

다분야 계산과학 시뮬레이션을 위한 EDISON[†] 플랫폼 연구

유정록* 진두석** 류훈*** 이준형**** 이종숙***** 조금원*****

◆ 목 차 ◆

1. 서 론
2. 관련 연구
3. EDISON 플랫폼 개요
4. 사이언스 앱스토어 프레임워크
5. 가상화 컴퓨팅자원 및 작업 관리 프레임워크
6. 시범사례 : EDISON 나노물리 서비스
7. 결 론

1. 서 론

고성능 컴퓨팅 기술 및 인터넷 환경은 해를 거듭할수록 비약적인 발전을 이루고 있다 [1]. 이러한 컴퓨팅, 네트워크, 웹 기술의 발달은 다양한 계산과학 분야 (예, 물리, 화학, 유체, 구조역학, 환경, 의료 등)에서 이론 및 실험 연구의 시간, 공간적 제약을 극복하고, 차세대 문제해결환경으로서 사이버인프라스트럭처 (cyber-infrastructure)의 활용성을 증대시키고 있다. 특히, 슈퍼컴퓨터, 고성능 클러스터 및 그리드 컴퓨팅 등을 이용한 시뮬레이션 (모의실험; simulation)은 연구뿐만 아니라 교육, 사회, 의료, 경제, 국방, 공공 등 다양한 응용 분야에 활용되고 있다.

시뮬레이션과 IT 기술이 발달한 미국, 영국 등의 선진국들에서는 국가 과학기술 경쟁력 강화 및 우수 전문고등 인력 양성을 위해 학·연·산 협력을 바탕으로 최신 과학기술 연구 성과를 교육/연구 환경에 접목하려는 시도를 계속하고 있고, 그 투자규모 또한 지속

적으로 커지고 있다. 대표적인 결과들로는 HUBZero 플랫폼 [2]을 기반으로 한 nanoHUB [3], Manufacturing Hub [4], NEES [5] 등의 여러 허브 사이트들, 화학 고등 교육/연구를 위한 ICLCS (Institute for Chemistry Literary and Computational Science) [6], 그리고 ICEAGE [7] 프로젝트 등이 있다.

우리나라 교육과학기술부도 2011년도부터 최신 연구 성과를 교육/연구 환경에 융합하여, 연구/개발자 및 사용자 모두가 언제 어디서나 쉽게 접근하여 활용할 수 있는 첨단 사이언스 교육·허브 (EDISON; EDucation-research Integration through Simulation On the Net) 개발 사업 [8]을 진행하고 있다.

다양한 분야의 계산과학 시뮬레이션 환경을 제공함에 있어 중요한 사항은 사용자들에게 서비스되는 양질의 시뮬레이션 S/W (즉, 최신 과학기술 연구 성과인 해석 도구, 또는 in-house 코드)들과 관련된 콘텐츠들이다. 특히, 이러한 다분야의 최신 시뮬레이션 S/W 들을 저장/관리하며, 대규모 컴퓨팅자원을 활용하여 효율적인 시뮬레이션 실행 서비스를 제공하는 응용분야 독립적 (application-domain neutral)인 S/W 플랫폼의 개발/보급이 매우 중요하다.

본 논문에서는 다분야 계산과학 시뮬레이션을 위한 EDISON 플랫폼 연구/개발에 대해 기술한다. 특히, 전체 EDISON 플랫폼 구조와 함께, 응용분야 독립성을 확보하기 위한 사이언스 앱스토어 (Science Appstore) 프레임워크와 사용자 인증 및 파일 입/출력 서비스를

† 첨단 사이언스 교육·허브 (EDISON; EDucation-research Integration through Simulation On the Net)

* 한국과학기술정보연구원 슈퍼컴퓨팅센터 차세대연구환경 개발실, junglok.yu@kisti.re.kr

** dsjin@kisti.re.kr, corresponding author

*** elec1020@kisti.re.kr

**** junhyung@kisti.re.kr

***** jsruthlee@kisti.re.kr

***** ckw@kisti.re.kr

포함하는 가상화 컴퓨팅자원/작업 관리 (Virtualized computing resources and job managements) 프레임워크에 대해 상세히 설명하고자 한다. 또한 시범사례로 EDISON 플랫폼에 기반한 나노물리 (nano-physics) 시범 서비스 환경을 제시한다.

EDISON 플랫폼은 전산열유체, 나노물리, 화학분야를 시작으로 구조동역학, 전산설계 분야로 확대 보급할 예정이다. EDISON 플랫폼 개발을 통해 이공계 학생들은 첨단 사이버 환경에서 최신 과학기술 분야에 대한 지식과 원리를 습득할 수 있으며, 과학기술 연구 성과와 이공계 교육의 유기적 융합 및 선순환 체계 구축이라는 관점에서 향후 국가 과학기술경쟁력 성장 기틀을 마련하고자 한다.

2. 관련 연구

최근, 교육/연구의 목적으로 다양한 분야에서 사이버 인프라스트럭처 기반의 시뮬레이션 실행 환경이 활용되고 있다. nanoHUB[3], ICLCS[6], ICEAGE[7], e-AIRS[9] 가 그 대표적인 예이다.

nanoHUB[5]는 1995년 NCN (Network for Computational Nanotechnology) 프로젝트를 통해 개발되었으며, 나노기술 연구자들이 개발한 다양한 시뮬레이션 S/W와 콘텐츠를 서비스하며, 현재 172개국 약 200,000여명의 사용자가 활용하고 있다.

nanoHUB는 2011년 5월까지 약 350,000건의 시뮬레이션이 수행되었으며, 연구에서 인용되는 문헌도 약 575건에 이를 정도로 대중화되어 있다. 특히, 시뮬레이션 환경 및 콘텐츠 관리 시스템을 제공하는 HIBZero 플랫폼을 기반으로 시뮬레이션 S/W를 활용하기 위한 도구인 Rapture, 시뮬레이션 공유, 콘텐츠 변환 도구 등의 유용한 서비스 등을 제공한다. 공개 소스로 배포되고 있는 HUBZero [2] 플랫폼은 제조 (Manufacturing Hub [4]), 재난/재해 (NEES [5]), 의료 (CLEERhub.org [10])등의 약 30개 이상의 다양한 응용 분야에서 활용되고 있다.

ICEAGE는 유럽연합(EU)이 주도하는 다국적 교육 중심의 사업으로, EGEE(Enabling Grids for E-science)의 기반의 대규모 다목적 사이버 인프라스트럭처를 제공한다. 연구/교육자들이 그리드 환경에 대한 교육

을 할 수 있는 교육 프로그램 및 교육 자료들이 개발, 제공한다 [7].

e-AIRS[9]는 웹 기반에서 원격으로 공동실험을 요청하고, 이기종의 컴퓨팅 자원을 공동 활용해 수치해석을 하는 것은 물론 수치해석 결과를 한 눈에 비교·분석할 수 있는 환경을 제공하는 시스템이다. 2008년부터 전문 지식 없이도 쉽게 웹상에서 전산열유체 시뮬레이션을 수행할 수 있도록 e-AIRS 포털을 구축하여 제공한다.

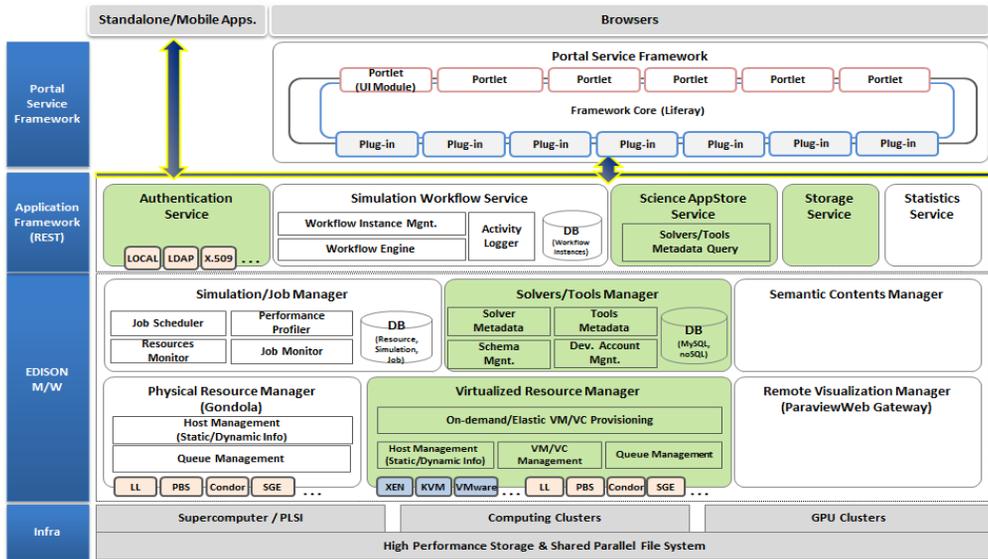
3. EDISON 플랫폼 개요

EDISON 플랫폼의 목적은 다분야의 이공계 시뮬레이션 S/W 및 콘텐츠를 관리, 실행할 있는 사이버 인프라스트럭처를 기반의 차세대 교육/연구 융합 환경을 제공하는 것이다. 이를 위한 플랫폼 요구사항은 다음과 같다.

- 범용성
다분야의 계산과학 응용을 위해 개발된 다양한 종류의 시뮬레이션 S/W 및 콘텐츠를 관리할 수 있어야 한다.
- 확장성
시뮬레이션 S/W가 실행되는 컴퓨팅자원에 대한 중립성을 가져야 한다. 즉, 새로운 컴퓨팅자원 환경과도 연동될 수 있도록 추상화된 인터페이스를 제공해야 한다.
- 개방성
웹 포털, 독립형 (stand-alone) 어플리케이션, 모바일 환경 등의 다양한 클라이언트를 수용할 수 있도록 개발된 웹 표준 기반의 인터페이스를 제공해야 한다.

(그림 1)은 현재 연구개발을 진행 중인 EDISON 플랫폼의 계층 구조를 보여준다. 크게 1) EDISON 미들웨어, 2) EDISON 어플리케이션 서비스, 그리고 3) EDISON 포털 서비스로 구성된다.

EDISON 미들웨어는 시뮬레이션 S/W 메타데이터 관리, 다수개의 계산 작업으로 이루어진 시뮬레이션 수행 데이터 관리, 데이터 이력출처 관리, 이기종(물



(그림 1) EDISON 플랫폼 계층 구조

리 및 가상)의 컴퓨팅자원 및 가상화자원과의 연동기능 등을 제공한다.

EDISON 어플리케이션 서비스는 사용자 인증, 워크플로우 수행, 시뮬레이션 S/W에 대한 메타데이터 질의, 저장 공간, 통계 서비스 등을 위해 웹 표준의 RESTful [11] 인터페이스를 제공한다.

EDISON 포털 서비스 프레임워크는 분야별로 특화된 웹 기반의 시뮬레이션 실행 GUI를 제공하며, 계산과학 응용과 관련된 다양한 콘텐츠를 관리하는 기능을 수행한다. EDISON 플랫폼에서는 오픈 소스 기반의 Liferay [12] 서비스 프레임워크를 활용한다.

다음의 3, 4장에서는 EDISON 플랫폼에 핵심 요소 기술인 응용분야 독립성을 확보하기 위한 사이언스 앱스토어 (Science Appstore) 프레임워크와 사용자 인증 및 파일 입/출력 서비스를 포함하는 가상화 컴퓨팅 자원/작업 관리 (Virtualized computing resources and job managements) 프레임워크에 대해 상세히 기술한다.

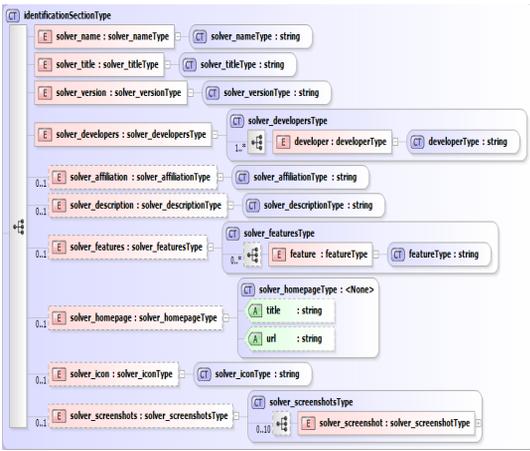
4. 사이언스 앱스토어 프레임워크

계산과학 시뮬레이션 환경을 제공함에 있어 중요한 사항은 사용자들에게 다양한 양질의 시뮬레이션 S/W

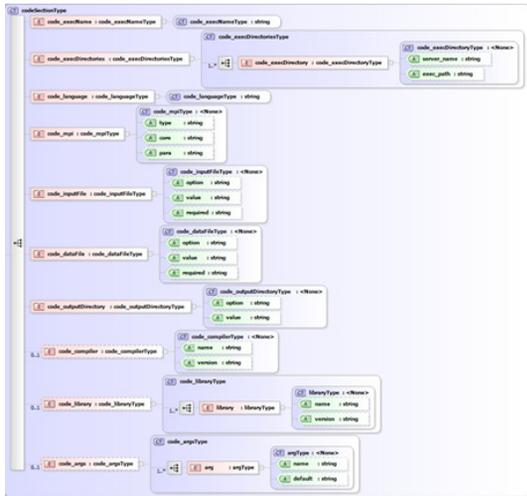
(즉, 최신 과학기술 연구 성과인 해석 도구, 또는 in-house 코드)를 제공하는 것이다. 사이언스 앱스토어 (Science Appstore)는 이러한 다분야의 최신 시뮬레이션 S/W들의 저장소이며, 사이언스 앱스토어 프레임워크는 인터넷상에서 시뮬레이션 S/W를 효과적으로 저장/관리하고, 대규모 컴퓨팅자원 기반의 시뮬레이션 수행환경 구성을 위한 인터페이스를 제공한다.

4.1 시뮬레이션 SW 메타정보 스키마

일반적으로 시뮬레이션 수행환경은 전처리기, 해석 코드, 가상화 프로그램, 계산 자원 및 작업관리기와 같은 다양한 컴포넌트들로 구성된다. 하지만, 현재까지는 이러한 컴포넌트들의 표준화된 스키마 및 인터페이스 규칙이 없기 때문에 응용분야에 독립적인 시뮬레이션 수행환경 구축이 쉽지 않다. 즉, 기존의 시뮬레이션 수행환경은 특정 해석 코드에 종속되어 한정된 응용분야만을 지원하는 경우가 대부분이다. 따라서, 본 논문에서는 계산과학 분야의 다양하고 상이한 해석 코드들을 최대한 수용할 수 있는 시뮬레이션 수행환경 구성을 위해서 필요한 메타정보 스키마를 아래와 같이 정의한다.



(그림 2) 식별정보(Identification Information)



(그림 3) 코드정보(Code Information)

첫째, 식별정보(Identification Information) (그림 2 참조)는 해석코드의 이름, 제목, 버전, 개발자, 기관, 설명, 특징, 홈페이지, 아이콘, 스크린 샷과 같은 해석코드를 식별할 수 있는 항목에 대한 정보를 포함한다.

둘째, 코드정보(Code Information) (그림 3 참조)는 해석코드의 개발언어, 컴파일러, 라이브러리, 병렬화 지원 여부, 실행파일 이름, 실행파일 설치 위치, 입력 파일 및 데이터파일 정보, 출력파일 위치, 실행 옵션 등과 같은 해석코드 설치 및 실행에 필요한 항목을 포함한다.

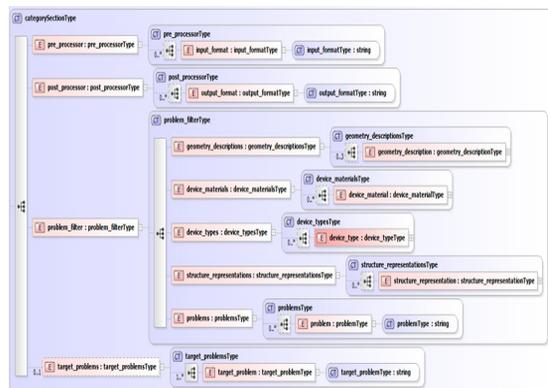
셋째, 파라미터 정보(Parameter Information) (그림 4 참조)는 해석코드에서 입력받는 파라미터들의 이름, 설명, 데이터 타입, 기본 값, 최소/최대 값, 반복여부, 파라미터 스위프(Sweep) 여부와 파일 이름, 파일 포맷 등과 같은 입력 파라미터에 관한 정보를 포함한다.

넷째, 카테고리 정보(Category Information) (그림 5 참조)는 해석코드의 다양한 타입별 카테고리, 전/후처리기 관련 정보 및 처리대상 문제(target problem)들에 관한 정보를 포함한다.

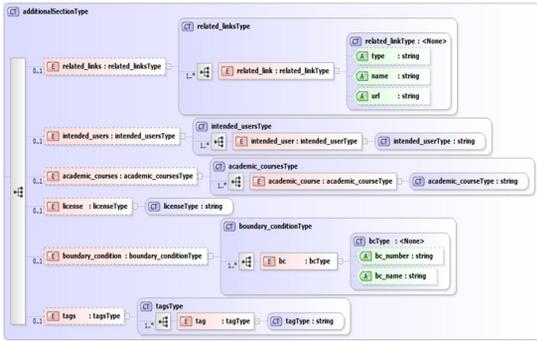
다섯째, 기타 정보(Additional Information) (그림 6 참조)에는 해석코드와 관련된 문서, 웹사이트, 논문, 멀티미디어 콘텐츠 등 참조자료에 대한 정보와 해석코드를 사용하는 대상 유저, 학과목, 라이선스 정보 등의 항목을 포함한다.



(그림 4) 파라미터 정보(Parameter Information)

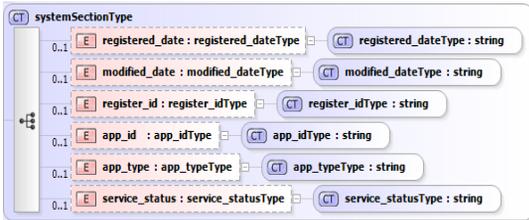


(그림 5) 카테고리 정보(Category Information)



(그림 6) 기타 정보(Additional Information)

마지막으로, 시스템 정보(System Information) (그림 7 참조)에는 해석코드의 등록일, 수정일, 등록자 아이디, 서비스 상태, 해석코드 아이디와 같은 시스템에서 해석코드를 관리하기 위한 정보를 포함한다.

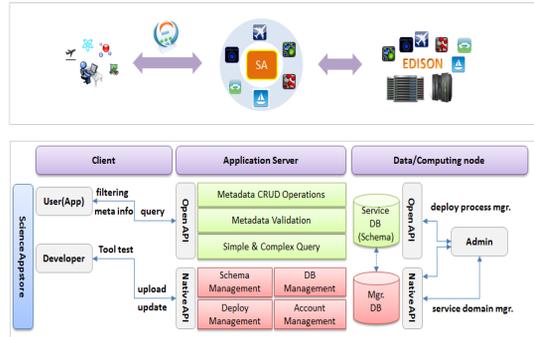


(그림 7) 시스템 정보(System Information)

4.2 시스템구조 및 API

시뮬레이션 S/W를 저장 및 관리하기 위한 사이언스 앱스토어 프레임워크의 구조는 (그림 8)과 같다. 사이언스 앱스토어 프레임워크는 해석코드의 메타정보 저장을 위한 NoSQL(Not only SQL) 기반의 메타정보 저장소와 메타정보의 등록/관리를 위한 API로 구성되어 있다.

메타정보 저장소는 시뮬레이션 컴포넌트들 간의 독립적이며 확장성 있는 상호연동을 위해 스키마 구조에 제약이 없고, 문서기반(Document-based)의 데이터 저장구조를 지원하는 MongoDB[13]를 사용하여 개발하였다. 그리고, 해석코드의 메타정보 등록/관리를 위한 API는 범용성을 고려하여 REST(Representational State Transfer) 인터페이스를 구현하였다.



(그림 8) 사이언스 앱스토어 프레임워크 구조

구현된 REST API는 해석코드 리스트를 읽어오는 함수, 특정 해석코드의 메타정보를 가져오는 함수, 해석코드 메타정보를 입력, 삭제, 수정하는 함수 및 특정 키워드 또는 조건으로 해석코드를 검색하는 함수를 제공한다. 전체 API 리스트는 (표 1)과 같다.

(표 1) 해석코드 메타정보를 위한 REST API

Solver	Constant
GET /solvers	GET /constants
GET /solvers/{id}	GET /constants/{key}
GET /solvers/{id}/{section}	POST /constants
GET /solvers/{id}/{section.field}	PUT /constants/{id}
POST /solvers	DELETE /constants/{id}
PUT /solvers/{id}	
DELETE /solvers/{id}	
	Query
	GET /solvers/query/{qry}
	POST /solvers/query

본장에서는 응용 분야에 독립적이며 확장성 있는 시뮬레이션 연구 환경 구축에 필요한 해석 코드 메타정보 스키마를 정의하였고, 해석코드 메타정보를 저장/관리하기 위한 NoSQL DB 기반의 저장구조와 이와 관련된 REST API를 간략히 설명하였다.

5. 가상화 컴퓨팅자원 및 작업 관리 프레임워크

대규모의 사용자에게 효율적인 시뮬레이션 실행 환

경을 제공하기 위해서는 사용자 인증 서비스, 시뮬레이션 수행과 관련된 데이터 입/출력 서비스 및 효과적인 물리/가상 컴퓨팅자원 관리/작업 관리 서비스가 반드시 필요하다. 본 장에서 설명할 가상화 컴퓨팅자원 및 작업 관리 프레임워크는 이러한 사용자 관리, 파일 입/출력 관리, 물리/가상 자원 및 작업 관리 서비스 등의 기능을 제공한다.

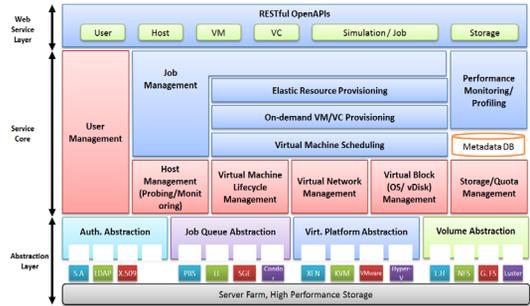
5.1 가상화 컴퓨팅자원/작업 관리 프레임워크 구조 및 기능

EDISON 플랫폼의 핵심 요소기술 중 하나인 가상화 컴퓨팅자원 및 작업 관리 프레임워크는 다음의 설계 원칙을 가지고 개발되었다.

- 성격이 상이한 여러 종류의 워크로드들을 수행하기 위해 가용한 자원을 효과적으로 이용할 수 있어야 한다.
- 계산과학 응용분야에 독립적 (neutral)이어야 한다.
- 다양한 종류의 가상화 환경 (Xen, KVM, VMWare 등)과 연동되어야 한다.
- 다양한 종류의 작업 관리자 (OpenPBS, LoadLeveler, Sun Grid Engine 등)와 연동되어야 한다.
- 웹 표준 기반의 인터페이스를 제공하여야 한다.
- 효율적, 안정적이어야 하며, 확장성 있는 구조를 가져야 한다.

(그림 9)는 가상화 컴퓨팅자원 및 작업 관리 프레임워크의 계층 구조를 보여준다. 크게 아래로부터 다양한 종류의 하부 환경 (인증/권한부여, 가상화, 작업 관리, 저장장치 관리자 등)에 대한 연동을 제공하기 위한 추상화 계층 (Abstraction Layer), 사용자 관리, 물리서버/가상서버 프로비저닝 (provisioning) 등의 자원 관리 및 작업 관리를 위한 핵심 계층 (Service Core) 그리고 웹 표준인 HTTP(S) 기반의 REST 인터페이스를 제공하는 웹 서비스 계층 (Web Service Layer)으로 구성되어 있다.

사용자 관리, 가상화 플랫폼 관리, 작업 관리 및 저장공간 관리를 위한 추상화 인터페이스를 설계하여, 기 구축된 인프라 환경과의 연동을 지원한다. 사용자



(그림 9) 가상화 컴퓨팅자원 및 작업 관리 프레임워크 계층 구조

관리 및 인증 추상화 계층으로는 로컬 데이터베이스와 LDAP (Light-weight Directory Access Protocol) 기반 플러그인을 제공하고, 가상화 플랫폼 연동에서는 Xen [16] 플러그인을 시범적으로 제공한다. 또한 작업 관리 및 저장공간 관리를 위한 플러그인으로 OpenPBS (Torque, [14]) 및 NFS를 각각 지원한다.

핵심 계층에서는 사용자(User), 물리서버(Host), 가상머신(Virtual Machine; VM), 가상네트워크(Virtual Network), 가상이미지(Virtual Image), 저장공간 (Storage), 시뮬레이션 작업(Job) 객체를 POJO(Plain Old Java Object) 형태로 Hibernate/HSQL를 사용하여 저장/관리하며, 실질적인 사용자 추가/삭제/인증, 물리서버 추가/삭제, 온-디맨드 가상머신/가상클러스터 프로비저닝 (provisioning) 및 작업 제출/모니터링 등의 기능을 수행한다.

가장 상위의 웹 서비스 계층은 사용자, 물리서버, 가상머신, 가상클러스터, 시뮬레이션/작업, 저장공간 각각에 대해 CRUD (Create-Retrieve-Update-Delete) 모델에 따른 REST 인터페이스를 제공하며, Spring Web MVC 프레임워크 [15]를 사용하여 개발하였다.

5.2 REST APIs

가상화 컴퓨팅자원 및 작업 관리 프레임워크에서 제공하는 REST 인터페이스는 다음과 같다.

5.2.1 사용자 관리 및 인증

시스템에서 미리 정한 시스템 관리자는 사용자를 등록/삭제할 수 있다. 이렇게 관리되는 일반 사용자는

login/logout 인터페이스를 이용하여 시스템 인증을 획득할 수 있으며, 인증 성공 시 제공되는 인증 토큰(token)을 사용하여 다른 서비스 API를 호출할 수 있다. 프레임워크 내부에서는 HTTP(S) BASIC 기반의 인증 메커니즘을 사용하여 사용자 인증 및 권한부여 기능을 제공하며, 관리자와 일반 사용자를 구분하여 접근 제어를 수행한다 (표 2 참조).

(표 2) 사용자 관리 및 인증 REST API

User
POST /api/user/login
GET /api/user/logout
GET /api/user/count
GET /api/user/list
GET /api/user/list?startIndex=[startIndex]&maxResults=[maxResults]
POST /api/user/register
GET /api/user/{userID}/info
PUT /api/user/{userID}
DELETE /api/user/{userID}

5.2.2 물리서버 관리

사용자 요청에 따른 시뮬레이션 작업을 실제 수행하기 위해서는 가상머신/가상클러스터가 프로비저닝되어 공유 풀 (shared pool)에 등록되어 있어야 한다. 이를 위해 가상머신/가상클러스터 구동될 물리서버에 대한 추가/삭제 기능을 제공한다 (표 3 참조). 일반 사용자는 물리서버 관리를 위한 API 접근이 불가능하며, 오직 허용된 관리자만이 해당 API를 사용할 수 있게끔 설계/개발되었다.

5.2.3 가상머신 프로비저닝 및 관리

관리자가 등록한 물리서버들에 가상머신/가상클러스터를 프로비저닝하기 위한 API이다. 관리자 및 일반사용자 모두 접근 가능하며, 프로세서 개수, 메모리 양 등을 기술하여 가상머신 프로비저닝을 요청할 수 있다. 또한 프로비저닝 받은 가상머신의 상세 정보를 열람할 수 있으며, 해당 가상머신의 소유자는 가상머신의 중지 (suspend)/재시작 (resume)을 요청할 수 있다 (표 4 참조).

(표 3) 물리서버 관리 REST API

Host
GET /api/host/count
GET /api/host/list
GET /api/host/list?startIndex=[startIndex]&maxResults=[maxResults]
POST /api/host/register
GET /api/host/{hostID}/info
DELETE /api/host/{userID}

(표 4) 가상머신 프로비저닝 및 관리 REST API

VM
POST /api/vm/count
GET /api/vm/list
GET /api/vm/list?startIndex=[startIndex]&maxResults=[maxResults]
POST /api/vm/provision
GET /api/vm/{vmID}/info
PUT /api/vm/{vmID}/suspend
PUT /api/vm/{vmID}/resume
PUT /api/vm/{vmID}/shutdown

5.2.4 파일 입/출력

일반적으로 시뮬레이션 작업의 수행은 다수개의 입력 데이터를 요구하며 또한 작업 수행 완료시 다수개의 결과 데이터를 양산한다. 따라서 사용자 별로 파일 입/출력을 위한 API를 다음과 같이 제공한다(표 5 참조).

(표 5) 파일 입/출력 REST API

Storage
POST /api/file/upload
POST /api/file/write?name=[fileName]
GET /api/file/download?id=[fileId]
GET /api/file/read?id=[fileId]

5.2.5 시뮬레이션 관리

시뮬레이션은 작업 집합을 포괄하는 가상 부모 개념의 개체이다. 시뮬레이션 관리 API를 사용하여 parameter study 작업 집합에 대한 관리를 수행할 수 있으며, 시뮬레이션 생성/정보열람/삭제/변경 등의 기능을 제공한다 (표 6 참조).

(표 6) 시뮬레이션 관리 REST API

Simulation
POST /api/simulation/count
GET /api/simulation/list
GET /api/simulation/list?userId=[userId]&startIndex=[startIndex]&maxResults=[maxResults]
POST /api/simulation/create
GET /api/simulation/{simUUID}/info
PUT /api/simulation/{simUUID}
DELETE /api/simulation/{simUUID}

(표 7) 작업 관리 REST API

Job
GET /api/simulation/{simUUID}/job/count
GET /api/simulation/{simUUID}/job/list
POST /api/simulation/{simUUID}/job/submit
GET /api/simulation/{simUUID}/job/{jobUUID}/status
PUT /api/simulation/{simUUID}/job/{jobUUID}/cancel
GET /api/job/{jobUUID}/input
GET /api/job/{jobUUID}/output?dir={dirName}
GET /api/job/{jobUUID}/download/zip

5.2.6 작업 관리

사용자는 가상 부모 개념의 시뮬레이션 개체를 생성한 후, 작업의 제출 및 관리 기능을 수행할 수 있다. 작업 제출은 작업제목, 작업타입 (sequential 또는 parallel), 실행하고자 하는 해석자 그리고 해석자에 대한 매개변수 등을 XML (또는 JSON)으로 기술하여 제출 (submit) API를 호출할 수 있다.

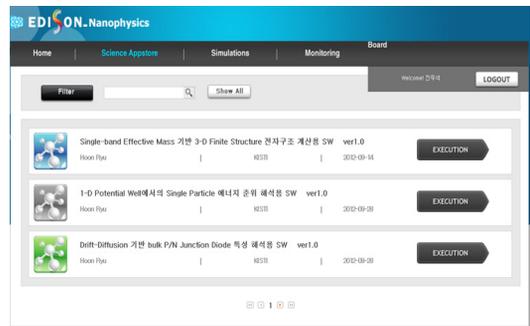
제출된 작업은 status/cancel API를 사용하여 상태를 모니터링 또는 실행 취소를 할 수 있으며, 작업 실행이 완료된 후, 작업 성공시에는 출력 결과 파일들에 대한 메타데이터를 확인할 수 있다 (표 7 참조).

6. 시범사례: EDISON 나노물리 서비스

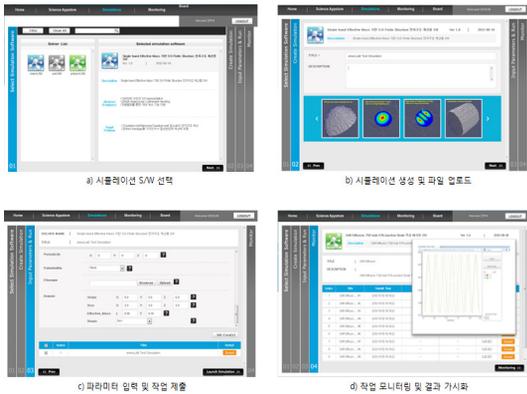
본 논문에서는 다분야의 최신 시뮬레이션 S/W들을 저장/관리하며, 대규모 컴퓨팅자원을 활용, 효율적인 시뮬레이션 실행 서비스를 제공하는 응용분야 독립적 (application-domain neutral)인 S/W 플랫폼 기술 연구에 대해 설명하였다. 특히, 본 논문에서 기술한 사이언스 앱스토어 및 가상화 컴퓨팅자원/작업 관리 프레임워크의 유용성 및 기능성을 평가하기 위해서 이를 활용한 나노물리(nano-physics) 분야의 웹기반 시뮬레이션 수행환경을 개발하였다. 구현된 나노물리 시범서비스에서는 (표 8)에 설명된 시뮬레이션 S/W 3종을 제공한다. 시뮬레이션 S/W가 탑재된 시범서비스의 웹 인터페이스는 (그림 10)과 같다.

(표 8) 나노물리 시뮬레이션 S/W 3종

시뮬레이션 S/W	특징
Single-band Effective Mass 기반 3D Finite Structure 전자구조 계산	3D/MPI
1D Potential Well에서의 Single Particle 에너지 준위 해석	Quantum Confinement 해석
Drift-Diffusion 기반 bulk P/N Junction Diode 특성 해석	self-consistent 계산



(그림 10) 나노물리 사이언스 앱스토어



(그림 11) 시뮬레이션 수행 과정

사이언스 앱스토어에 탑재된 S/W를 활용하여 나노 물리 분야의 문제해결을 위한 시뮬레이션 수행과정을 간략히 설명하면 다음과 같다 (그림 11 참조).

첫째, 사이언스 앱스토어 리스트 페이지에서 문제 필터 또는 키워드 검색을 통해 시뮬레이션에 사용하고자하는 해석코드 선택한다.

둘째, 선택된 해석코드를 이용한 시뮬레이션의 이름과 설명을 명시하고 만약 선택된 해석코드가 외부 입력 파일을 필요로 하는 경우에는 해당 파일을 업로드 한다.

셋째, 파라미터 입력 단계에서는 해석코드에 사용되는 각 변수의 단일 값 또는 다중 값(최소, 최대, 중간값)을 입력하여 계산하고자하는 작업 리스트를 생성한다. 사용자는 생성된 작업 리스트의 변수 값들을 최종 확인한 후에 수행하고자 하는 작업들을 시스템에 제출한다.

넷째, 모니터링 단계에서는 제출된 작업의 상태정보(Queued, Running, Success, Error)와 상세 파라미터 정보를 확인할 수 있다. 또한, 현재 대기상태(Queued) 또는 계산중(Running)상태인 작업은 중지(Cancel)시킬 수 있다. 작업이 성공(Success)적으로 완료된 경우에는, 결과 파일을 다운로드 받거나 본 시스템에서 제공하는 ID-Plot 또는 Paraview[17] 가시화 도구를 연동하여 계산결과를 확인해 볼 수 있다.

본장에서는 사이언스 앱스토어 및 가상화 컴퓨팅자원/작업 관리 프레임워크를 활용한 시범서비스 환경을 설명하였다. 특히, 본 시범서비스에 적용된 주요기술 및 전체적인 시스템은 나노물리 분야로 한정된 구조

가 아니라, 다른 분야에도 적용 가능하도록 응용 분야에 독립적인 구조로 설계하였다. 따라서, 계산과학 연구의 필요성이 높은 전산열유체, 화학, 전산설계와 같은 분야에서도 활용 가능할 것으로 예상된다.

7. 결 론

본 논문에서는 다분야 계산과학 시뮬레이션을 위한 EDISON 플랫폼 연구/개발 현황에 대해 기술하였다. EDISON 플랫폼에 대한 개략적인 개요와 더불어, 특히, 계산과학 응용분야 독립성을 확보하고 플랫폼의 범용적 활용을 위해 사이언스 앱스토어 프레임워크와 가상화 컴퓨팅자원/작업 관리 프레임워크에 대해 상세히 설명하였다. 또한 개발된 플랫폼 핵심 요소기술들을 나노물리(nano-physics) 분야의 웹기반 시뮬레이션 수행 환경에 시범 적용하였다.

EDISON 플랫폼은 전산열유체, 나노물리, 화학분야를 시작으로 단계적으로 구조동역학, 전산설계 분야로 확대 보급할 예정이다. 이러한 플랫폼 개발이 최신 과학기술 연구 성과와 이공계 교육의 유기적 융합 및 선순환 체계 구축이라는 관점에서 국가 과학기술경쟁력 성장 기틀 마련의 초석이 되기를 기대한다.

Acknowledgement

본 연구는 교육과학기술부 첨단 사이언스 교육 허브 개발 사업 (과제 No. 2011-0020576) 지원으로 수행되었습니다.

참 고 문 헌

- [1] Kai Hwang, Jack Dongarra, Geoffrey C. Fox, Distributed and Cloud Computing: From Parallel Processing to the Internet of Things, 2012
- [2] HubZero Platofrm, <http://hubzero.org/>
- [3] nanoHub, <http://nanohub.org>
- [4] Manufacturing Hub, <http://manufacturinghub.org>
- [5] NEES(Network for Earthquake Engineering Simulation), <http://nees.org/>

- [6] ICLCS(Institute for Chemistry Literary and Computational Science), <http://iclcs.illinois.edu>
- [7] ICEAGE (International Collaboration to Extend and Advance Grid Education), <http://www.iceage-eu.org/>
- [8] EDISON (EDucation-research Integration through Simulation On the Net), <http://www.edison.re.kr/>
- [9] eAIRS, <http://eairs.kisti.re.kr>
- [10] CLEERHUB (Collaboratoty for Engineering Education Research), <http://cleerhub.org/>
- [11] REST (Representational State Transfer)ful Interfaces, http://en.wikipedia.org/wiki/Representational_state_transfer
- [12] Liferay Portal Framework, <http://www.liferay.com/>
- [13] mongoDB, <http://www.mongodb.org>
- [14] Torque Resource Manager, <http://www.adaptivecomputing.com/products/open-source/torque/>
- [15] Spring Framework, <http://www.springsource.org/>
- [16] Paul Barham, Boris Dragovic, Keir Fraser, Steven Hand, Tim Harris, Alex Ho, Rolf Neugebauer, Ian Pratt, Andrew Warfield, Xen and the Art of Virtualization, Proceedings of the nineteenth ACM symposium on Operating systems principles (SOSP 2003), pp. 164-177
- [17] ParaView - Open Source Scientific Visualization, <http://www.paraview.org>

● 저 자 소 개 ●



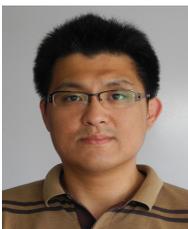
유 정 록

1999년 숭실대학교 컴퓨터학부 (학사)
2001년 한국과학기술원 전산학과 (석사)
2007년 한국과학기술원 전산학과 (박사)
2007년 3월~2010년 8월 삼성전자 DMC 연구소 책임연구원
2010년 9월~현재 한국과학기술정보연구원 슈퍼컴퓨팅센터 선임연구원
관심분야 : 고성능 컴퓨팅, 병렬처리, 클라우드 컴퓨팅, 가상화
E-Mail : junglok.yu@kisti.re.kr



진 두 석

1999년 2월 전북대학교 컴퓨터공학과 (학사)
2001년 2월 전북대학교 컴퓨터공학과 (석사)
2011년 8월 배재대학교 컴퓨터공학과 (박사)
2000년 12월~현재 : KISTI 선임연구원
E-Mail : dsjin@kisti.re.kr



류 훈

2003년 서울대학교 공과대학 전기공학부 (학사)
2005년 미국 Stanford대학교 전기공학과 (석사)
2011년 미국 Purdue대학교 전기공학과 (박사)
2005년~2011년 삼성전자 반도체총괄 근무
현재 한국과학기술정보연구원 슈퍼컴퓨팅센터 선임연구원
관심분야 : Nanoelectronics Modeling 및 TCAD 개발
E-Mail : elec1020@kisti.re.kr

● 저 자 소 개 ●



이 준 형

2010년 2월 경희대학교 컴퓨터공학 졸업 (공학사)
2012년 2월 경희대학교 컴퓨터공학 졸업 (공학석사)
2011년 12월~현재 한국과학기술정보연구원 슈퍼컴퓨팅센터 연구원
E-Mail : junhyung@kisti.re.kr



이 종 속

2001년 University of Canterbury (New Zealand) 컴퓨터공학 (박사)
1992년~1993년 ETRI 연구원
1999년~2002년 Univ. of Canterbury (New Zealand) 연구원
2002년~현재 KISTI 슈퍼컴퓨팅센터 책임연구원
2004년~현재 인터넷정보학회논문지 편집위원
2005년~현재 과학기술대학원대학교(UST) 교수 (겸임)
관심분야 : 컴퓨터 시뮬레이션 기반 사이버 러닝, 그리드 및 분산컴퓨팅, 컴퓨터 네트워크 및 트래픽 모델링
E-Mail : jsruthlee@kisti.re.kr



조 금 원

2000년 한국과학기술원 기계공학(항공우주) (박사)
2001년~현재 한국과학기술정보연구원 슈퍼컴퓨팅센터책임연구원, 차세대연구환경개발실장
2011년~현재 첨단 사이언스 교육·허브 개발사업(EDISON) 중앙센터장
E-Mail : ckw@kisti.re.kr