 수행하여 의학적으로 중요한 신약물질 설계, 뇌 화상 진단과 심혈 관계 질환 등을 비교 유전체학로부터의 생물학적 기관에 이르기까지 광범위한 조사의 통합 환경을 제공한다[8].

NBCR에서는 2004년부터 2010년까지 게재되었던 논문 총 319편을 조사하였다. NBCR은 국가적인 생물학 계산 자원으로 다중 척도의 생물학 연구가 가능하도록 계산 자원 및 커뮤니티를 구성하여 연구자들을 지원하고 있다. 조사한 논문은 크게 세 부분으로 나눌 수 있었다. 첫 번째, 생물학계에 응용할 수 있는 다중척도 다양한 시뮬레이션 도구에 관한 부분, 두 번째, 신경과 기관의 생물물리학적 다중척도 모델링 환경을 조성하는 부분, 마지막으로 이러한 다중척도 생물학 연구를 위한 유연하고 확장된 사이버인프라스트럭처 프레임워크를 구축하는 부분으로 나누어진다.

NBCR은 GridChem과 다르게 생물학적 분야를 다루다 보니 화학 분야보다는 더 복잡하고 다양한 도구들을 사용하게 되었다. 이러한 많은 도구를 세로 이하 과정의 통합 모델링 및 계산(APBS, PDB2PQR, FETK, SMOL, AutoGrow, FERBE, AMBER, CHARMM, NAMD, Gromacs, IMOD, ImageJ), 다중척도 생물 의학 모델링의 시각화 환경 생성

(AutoDock, MGLTools), 그리드 컴퓨팅과 다중척도 생물 의학 애플리케이션의 분석(GAMA, Opal, TxBR, GAMESS, QMview)을 위한 도구로 나누어 볼 수 있다. 이 밖에도 통계적인 도구로 ANOVA, MATLAB 등의 소프트웨어가 사용되었다.

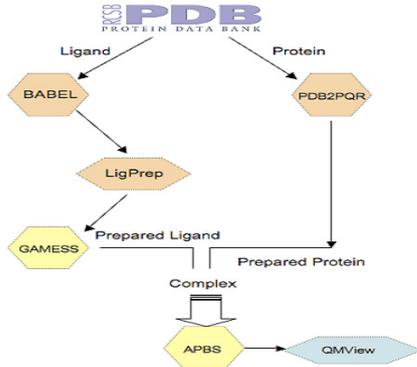


그림 3. NBCR 계산화학도구 활용 사례[8]
Fig. 3. Case of Using CC tools in NBCR[8]

4. Liferay

본 논문에서 개발한 웹 기반 계산화학 실습 교육 지원 시스템(e-Chem)은 다른 웹 포털 플랫폼보다 표준지향적이고 콘텐츠 관리 및 협업 기능이 뛰어난 자바 오픈 소스인 Liferay 플랫폼을 활용하여 개발하였다. Liferay Portal 플랫폼은 다른 포털과 비교하여 가볍고 표준지향적이며 Java 기반의 포털을 제공한다. 또한, 오픈소스 라이선스로 상당한 비용 절감 효과가 있다.

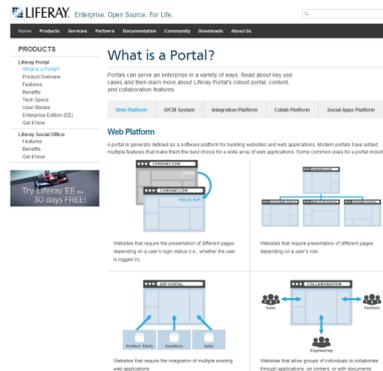


그림 4. Liferay 웹사이트[9]
Fig. 4. Liferay Website[9]

Liferay Portal 플랫폼의 특징은 다음과 같다.

- OpenSource 표준 포털: MIT License
- 플랫폼: J2EE JAVA
- 포털, 콘텐츠 관리 및 협업 프레임워크 지원

- 개발자를 위한 프로그래밍 인터페이스 제공
- 커뮤니티 활성 버전으로 최신기술 기능 및 지원
- 업데이트를 포함한 상용 서비스 제공

IV. 시스템 설계

2장의 이론적 배경과 3장의 관련 연구현황을 종합하여 요구분석과 수업절차 분석, 시스템 구조 설계 등의 시스템 설계를 수행하였다.

1. 요구분석

본 시스템을 사용할 서용대, 서강대 등에서 계산화학 강의를 강의하는 교수와 조교들을 대상으로 면담을 실시하여 요구사항 조사를 실시하였다.

표 1. 요구사항 및 해결방안
Table 1. User requirement and solution

구분	요구사항	해결방안
강의	PC 성능한계로 제한된 몇개의 간단한 분자식만 실습해야 함.	Cluster 또는 슈퍼컴퓨터를 이용하여 복잡한 계산환경 지원
	컴퓨터 비전공자에게 Unix 명령어를 빠른 시간 내에 습득하게 하는 것은 관심도 저하로 인하여 학습 효과 기대하기 어려움.	UNIX 명령어를 전혀 알지 못더라도 계산화학 실습 가능한 환경 제공 => 텍스트 및 그래픽 입력기
	매 강의마다 설치된 프로그램 점검해야 함. 학생에 의해 변경된 환경 수정하고, 이전 강의에서 생성된 데이터를 삭제하는데 많은 시간 소요됨.	입출력 데이터 및 계산도구에 대한 서버와 Cluster 또는 슈퍼컴퓨터에서 동작 가능하도록 일관성있는 통합 환경 제공
	저작권, 사용권 등의 제약으로 다양한 계산화학 도구활용하여 실습하기 어려움.	KISTI가 보유한 Gamess, Gaussian, Chamm 등의 계산화학도구 사용 가능
	수업 전후에 계산관련 퀴즈와 질문을 매번 작성하기 어려움.	다양한 퀴즈와 질문 저장하는 문제는행식 수업콘텐츠 제공
	여러 개의 프로그램을 개별적으로 실행하면서 진행되는 실습 수업 절차는 효율적이지 못함.	하나의 프로그램을 실행하는 것처럼 여러단계 계산 워크플로우 구성하여 웹기반 통합환경 제공
응용 시스템	Chemworks와 같은 워크플로우 기반의 응용 환경이 없음.	Bioworks 개선하여 Chemworks 응용 인터페이스 개발
인프라 구조	기존에 작성된 실험 데이터와 결과물을 활용할 수 있는 방법이 없음.	입출력 데이터를 관리함으로써 필요 시 자료 공유 및 협력 가능한 환경 제공

요구분석을 위한 조사는 계산화학 연구자와 교수

커뮤니티인 MCI 연구회를 대상으로 하였다. 요구분석 조사에서는 KISTI에서 개발하여 서비스 중인 Bioworks를 기반으로 Chemworks라는 워크플로우 기반 응용 환경을 개발하는 것이 어떤지에 관한 내용도 포함되었다. 요구분석에서 나온 사항을 정리하면 <표 1>과 같다.

2. 수업절차 분석

계산화학 분야 실습수업을 진행하기 위해서는 교수 또는 실습조교가 필요한 도구를 수작업으로 설치하여야만 했다. <그림 5>와 같이 진행되었던 기존의 실습수업 절차를 분석하여 자동화된 시스템을 개발하는데 <그림 6>과 같이 반영하였다.

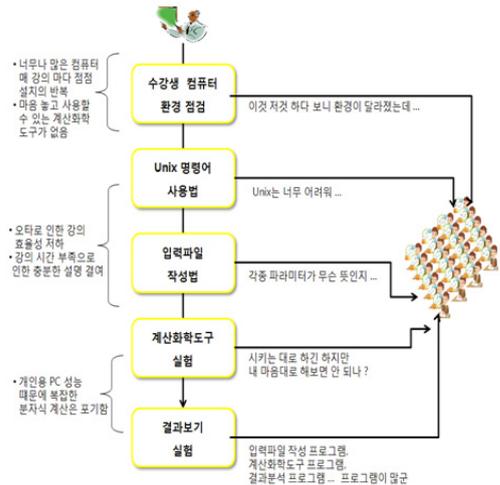


그림 5. 수업절차 분석
Fig. 5. Analysis of education process

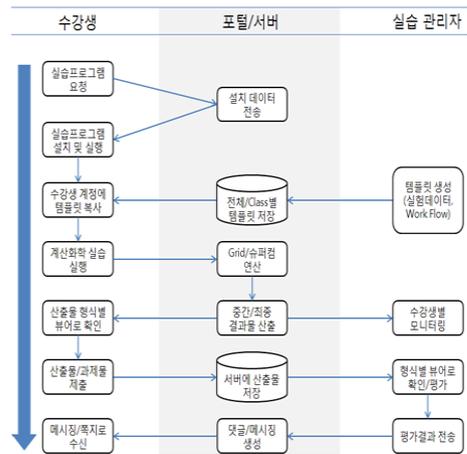


그림 6. 수업절차 시스템 적용
Fig. 6. Adaptation of education process

3. 시스템 계층별 구조 설계

e-Chem의 계층은 <그림 7>와 같이 시스템 계층과 핵심 미들웨어 계층, 서비스 미들웨어 계층, 사용자 서비스를 위한 웹 포털 계층 등 4개로 구성하였다. 시스템 계층은 OS를 비롯한 시스템 소프트웨어를 장착한 하드웨어 노드 또는 슈퍼컴퓨터 리소스를 포함하며, 핵심 미들웨어 계층은 분산 OS, 그리드 미들웨어 등이 포함된다. 계산과학 서비스 미들웨어에는 계산화학을 지원하기 위한 기본적인 소프트웨어 모듈들이 포함되고, 웹 포털 계층을 통하여 사용자에게 서비스하게 된다.



그림 7. e-Chem 계층구조도
Fig. 7. e-Chem hierarchical structure

4. 소프트웨어 구성 설계

e-Chem을 구성하고 있는 소프트웨어는 <그림 8>에서 보는 바와 같이 계층별로 클라이언트 티어, 프레젠테이션 티어, 비즈니스 티어, 리소스 티어 등과 같이 4-tier로 구성된다. 각각의 티어는 별도의 서버로 독립될 수도 있고, 경우에 따라서는 하나의 서버 상에 구현될 수 있다.

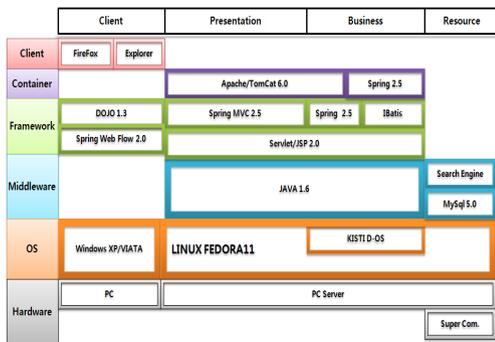


그림 8. 소프트웨어 구성요소
Fig. 8. Software component

클라이언트 상에서 소프트웨어 개발 도구는 jQuery와 Spring Web Flow를 채택한다. jQuery는 가장 많이 사용되며 잘 만들어진 오픈소스 자바스크립트 라이브러리이다. 분자의 편집과 실험결과를 보여주는 뷰어는 JMOL을 사용하고자 한다. Jmol은 오픈소스 자바기반의 화학구조 3D 뷰어 프로그램이다. 윈도우, 맥OS X, Linux/Unix 기반의 OS에서 데스크탑 기반에서 동작하며 자바 애플릿 기술 적용으로 웹페이지 상에서도 구현이 가능하다.

Spring Web Flow(SWF)는 Spring 프레임워크에서 생성된 모듈이다. 이 모듈은 Spring MVC를 포함하는 Spring의 웹 애플리케이션 개발 스택의 일부이다. Spring Web Flow는 웹 애플리케이션 페이지의 흐름을 관리하기 위한 가장 훌륭한 해결책이 되는 것을 목표로 하고 있으며, 애플리케이션이 애플리케이션 트랜잭션 내에 각각의 단계를 통해 사용자를 가이드하기 위한 마법사처럼 복잡하게 제어되는 탐색(navigations)을 요구할 때 사용하기 위한 강력한 컨트롤러이다.

Apache-Tomcat 6.0은 프레젠테이션 티어와 비즈니스 티어의 컨테이너로 채택된다. 아파치 톰캣(Apache Tomcat)은 아파치 소프트웨어 재단에서 개발된 서블릿 컨테이너(또는 웹 컨테이너)만 있는 웹 애플리케이션 서버이다.

데이터베이스 관리자는 프레임워크가 자동적으로 생성해주는 쿼리문을 분명하게 이해하지를 못한다는 것이다. 그리고 이것이 어떻게 애플리케이션을 유연하게 만드는지 알지 못한다. 애플리케이션의 가장 중요한 병목현상을 가져오는 요인은 데이터베이스이다. 프로그램은 SQL 쿼리문을 넘어서 완벽한 제어를 해야만 한다. 그러면 데이터베이스의 분석이 가능하게 되고 성능을 제대로 관리할 수 있게 된다.

V. 시스템 개발

1. Chemworks 인터페이스 개선

KISTI에서 개발한 워크플로우 기반의 계산화학 실험 프로그램인 Chemworks의 UI를 개선하여 효율적인 워크플로우 편집, 직관적인 정보 표기로 인한 실험 설계의 용이성을 위하여 아래와 같은 부분을 개선하는 것을 목적으로 UI 설계를 진행하였다.

- 단위 Process Module 디자인 개선
- In/Output node 변경
- Node의 in/output data format 형식 표기

기존 workflow plane에서 단위 process의 구조는 process의 이름의 길이에 따라 모듈의 넓이의 변동 폭이 넓어 일관된 look & feel이 적용되지 못하였다. 각 프로세스의 입력과 출력을 나타내는 node의 크기가 적어서 실제 workflow 편집 시 클릭&드래그를 통한 각 process의 연결이 용이하지 못하였다. 또한 입력 node가 여러 개 존재하는 경우 개별 node가 어떤 형식의 data format을 수용하는지 파악이 어려워 일일이 연결을 해보거나 추가로 process의 상세정보를 열람/확인해야만 올바른 process간의 연결이 가능하며, 직관적인 계산화학 실험 설계가 어려웠다. 그래서 기존 보다 균등한 폭의 모듈 디자인과 진행 상황에 따라 상단 Process Name Bar만 색이 변하도록 디자인 하여 보다 통일된 Look & Feel을 제공하는 UI를 기획, 개발하였다.

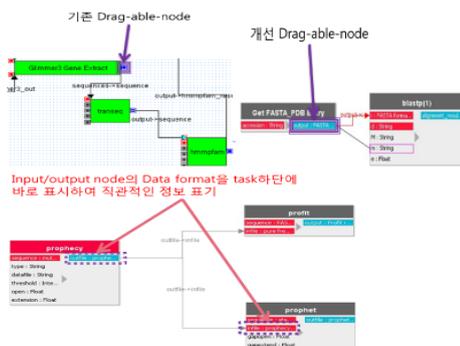


그림 9. 인터페이스 개선
Fig. 9. Reforming Interface

Process Module Node 개발에 있어서는 기존 Drag 가능한 node의 크기를 확장하여 편집 용이성을 개선하였으며, Output node를 드래그하여 Input node에 연결하면 해당 node가 highlight되어 어떤 node에 link하는지 바로 파악 가능하게 개발하였다. Process Module Node의 직관적인 Data format 표기를 위하여 Input/output node의 Data format을 Process Module에 바로 표시, 직관적인 정보 표기를 통한 workflow 편집 UX의 depth를 줄여 계산화학 실험 설계의 효율성을 고려하였다.

Chemworks는 별도의 프로그램 설치없이 KISTI가 보유한 고성능 컴퓨터를 활용하여 Gaussian, Gamess 등의 계산화학 도구를 이용하여 입출력 자료관리 공유, 계산화학 분석과정 생성 실행, 결과물 저장관리 가시화 등의 기능을 제공하는 웹 기반 계산화학 실습 교육 및 연구를 위한 통합 서비스 플랫폼이다. Chemworks의 서비스 구성(Web-like Client-Server)은 계산화학 분석작업 생성을 위한 클

라이언트 프로그램과 작성된 분석 작업을 슈퍼컴퓨터에서 빠르고 정확하게 실행하고 결과물을 생성관리하기 위한 서버 엔진으로 구성되어 있다.

2. 미들웨어 연계기능 개발

계산화학 포털(e-Chem) 개발과 관련하여 4개 분야, 계산화학 통합분석시스템(Chemworks) UI 개발과 관련하여 3개 분야로 세부 구분하여 범위를 설정하였다. 포틀릿 표준을 사용하는 오픈소프 포털 프레임워크인 Liferay의 기본 architecture 및 포틀릿 숙련을 통해, 기존 오프라인/로컬 PC 환경에서 진행되었던 계산화학 실습을 on-line/web server-client 환경에서 실행 가능한 최소한의 실습과 관련된 사용자 인증, 유저별 권한 제어, 서버에서 구동되는 계산용 슈퍼컴퓨터와의 연산정보 연계, web/server단에서의 사용자 DB 형상 연동 등 주요 기능을 정의하였다.

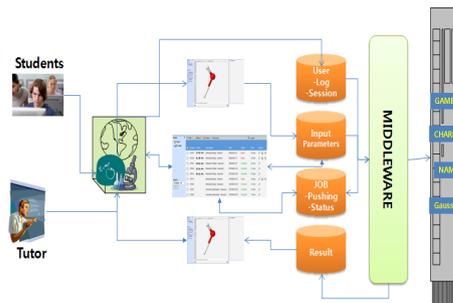


그림 10. 미들웨어 연계구성도
Fig. 10. Middleware Linked architecture

3. 웹 포털 개발

e-Chem은 Liferay 기반의 계산화학 교육을 효율적으로 진행하기 위하여 계산화학 실습 프로그램인 Chemworks와 연동되는 포털 사이트이다. Liferay 기반으로 e-Chem 웹사이트를 개발한 이유는 과제 공지, 실습 결과의 채점 등의 학사 관리 수행과 실습 수업 진행 내용을 공유할 수 있는 게시판/메시징 모듈을 관리자가 자유롭게 제작하여 각 대학/실습 class별 수업 진행이 가능하기 때문이다.

e-Chem을 개발하기 위하여 포틀릿 표준을 사용하는 오픈 소스 포털 플랫폼인 Liferay의 기본 아키텍처 및 포틀릿 숙련을 통해 기존 오프라인/로컬 PC 환경에서 진행되었던 계산화학 실습을 on-line/web server-client 환경에서 실행 가능한 최소한의 실습과 관련된 사용자 인증, 사용자별 권한 제어, 서버에서 구동되는 계산용 슈퍼컴퓨터/그리드 시스템과의 연산 정보 연계, web/server단에서의 사용자 DB 형상 연동 등 주요 기능 개발하였다. 또한, KISTI에서

개발한 워크플로우 기반의 Computational Chemistry 실습 프로그램인 Chemworks의 UI를 개선하여 효율적인 워크플로우 편집, 직관적인 정보표기로 인한 실험 설계의 용이성을 위하여 UI 설계를 진행하였다.

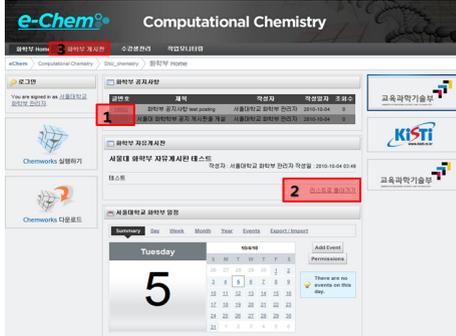


그림 11. e-Chem 웹사이트(http://echem.kisti.re.kr:8080)
Fig. 11. e-Chem website(http://echem.kisti.re.kr:8080)

e-Chem 웹사이트 화면은 <그림 11>과 같고 Chemworks 화면은 <그림 12>와 같다. 웹사이트의 기능은 사용자 관리, 수업 관리, 콘텐츠 관리, 과제 관리로 구성되어 있으며 수업을 진행하는 관리자가 자율적으로 메뉴를 조정할 수 있다. e-Chem 웹사이트에서 생성되는 사용자 DB는 Chemworks DB와 연동되어 학생과 학생들이 계산한 시뮬레이션 진행 상황을 모니터링하고 시뮬레이션 결과를 공유하는 기능을 수행하도록 구현하였다

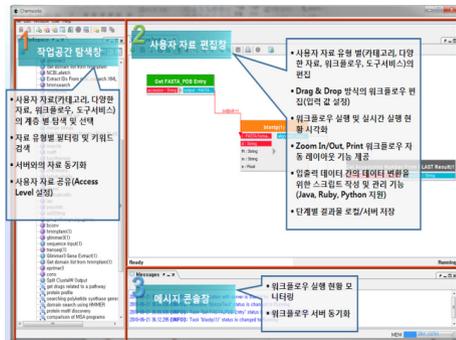


그림 12. Chemworks 메인화면
Fig. 12. Chemworks main screen

작업 모니터링은 강의 중 수강생들이 Chemworks를 통해 실행하는 계산화학 시뮬레이션의 서버에서의 진행 과정을 모니터링 하는 기능이다. <그림 13>에서 보는 바와 같이 해당 강의 홈페이지로 이동하여 메인 메뉴 바 아래에 있는 작업 모니터링 버튼을

누르면 해당 강의에 속해 있는 연산(해당 클래스에 속해 있는 학생이 Chemworks를 통해 서버에 전달한 시뮬레이션)의 진행 정도를 확인할 수 있다.



그림 13. 작업 모니터링 화면
Fig. 13. Job monitoring screen

VI. 결론

학문이 점점 세분화되고 융합되어 가는 현 시점에서 계산화학 화학관련학과 학생의 컴퓨터에 대한 사용 능력 수준, 실습장비 환경 등에 구애 받지 않는 실습 교육의 제공, 체계적인 실습/학사관리를 가능하게 하는 교육 지원도구인 e-Chem을 KISTI에서 보유한 자원을 활용하여 개발하여 제공하는 것은 시기적절하다고 판단된다.

요즘 학생들은 인터넷을 잘 활용하기 때문에 이런 학생들이 본 시스템을 활용하면 컴퓨터 비전공자들도 쉽게 계산화학 실습수업에 참여할 수 있고, Unix 명령어 등을 배우는 시간을 절약할 수 있으며, 친숙한 웹 인터페이스로 학습 효과도 높아질 것이다.

e-Chem은 계산화학 실습환경을 개선하고 정보기술 지식이 부족한 이공계 관련 화학 관련학과 학생과 교수들에게 접근하기 쉬운 인터페이스를 제공하기 때문에, e-Chem을 통해 어려운 화학 과목을 접근하기 쉽게 하여 학습에 관한 흥미 및 효율성 향상, 슈퍼컴퓨터의 잠재적 사용자층 확보, 향후 전문 연구용도로의 발전에 기여할 것이다.

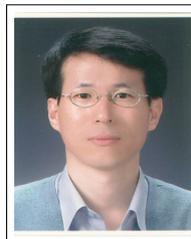
더불어 계산화학 실습수업 시스템 개발을 통한 화학과 정보기술이 융합된 고등교육용 교육 도구를 각 대학에 보급함으로써 상업용 교육 도구 대체에 따른 각 교육기관의 비용 절감과 효율적인 예산활용이 가능해질 것이다. 이를 통해 국산의 고등교육용 도구의 국내외 보급 및 활용 확대를 통한 국가경쟁력 향상이 기대된다.

참 고 문 헌

- [1] Casanova, J., "Computer-Based Molecular Modeling in the Curriculum," *J.Chem.Educ.*, 70(11), pp. 904-909, 1993.
- [2] Matin, N. H., "Integration of Computational Chemistry into the Chemistry Curriculum," *J.Chem.Educ.*, 75, pp. 241-243, 1998.
- [3] Allen D. Clauss, "Integrating Computational Molecular Modeling into the Undergraduate Organic Chemistry Curriculum," *J.Chem.Educ.*, 86, pp. 955-958, 2009.
- [4] Lewis E. Johnson, "Integrating Computational Chemistry into the Physical Chemistry Curriculum," *J.Chem.Educ.*, 88, pp. 569-573, 2001.
- [5] TeraGrid <<http://www.teragrid.org>>
- [6] GridChem <<http://www.gridchem.org>>
- [7] CICC <<http://www.chembiogrid.org>>
- [8] NBCR <<http://www.nbc.net>>
- [9] Liferay <<http://www.liferay.com/>>

조 금 원(Kum-won Cho)

정회원



1993년 2월 : 인하대학교 항공우주
주학과 (공학사)
1995년 2월 : KAIST 항공우주
학과 (공학석사)
2000년 2월 : KAIST 기계공학
과 (공학박사)
2001년~현재 : 한국과학기술정

보연구원 책임연구원

<관심분야> 열유체, 항공우주, e-Science, 컴퓨터 시
뮬레이션

안 부 영 (Bu-young Ahn)

정회원



2003년 8월 : 공주대학교 교육정
보대학원 (교육정보학 석사)
2009년 2월 : 충남대학교 문헌
정보학과 (문헌정보학 박사)
1982년 2월~현재 : 한국과학기술
술정보연구원 책임기술원

<관심분야> 사이버교육, 메타데이터, e-Science

이 종 숙(Jong-suk Ruth Lee)

정회원



2001년 : Univ. of Canterbury
(New Zealand) 컴퓨터공학(박사)
2002년~현재 : 한국과학기술정
보연구원, 책임연구원
2005년~현재 : 과학기술연합대
학원대학교(UST) 그리드/슈퍼
컴퓨팅전공, 겸임부교수

<관심분야> 그리드/분산컴퓨팅, 그리드미들웨어, 컴
퓨터시뮬레이션, 컴퓨팅네트워크 및 망트래픽모델링