http://dx.doi.org/10.5392/JKCA.2016.16.12.001

# 전산유체역학 응용에서의 효율적인 최적 2차 변수 계산 경로 추정 기법

## An Efficient Method for Estimating Optimal Path of Secondary Variable Calculation on CFD Applications

**이중연, 김민아, 허영주**
한국과학기술정보연구원 가시화기술개발실

Joong-Youn Lee(jylee@kisti.re.kr), Min Ah Kim(petimina@kisti.re.kr),
Youngju Hur(popea@kisti.re.kr)

**요약**

전산유체역학은 유체현상을 기술하는 미분방정식의 근사해를 컴퓨터를 이용하여 풀고 해석하는 학문으로, 다양한 종류의 변수의 계산을 필요로 한다. 대용량의 유동해석 데이터의 경우, 스토리지의 제약으로 계산한 변수들 중 필수적인 변수만을 저장하고, 데이터 분석 시점에 필요한 2차 변수를 계산하는 경우가 많다. 본 논문에서는 전산유체역학 응용에서 많이 사용하는 2차 변수의 종류를 정리하고, 임의의 초기 변수가 주어졌을 때 최적의 2차 변수 계산 경로를 효율적으로 추정하기 위한 방법으로 2차 변수 종속 그래프를 일반적인 유향 그래프로 변환하는 기법과 이를 이용한 최단 경로 탐색 기법을 소개한다. 또한 제안하는 기법을 실제 데이터 분석 및 가시화 도구에 적용하여 효용성을 측정하였다.

■ 중심어 : | 전산유체역학 | 2차 변수 계산 | 최적 경로 문제 | 과학기술정보 콘텐츠 |

**Abstract**

Computational Fluid Dynamics(CFD) is a branch of fluid mechanics that solves partial differential equations which represent fluid flows by a set of algebraic equations using computers. Even though it requires multifarious variables, only selected ones are stored because of the lack of storage capacity. It causes the requirement of secondary variable calculations at analyzing time. In this paper, we suggest an efficient method to estimate optimal calculation paths for secondary variables. First, we suggest a converting technique from a dependency graph to a ordinary directed graph. We also suggest a technique to find the shortest path from any initial variables to target variables. We applied our method to a tool for data analysis and visualization to evaluate the efficiency of the proposed method.

■ keyword : | Computational Fluid Dynamics | Secondary Variable Calculation | Optimal Path Problem | Science Technology Contents |

* 본 연구는 2016년 정부(미래창조과학부)의 재원으로 국가과학기술연구회 민군융합기술연구사업(No. CMP-16-03-KISTI)과 한국과학기술정보연구원 초고성능컴퓨팅 계산과학공학 연구 및 선도기술 개발 사업의 지원을 받아 수행된 연구입니다.

접수일자 : 2016년 09월 30일
수정일자 : 2016년 12월 05일
심사완료일 : 2016년 12월 05일
교신저자 : 이중연, e-mail : jylee@kisti.re.kr

# I. 서 론

전산유체역학(Computational Fluid Dynamics, 이상 CFD)은 유체 현상을 모사한 비선형 편미분 방정식인 나비에-스토크스 방정식 (Navier-Stokes Equation)을 컴퓨터로 풀 수 있는 대수 방정식으로 변환하고, 이를 수치 기법(numerical method)의 알고리즘을 사용하여 유동문제를 풀고 해석하는 학문으로, 많은 공학자들이 자동차나 항공기 등의 효율적인 설계 및 해석에 활용하고 있다. CFD 계산 결과는 과학기술정보 콘텐츠의 일종으로, 속도(velocity), 압력(pressure), 밀도(density) 등의 다양한 변수들이 2~3차원 배열(array) 형태로 저장되는데, 이러한 변수들 간에는 물리 법칙에 따른 상호관계가 있어서 이를 통해 새로운 변수를 계산할 수 있다. CFD 솔버에서는 다양한 변수의 생성이 가능하지만, 모든 변수를 계산하여 저장하기에는 시간이 너무 오래 걸리거나 저장 공간을 많이 필요로 하는 문제가 있다. 따라서 필수적인 주요 변수들(primary variables)만 저장하고, 2차적인 변수들(secondary variables)은 이후에 후처리 분석 시간에 재계산하는 경우가 많다. 주어진 초기 변수들을 이용해서 임의의 2차 변수를 유도하는 방법은 물리 변수들의 상관관계가 복잡하기 때문에 다양한 방법이 있을 수 있는데, 이 중에서 계산량이 가장 적은 최적의 방법을 찾는 것은 어려운 문제이다. 특히, 거대 용량의 CFD 데이터에서 2차 변수를 계산하는 것은 방대한 데이터의 용량으로 인해 오랜 시간이 걸리기 때문에 가장 계산량이 적은 최적의 2차 변수 생성 방법을 찾는 것은 매우 중요한 문제이다. 이러한 문제로 과거에 장시간의 CPU 시간을 사용해서 계산한 대용량 CFD 과학기술 콘텐츠들의 후처리 분석에 많은 어려움이 있어왔다.

이를 위해 다양한 후처리 분석 도구들이 제안되었다. Ensight는 CEI사에서 개발한 CFD 전용 데이터 분석 도구로써, 다양한 2차 변수의 계산을 지원한다[1]. 그러나 2차 변수를 계산하기 위해 각 함수마다 필요한 변수 설정을 매번 수작업으로 입력해야 하는 불편함이 있다. 또 다른 데이터 분석 도구인 Tecplot 역시 다양한 2차 변수 계산 기능을 제공한다[2]. Tecplot에서는 선택된 CFD 변수에 대한 함수식을 미리 설정, 제공해서 CFD 초심자도 쉽게 사용할 수 있도록 했다. 그러나 각 변수마다 단 하나의 함수만을 제공할 뿐만 아니라, 계산에 필요한 변수가 저장되어 있지 않을 경우 자동으로 필요한 변수를 계산해주지 못하는 문제가 있다. 또한 Ensight, Tecplot 모두 저장된 여러 주요 변수들을 이용해서 원하는 2차 변수를 계산하기 위한 최단 경로를 찾아주는 기능은 제공하지 못한다.

본 논문에서는 대용량의 유동해석 데이터에 대해 빠르게 2차 변수를 계산하기 위한 최적 2차 변수 계산경로 추정기법을 소개하고자 한다. 본 논문의 구성은 다음과 같다. 2장에서는 CFD 응용에서의 2차 변수 및 변수 간의 상관관계를 통해 구성한 종속 그래프에 대해 설명하고 3장에서는 가용한 변수들로부터 목표 변수를 계산하기 위한 최단 경로를 찾는 방법을 소개한다. 4장에서는 제안한 기법에 대한 구현 및 실험 결과를 논하고, 마지막으로 5장에서 논문의 결론을 맺는다.

# II. 2차 변수와 종속 그래프

## 1. 2차 변수 종속 그래프

2차 변수는 1차적으로 유동해석 솔버(solver)에서 생성한 유동 데이터로부터 수학 및 통계 연산을 이용해서 새롭게 계산하는 변수를 뜻한다. 넓은 의미에서 2차 변수는 원 데이터를 통해서 생성 가능한 모든 종류의 변수를 지칭할 수 있지만 본 논문에서는 유체역학의 물리 법칙에 기반하여 계산이 가능한 변수로 한정한다. 또한 본 논문에서는 변수의 종류와 관계없이 유동해석 솔버에서 생성한 변수를 초기(1차) 변수, 새롭게 계산하는 변수를 2차 변수라고 칭한다.

[표 1]은 본 논문에서 다루고자 하는 2차 변수들인데, 각 변수들은 다른 변수들로부터 유도가 가능하다. 한 변수를 계산하기 위해서는 여러 종류의 다른 변수들이 필요한데, 변수 $a$를 계산하는데 변수 $b$와 $c$가 필요하다면 변수 $a$는 변수 $b$와 $c$에 종속된다고 할 수 있다. 본 논문에서는 이를 식 (1)과 같이 표기한다.

$$< b, c > \rightarrow a \qquad (1)$$

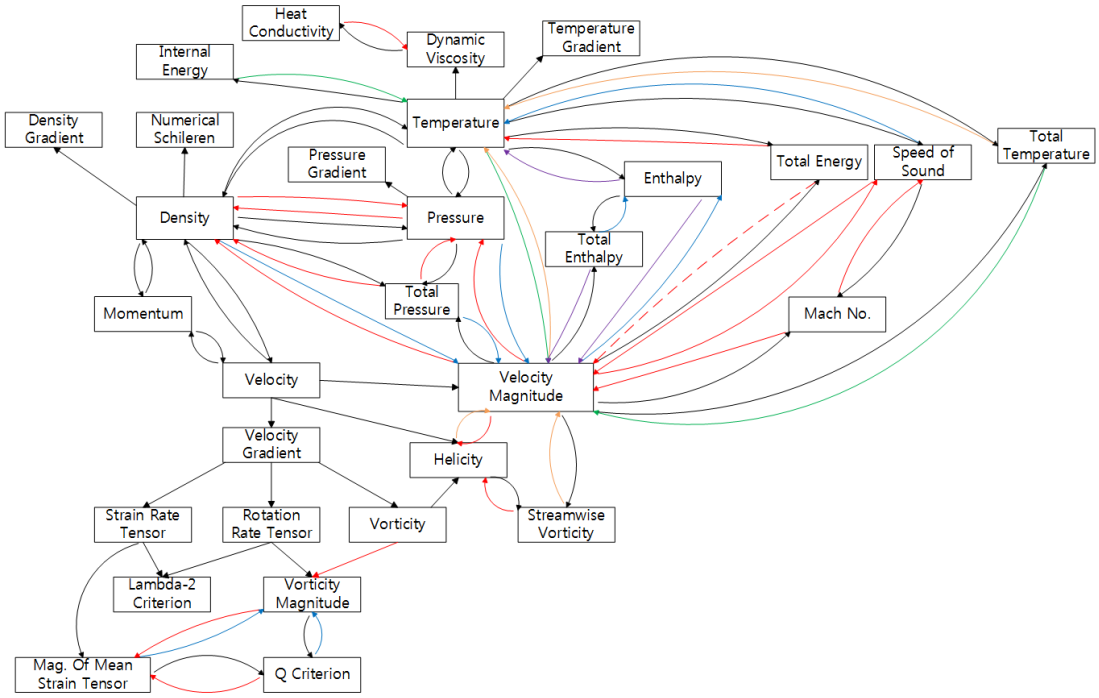



그림 1. 2차 변수 종속 그래프

즉, 한 변수에 대해 각 종속 조건을 구성하는 변수들의 조합을 < > 부호를 이용해서 표기한다. Pressure($p$)와 density($\rho$), temperature($T$)의 경우와 같이 특정 변수들은 상호 종속관계에 있을 수 있다($p=\rho RT$, $\rho = RT/p$, $R$은 ideal gas constant).

Velocity magnitude($|V|$)나 temperature와 같이 다양한 변수들과 종속관계인 변수들도 존재하는데, velocity magnitude의 경우 velocity vector($V$)로부터 계산이 가능함과 동시에, Mach number($Mach$)와 speed of sound($a$)로 부터도 계산이 가능하다.

$$< V > \rightarrow |V|, \ < Mach, a > \rightarrow |V| \qquad (2)$$

[그림 1]은 변수들 간의 종속관계를 도식화한 종속 그래프이다. 그래프 상의 정점(vertex)은 변수, 정점을 연결하는 간선(edge)은 각 변수간의 종속관계를 나타낸다. 한 정점을 기준으로 화살표의 방향이 들어오는 간선은 진입 간선(incoming edge), 나가는 간선은 진출 간선(outgoing edge)인데, 각 정점은 진입 간선으로 연결된 정점에 종속되고, 진출 간선으로 연결된 정점을 부속한다. 즉, 2차 변수 종속 그래프가 그래프 $G=(V, E)$라고 할 때, 간선 $\{u, v\} \in E$, $(u, v \in V)$는 종속 관계에 있는 두 정점 $u$와 $v$을 연결한다. 간선 $\{u, v\}$는 정점 $v$가 $u$에 종속적이라는 의미이고, 그래프 상에서 정점 $u$로부터 $v$ 방향으로의 화살표가 그려진다.

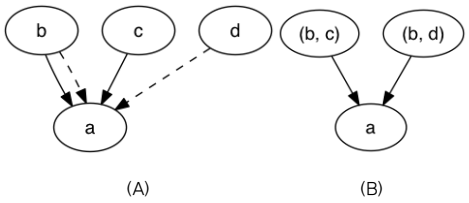



그림 2. (A) 종속 그래프의 예 (B) 변환된 유향 그래프

2차 변수 종속 그래프는 그래프 이론에서 봤을 때, 각 정점의 입력 차수(in-degree)와 출력 차수(out-degree)가 복수일 수 있고, 순환(cycle)이 존재할 수 있을 뿐만 아니라, 두 정점 사이에 두 개 이상의 간선이 존재할 수

있는 유향 다중그래프(directed multigraph)이다. 어떤 변수 $a$가 수식 (3)와 같이 다중 종속관계라면 [그림 2(A)]와 같은 종속 그래프가 생성된다. 정점 $a$는 정점 $b$와 두 개 이상의 간선으로 연결되므로 다중그래프이다.

$$< b, c > \rightarrow a, \ < b, d > \rightarrow a \quad (3)$$

각 정점에 연결된 여러 간선들은 서로 다른 종속관계에 속할 수 있기 때문에, 각 간선의 종속 관계를 서로 구분하기 위해 본 논문에서는 속하는 종속관계에 따라 간선의 색깔과 모양을 다르게 하였다[그림 1]. 예를 들어 velocity magnitude의 경우 velocity vector와는 검은 실선의 진입 간선으로 연결되어, velocity vector 단일 변수에 종속적인 반면, Mach number와 speed of sound와는 모두 붉은 실선의 진입 간선으로 연결되어 Mach number와 speed of sound의 조합에 종속적이 된다. 본 논문에서는 임의의 변수 $a$의 모든 종속 조건의 집합을 $D(a)$로 표기한다. $D(a)$ 내부에는 동일한 종속 조건이 존재할 수 없다. 예를 들어 [그림 2(A)]와 같이 변수 $a$가 변수 $b$, $c$의 조합 또는 $b$, $d$의 조합에 종속적이라면 $D(a) = \{<b, c>, <b, d>\}$이고, 간선의 집합 $E$에는 $\{b, a\}$, $\{c, a\}$, $\{b, a\}$, $\{d, a\}$가 포함된다. 본 논문에서는 임의의 초기 변수의 집합이 주어졌을 때, 특정 목표 변수를 생성하기 위한 가장 빠른 경로가 무엇인지 찾는 문제를 제안한 종속 그래프에서의 최단 거리를 찾는 문제로 치환하여 해결하고자 한다. 주어진 종속 그래프 상에서 임의의 초기 정점들이 주어졌을 때, 목표 변수까지의 최단 거리가 무엇인지를 찾는 것이다. 그런데, 2차 변수 종속 그래프는 다른 일반적인 그래프와는 달리, 보행(walk)을 할 때 각 정점에 종속 조건을 구성하는 모든 간선들로부터 입력이 들어와야 진출 간선을 통해 출력이 가능하다. 이러한 추가적인 제약 조건으로 인해 이 그래프에서 주어진 초기 변수들을 이용하여 목표 변수를 계산하기 위한 최단 경로를 구하는 문제는 매우 복잡해진다. 일반적으로 이러한 문제를 해결하기 위해서 위상 정렬 기법을 많이 사용한다[3]. 그러나 위상 정렬은 본 논문에서 다루고자하는 종속 그래프와 같이 고리를 포함하는 경우는 처리가 불가능한 문제가 있다. 본 논문에서는 이러한 문제를 해결하기 위한 방법을 제안한다.

### 2. 변수 계산 비용의 추정

[표 1]과 같이 각 변수의 계산식은 서로 달라서 계산 비용에 상당한 차이가 있다. 즉, 종속 그래프 상의 간선의 비용이 서로 다른 것이다. 이러한 비용의 차이를 고려하지 않고 찾은 최단 거리는 최적 경로라고 할 수 없다. 본 논문에서는 각 계산식의 비용을 추정하고, 종속 그래프 상의 간선에 가중치로 반영하여 보다 엄밀하게 최적 경로를 구하고자 한다. 이때, 실제 계산 비용은 계산식 구현 방법이나 변수의 정밀도, 또는 구현하는 하드웨어와 사용하는 연산 기법에 따라 다르기 때문에 비용을 정확하게 추정하기는 쉽지 않다. 이를 위해 본 논문에서는 변수의 계산을 위한 기본 연산과 해당 연산을 처리하기 위한 비용을 제안하고, 각 변수의 계산식을 기본 연산으로 나누어 각 변수의 계산 비용을 추정하고자 한다. [표 2]는 본 논문에서 사용하는 기본 연산의 종류와 연산별 계산 비용이고, [표 3]은 각 변수의 계산 비용의 추정치이다. 각 변수의 계산 방법은 본 논문에서 제시한 방법보다 더욱 많기 때문에 실제 계산 비용은 계산 경로에 따라 달라질 수 있음을 밝힌다. [표 2]의 연산별 계산 비용은 계산 하드웨어에 따라 달라질 수 밖에 없기 때문에 본 논문에서는 [4-8]을 참고하여 휴리스틱하게 추정하였다. 특히, 고유값(eigen value) 계산의 경우 3×3 행렬에 대해 행렬식(determinant)를 구하는 방법과 3차 방정식을 푸는 방법으로 나누어 추정하였다. 이러한 계산 비용의 차이를 각 간선에 가중치 형태로 반영하게 되면 이 그래프는 가중 그래프(weighted graph)가 된다. 그래프의 각 간선의 가중치는 해당 계산의 비용으로 한다.

## III. 2차 변수 생성 경로 탐색

종속 그래프에서 주어진 초기 변수로부터 목표 변수까지의 최단 거리를 구하는 문제를 해결하기 위해 본 논문에서는 2차 변수 종속 그래프를 일반적인 유향 그래프(directed graph)로 변환하여 문제를 간단하게 한 뒤, 최단 경로를 구하고자 한다.

표 1. 전산유체역학 변수 간 관계식 ($R$ : Ideal Gas Constant, $\gamma$ : ratio of specific heats, $C_V$ : constant volume specific heats, $C_P$ : constant pressure specific heats, $\mu_\infty$ : free stream eddy viscosity, $T_\infty$ : free stream temperature, $\mu$ : dynamic viscosity, $\mathrm{Pr}$ : Prandtl number)

| Variable | Name | Relation |
|---|---|---|
| $p$ | pressure | $\rho R T$ |
| $\rho$ | density | $p/RT$ |
| $T$ | temperature | $p/\rho R$ or $a^2/\gamma R$ |
| $V$ | velocity vector | $M/\rho$ |
| $M$ | momentum vector | $\rho V$ |
| $\lvert V\rvert$ | velocity magnitude | $\sqrt{V_x^2+V_y^2+V_z^2}$ |
| $a$ | speed of sound | $\sqrt{\gamma RT}$ |
| *Mach* | Mach number | $\lvert V\rvert/a$ |
| $\nabla V$ | velocity gradient | $\nabla V$ |
| $\mathrm{div}\ V$ | velocity divergence | $\nabla\cdot V$ |
| $E$ | internal energy | $C_V T$ |
| $h$ | enthalpy | $C_V T+p/\rho$ or $C_P T$ |
| $p_O$ | total pressure | $p+\rho\lvert V\rvert^2/2$ |
| $T_O$ | total temperature | $T+\lvert V\rvert^2/2C_p$ |
| $H_O$ | total enthalpy | $h+\lvert V\rvert^2/2$ |
| $E_0$ | total energy | $C_V T+V^2/2$ |
| $\mu$ | dynamic viscosity | $\mu_\infty \frac{T_\infty+110.4}{T+110.4}\left(\frac{T}{T_\infty}\right)^{\frac{3}{2}}$ |
| $\kappa$ | heat conductivity | $\mu C_P/\mathrm{Pr}$ |
| $\Omega_{ij}$ | rotation rate tensor | $\frac{1}{2}\left(\frac{\partial V_i}{\partial x_j}-\frac{\partial V_j}{\partial x_i}\right)$ |
| $\zeta_i$ | vorticity vector | $\left(\frac{\partial V_j}{\partial x_k}-\frac{\partial V_k}{\partial x_j}\right)=\nabla\times\vec{V}$ |
| $\lvert\Omega\rvert$ | vorticity magnitude | $\sqrt{2\Omega_{ij}\Omega_{ij}}=\lvert\zeta\rvert$ |
| $S_{ij}$ | strain rate tensor | $\frac{1}{2}\left(\frac{\partial V_i}{\partial x_j}+\frac{\partial V_j}{\partial x_i}\right)$ |
| $\lvert S\rvert$ | strain rate magnitude | $\sqrt{2S_{ij}S_{ij}}$ |
| $Q$ | Q criterion | $\lvert\Omega\rvert^2-\lvert S\rvert^2$ |
| $\lambda_2$ | $\lambda_2$ criterion | second largest eigenvalue of $S_{ij}S_{jk}+\Omega_{ij}\Omega_{jk}$ |
| $H$ | helicity | $\zeta\cdot V$ |
| $\Omega_S$ | streamwise vorticity | $H/\lvert V\rvert$ |
| $\nabla p$ | pressure gradient | $\nabla p$ |
| $\nabla T$ | temperature gradient | $\nabla T$ |
| $\nabla\rho$ | density gradient | $\nabla\rho$ |
| $\nabla^2\rho$ | numerical Schlieren | $\nabla^2\rho$ |

표 2. 기본 연산의 계산 비용 추정치

| 기본 연산 | 계산 비용 | 비고 |
|---|---|---|
| +/- | 1 | |
| multiplication | 4 | |
| division | 10 | |
| inner product | 15 | 3 mult, 3 +/- |
| cross product | 42 | 9 mult, 6 +/- |
| gradient | 45 | 9 mult, 9 +/- |
| sin, cos tan | 60 | |
| asin, acos, atan | 80 | |
| pow | 100 | |
| sqrt | 100 | 5*(1 div, 2 mult, 2 +/-) |
| tensor magnitude | 146 | 1 sqrt, 10 mult, 8 +/- |
| eigen value | 864 | 4 sqrt, 1 acos, 3 cos, 9 div, 25 mult, 14 +/- |

## 1. 2차 변수 종속 그래프의 변환

2차 변수 종속 그래프에서의 최단 경로 문제를 일반적인 유향 그래프에서의 최단 경로 문제로 변환하기 위해, 2차 변수 종속 그래프 $G$=($V$ , $E$)로부터 각 변수와 변수들의 모든 종속 조건들을 정점으로 하는 새로운 그래프 $G'$=($V'$, $E'$)을 생성한다. 즉, [그림 2(A)]와 같이 $a$라는 변수가 $b$와 $c$의 쌍에 종속적이라면, 변수 $a$와 함께 $b$, $c$의 쌍을 별도의 정점 ($b$, $c$)로 생성하여 $V'$에 삽입하고, 두 정점을 잇는 새로운 간선 {($b$, $c$), $a$}를 $E'$에 추가한다[그림 2(B)].

이때, $(b,c)\rightarrow a$를 만족하는 계산의 비용을 [표 1]과 [표 3]에서 찾아 해당 간선의 가중치로 반영한다. 예를 들어 변수 $p$(pressure)는 $T$(temperature)와 $\rho$(density)의 조합에 종속적인데, 이러한 경우 $p$를 계산하기 위한 계산 비용 12를 간선 $\{(T,\rho),p\}$에 할당하는 것이다.

이러한 정점 및 간선 추가 작업은 각 종속 조건의 종속 조건들에 대해서도 재귀적으로 수행되어야 한다. $G'$에 정점 ($b$, $c$)가 추가되었다면 정점 ($b$, $c$)를 생성하기 위한 새로운 종속 조건의 집합 $D$($b$, $c$)의 원소들이 새로운 정점으로 추가 되어야 하는 것이다. 즉, $V'$에 새롭게 추가되는 모든 정점 $v$에 대해, $u\in D(v)$인 모든 $u$가 $V'$에 추가되어야 하고, 이로 인해 생성 가능한 모든 간선 ($v$, $u$)가 $E'$에 추가되어야 한다. 새롭게 생성되는 정점의 종속 조건 집합은 해당 정점을 구성하는 변수들의 종속 조건 집합들의 곱집합으로 구성된다. 예를 들어 $D$($b$) = {<$d$>, <$e$, $f$>}이고, $D$($c$) = {<$g$>, <$h$>}라면,

표 3. 각 변수 계산식의 계산 비용 추정

| 변수 | 계산비용 | 기본 연산 |
|---|---|---|
| $p$ | 12 | 3 mult |
| $\rho$ | 18 | 2 mult, 1 div |
| $T$ | 18 | 2 mult, 1 div |
| | 22 | 3 mult, 1 div |
| $V$ | 10 | 1 div |
| $M$ | 10 | 1 div |
| $\|V\|$ | 115 | 1 sqrt, 3 mult, 3 +/- |
| $a$ | 108 | 1 sqrt, 2 mult |
| $Mach$ | 10 | 1 div |
| $\nabla V$ | 45 | 1 gradient |
| $\mathrm{div}\ V$ | 60 | 1 gradient, 1 inner product |
| $E$ | 4 | 1 mult |
| $h$ | 15 | 1 mult, 1 div, 1 +/- |
| | 4 | 1 mult |
| $p_O$ | 13 | 3 mult, 1 +/- |
| $T_O$ | 13 | 3 mult, 1 +/- |
| $H_O$ | 9 | 2 mult, 1 +/- |
| $E_0$ | 13 | 3 mult, 1 +/- |
| $\mu$ | 126 | 1 pow, 1 mult, 2 div, 2 +/- |
| $\kappa$ | 14 | 1 mult, 1 div |
| $\Omega_{ij}$ | 45 | 9 mult, 9 +/- |
| $\zeta_i$ | 9 | 9 +/- |
| | 87 | 1 grad, 1 cross product |
| $\|\Omega\|$ | 146 | 1 tensor magnitude |
| | 115 | 1 sqrt, 3 mult, 3 +/- |
| $S_{ij}$ | 45 | 9 mult, 9 +/- |
| $\|S\|$ | 146 | 1 tensor magnitude |
| $Q$ | 9 | 2 mult, 1 +/- |
| $\lambda_2$ | 954 | 1 eigen value, 18 mult, 18 +/- |
| $H$ | 15 | 1 inner product |
| $\Omega_S$ | 10 | 1 div |
| $\nabla p$ | 45 | 1 gradient |
| $\nabla T$ | 45 | 1 gradient |
| $\nabla \rho$ | 45 | 1 gradient |
| $\nabla^2 \rho$ | 90 | 2 gradient |

```
G=(V, E) : Directed multigraph
G'=(V', E') : Directed graph
Q : List of vertices to process
Q ← V
for each v in Q do
   for each condition in D(v) do
      u = CreateVertex(condition)
      if u ∉ V' do
         G'.InsertVertex(u)
         Q ← u
      if (u, v) ∉ E'  do
         G'.InsertEdge(u, v)
```

그림 3. 종속 그래프 - 유향 그래프 변환 알고리즘

$D(b, c)$ = {<$d$, $g$>, <$d$, $h$>, <$e$, $f$, $g$>, <$e$, $f$, $h$>}이다. 이러한 재귀적인 정점 추가 작업은 더 이상 추가할 정점이 존재하지 않을 때 멈춘다. [그림 3]은 새로운 유향 그래프를 생성하는 알고리즘의 의사 코드이다.

## 2. 2차 변수 생성을 위한 최단 경로 탐색

앞 장에서 변환한 그래프는 일반적인 유향 그래프이고, 각 간선의 가중치가 음수를 가지지 않으므로 일반적인 최단 경로를 푸는 알고리즘을 이용해서 모든 정점 간의 최단 경로를 구하는 것이 가능하다. 본 논문에서는 잘 알려진 최단 경로 알고리즘들 중 다익스트라(Dijkstra) 알고리즘을 이용해서 각 목표 변수와 초기 변수로 생성 가능한 조합 간의 최단 경로를 구하고자 한다[9]. 다익스트라 알고리즘은 그래프 상의 각 정점들 중 주어진 한 정점과 다른 정점들 간의 최단 경로를 구한다. 종속 그래프에서 목표 정점에 도달 가능한 가장 적은 비용의 초기 변수 정점의 조합을 구하는 문제는 변환한 유향 그래프 상에서 목표 변수의 정점과 초기 변수로 생성 가능한 정점들 중 최단 거리를 가지는 경로를 구하는 문제와 동일하다. 변환한 그래프 $G'$은 초기 변수의 조합에서 목표 변수로 가는 유향 그래프인데, 본 논문에서는 다익스트라 알고리즘을 효과적으로 적용시키기 위해 $G'$의 모든 간선의 방향을 반대로 바꾸는 새로운 그래프 $G''$에 대해 다익스트라 알고리즘을 적용한다. 즉, 목표 변수 정점에서 초기 변수의 조합 정점들 간의 경로 중 최단 거리를 가지는 경로를 구하는 것이다.

# IV. 실험 결과

제안한 알고리즘을 리눅스 환경에서 C++를 이용해서 구현하였고, 듀얼 Intel Xeon E5-2620V3, 128GB 메모리 환경에서 실험하였다. 모두 1억개의 격자에 모두 7개의 초기 변수를 가진 대용량 로터 동역학 데이터[10]를 활용했는데, 이 CFD 콘텐츠는 분석을 위해 [표 1]의 다양한 2차 변수의 생성이 필수적이다. 그러나 총 1TB의 대용량으로 인해 2차 변수 생성에 많은 시간이 필요

한 문제가 있다. [표 4]는 실험에 사용한 로터 동역학 데이터에 저장된 변수의 목록이고 [그림 5]는 가시화 결과이다. 우선, 본 논문에서 제안한 총 31종의 물리변수에 대해 종속그래프를 생성한 뒤 이를 일반적인 유향 그래프로 변환하였다. 31종의 모든 물리 변수에 대해 적용할 경우, 단일 CPU 코어를 사용하면 너무 오랜 시간이 걸리기 때문에 본 논문에서는 총 24개의 CPU 코어를 사용해서 병렬화했으며, 그럼에도 불구하고 그래프를 변환하는데 49시간이 필요했다. 이론적으로 k개의 변수에 대해서 조합 가능한 모든 종속 관계의 개수는 $\sum_{n=1}^{k} {}_{k}C_{n}$으로, 본 논문에서와 같이 31종의 변수를 사용할 경우 약 21억개이다. PC 환경에서 다익스트라 알고리즘을 적용하기에는 정점의 개수가 매우 많음을 알 수 있다. 그러나 본 논문에서 제안한 종속 조건을 반영하여 계산한 결과, 약 450만개의 정점만이 생성되었는데 이는 PC 환경에서도 충분히 다익스트라 알고리즘의 적용이 가능한 수치이다.

**표 4.로터 동역학 데이터의 변수 정보**

| Name | Dimension | Type |
|---|---|---|
| Density | 1D | double |
| Pressure | 1D | double |
| Velocity vector | 3D | double |
| Vorticity magnitude | 1D | double |
| Q criterion | 1D | double |
| Momentum | 3D | double |
| Velocity Gradient | 9D | double |

생성된 종속 그래프를 이용해서 초기 변수들 및 목표 변수가 주어졌을 때, 초기 변수들에서 목표 변수까지의 최단 경로를 찾는 시간은 물론, 실제 2차 변수 계산 시간을 측정하는 실험을 수행했다. 이는 본 논문에서 제안한 계산량 추정 기법이 실제 최적 경로 예측에 얼마나 도움이 되었는지를 확인하기 위함이다. 총 64 노드의 클러스터 시스템에서 실험했으며, GLOVE 분산/병렬 가시화 프레임워크에 기능을 탑재했다[11]. 종속 다중그래프에서 유향 그래프를 생성하는 시간은 초기에 한번만 실행하면 그 이후에는 읽어서 사용할 수 있기 때문에 계산시간에 포함하지는 않았다.

계산 비용을 고려하지 않은 최단 경로 탐색 방법과

**표 5. 실험 환경**

| | |
|---|---|
| 노드 개수 | 64 |
| 노드 당 CPU 코어 수 | 4 (Xeon X5450 3.0GHz) |
| 전체 CPU 코어 수 | 256 |
| 노드 당 메모리 크기 | 32 GB |
| 전체 메모리 크기 | 2048 GB |

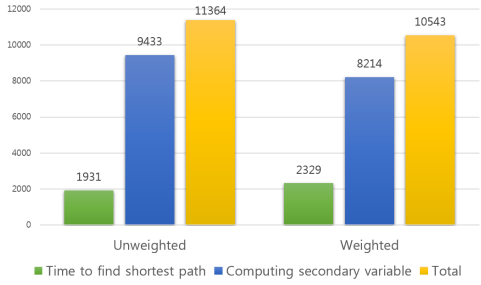
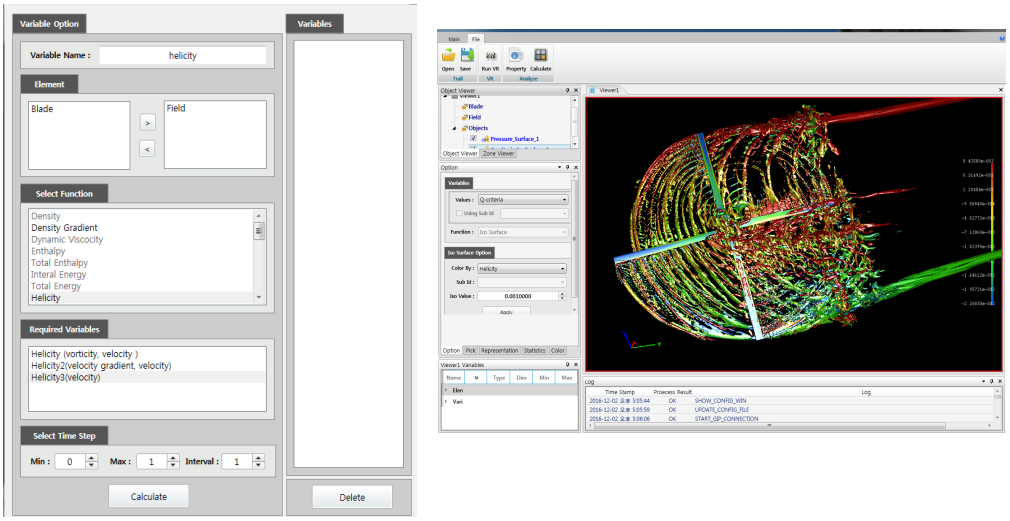



**그림 4. 실험 결과**

계산 비용을 고려한 탐색 방법을 비교 실험했으며, [그림 4]에서 그 비교 결과를 알 수 있다. 초기 변수들과 목표 변수의 종류를 무작위로 선택하되 목표 변수가 초기 변수에 포함되지 않도록 한 뒤, 총 100번의 실험을 반복하여 평균을 구하였다. 전체 실험 중 12번은 초기 변수들의 조합과 목표 변수까지의 경로가 없었기 때문에 실제 2차 변수 계산을 수행하지 못했는데, 이런 경우는 평균을 낼 때 계산 경로를 찾는 시간에는 포함했지만, 2차 변수를 계산하는 시간에는 포함시키지 않았다. 추정 계산량을 가중치에 반영한 경우(weighted)와 반영하지 않은 경우(unweighted)를 비교해 보면 반영한 경우에 최적 경로를 찾는 시간은 약 398초 더 걸렸다. 그러나 계산량을 반영한 경우가 반영하지 않은 경우보다 실제 2차 변수 계산 시간이 1,219초 더 빨랐기 때문에 전체적으로 821초 이득이 있었음을 알 수 있다.

[그림 5]는 제안한 방법을 GLOVE 가시화 도구에 탑재하여 Helicity를 2차 변수로 생성한 그림이다. [표 4]에서와 같이 본 논문에서 실험에 사용한 로터 동역학 데이터는 7개의 변수만을 가지고 있는데, 이를 이용해서 Helicity를 계산했다. 그림에서 (a)는 Helicity를 생성하기 위한 사용자 인터페이스이고 (b)는 실제 Helicity의 계산 결과를 가시화한 결과이다.




(a) (b)

그림 5. GLOVE 가시화 도구에의 적용

## V. 결 론

본 논문에서는 유동해석 데이터에서 효율적으로 2차 변수를 생성하기 위해 최적 계산 경로를 추정하고 이 경로를 이용해서 2차 변수 데이터를 생성하는 방법을 제시하였다. 이를 위해 전산유체역학 응용에서 많이 사용하는 2차 변수들을 제시하고 이들의 종속관계를 이용해서 종속 그래프를 생성했으며, 초기 변수들과 목표 변수 사이의 최적 경로를 추정하기 위해 종속 그래프를 일반적인 유향 그래프로 변환하는 방법을 제안했다. 또한, 각 변수의 계산 비용이 서로 상이한 점을 이용해서 실제 계산 시간에서의 최적 경로를 예측하기 위해 변수들의 계산 비용을 휴리스틱하게 추정하고, 이를 유향 그래프의 간선에 가중치로 반영하였다. 이렇게 변환한 그래프는 일반적인 가중 유향 그래프로, 정점 간 최단 경로를 빠르게 찾아주는 일반적인 최적 경로 탐색 알고리즘의 적용이 가능하게 된다. 본 논문에서는 다익스트라 알고리즘을 이용해서 목표 변수와 초기 변수들 간의 최단 경로를 구하였다. 제안한 방법을 실제 전산유체역학 분야 데이터인 로터 동역학 데이터에 적용하여 실제 후처리 가시화 도구를 이용하여 실험했다. 컴퓨팅 계산량을 고려한 경우와 그렇지 않은 경우를 비교 실험했으며, 이를 통해 계산량을 고려한 경우가 그렇지 않은 경우에 비해 빠름을 알 수 있었다. 본 논문에서 제안한 방법은 2차 변수를 계산하기 위한 최적 계산 경로를 찾아주지만, 계산 경로를 찾기 위해 그래프를 생성하는 시간이 실제 계산 시간에 비해 매우 오랜 시간이 걸리는 문제가 있었다. 그러나 이 계산 작업은 전처리 시간에 수행이 가능하기 때문에 한번만 계산하고 저장한 뒤 사용하면 된다. 물론, 물리 변수가 추가되거나 삭제되면 재계산이 필요한 문제는 여전히 존재한다. 이러한 문제를 해결하기 위해 향후 보다 효율적인 유향 그래프 변환 기법의 연구가 필요하겠다. 또한, 최근 컴퓨터 하드웨어의 급속한 발전으로 대용량의 유동해석 데이터가 지속적으로 생산되고 있는데, 이러한 데이터에서 2차 변수를 생성하는 것은 매우 많은 컴퓨팅 능력을 필요로 한다. 따라서 향후 병렬/분산 컴퓨팅을 적용하여 최적 2차 변수 계산 기법의 개발을 통해 전체 계산 성능을 개선하고자 한다. 병렬 CFD 변수 계산 기법은 CFD 솔버의 최적화에도 적용이 가능하며, CFD 응용 과학자들의 주된 관심사인 주 변수들의 계산 시간 단축에도 도움이 될 수 있을 것이다.

본 논문에서 제안한 기법은 CFD 응용을 위한 데이터 분석 및 가시화 도구에서는 물론 다양한 관련 콘텐츠에

서 활용이 가능하다. 이를 통해 최근 급증하고 있는 거대 CFD 콘텐츠의 분석을 보다 효과적으로 수행할 수 있을 것으로 기대한다.

## 참 고 문 헌


[1] https://www.ensight.com

[2] http://www.tecplot.com

[3] A. Khan, "Topological Sorting of Large Networks," Communications of the ACM, Vol.5, Ed.11, pp.558-562, 1962.

[4] http://streamcomputing.eu/blog/2012-07-16/how-expensive-is-an-operation-on-a-cpu/

[5] https://en.wikipedia.org/wiki/Newton%27s_method

[6] https://en.wikipedia.org/wiki/Methods_of_computing_square_roots

[7] H. Anton and R. Busby, *Contemporary Linear Algebra*, John Wiley & Sons, Inc., 2003.

[8] W. Press, B. Flannery, S. Teukolsky, and W. Vetterling, *Numerical Recipes in C : The Art of Scientific Computing, 2nd Edition*, Cambridge University Press, 1992.

[9] E. Dijkstra, "A Note on Two Problems in Connecxion with Graphs," Numerical Mathematik Vol.1, pp.269-271, 1959.

[10] J. Kim, J. Sa, S. Park, S. Jung, Y. Yoo, and K. Cho, "Parallel CFD Computation for Vortex Flow Field around HART II Rotor Blades with Prescribed Blade Deformation," Proceedings of 22nd International Conference on Parallel Computational Fluid Dynamics, 2010.

[11] 이중연, 김민아, 이세훈, 허영주, “GLOVE: 대용량 과학 데이터를 위한 분산공유메모리 기반 병렬 가시화 도구,” 정보처리학회논문지 소프트웨어 및 데이터 공학, 제5권, 제6호 pp.273-282, 2016.


## 저 자 소 개


**이 중 연(Joong-Youn Lee)** 정회원

- 1998년 2월 : 서강대학교 전자계산학과(공학사)
- 2000년 2월 : 서강대학교 컴퓨터학과(공학석사)
- 2011년 9월 ~ 현재 : KAIST 전산학부 박사과정
- 2000년 2월 ~ 현재 : 한국과학기술정보연구원 가시화기술개발실 선임연구원

<관심분야> : 과학적 가시화, 컴퓨터 그래픽스

**김 민 아(Min Ah Kim)** 정회원

- 1996년 2월 : 부산대학교 전자계산학과(이학사)
- 1998년 2월 : 부산대학교 전자계산학과(이학석사)
- 2000년 4월 : (주) LG 정보통신
- 2003년 12월 : (주) 필링크 책임연구원
- 2005년 2월: 동명대학교 초빙교수
- 2005년 6월 ~ 현재 : 한국과학기술정보연구원 가시화기술개발실 선임연구원
- 2013년 1월 ~ 현재 : 한국과학기술정보연구원 가시화기술개발실장

<관심분야> : 딥 러닝, 가상현실, 과학적 가시화

**허 영 주(Youngju Hur)** 정회원

- 1997년 2월 : 성균관대학교 정보공학과(공학사)
- 2002년 2월 : 성균관대학교 컴퓨터공학과(공학석사)
- 2002년 2월 ~ 현재 : 한국과학기술정보연구원 가시화기술개발실 선임연구원

<관심분야> : 데이터 가시화, 과학적 가시화