

# 이종 컴퓨팅 환경에서의 계산과학 시뮬레이션 관리 프로그램 개발

## Development of Computational Science Simulation Management Program in Heterogeneous Computing Environments

변희정\*, 유정록\*\*

수원대학교 ICT융합대학 정보통신학부\*, 한국과학기술정보연구원 국가슈퍼컴퓨팅본부\*\*

Hee-Jung Byun(heejungbyun@suwon.ac.kr)\*, Jung-Lok Yu(junglok.yu@kisti.re.kr)\*\*

### 요약

이종의 고성능 컴퓨팅 시스템은 최근 다양한 분야의 계산과학 시뮬레이션 처리 도구로 큰 각광을 받고 있다. 그러나 고성능 컴퓨팅 자원에 대한 활용 방법이 콘솔 기반으로 제공되기 때문에 컴퓨팅 자원에 대한 접근성과 활용성이 크게 떨어진다. 본 연구는 이러한 문제점을 해결하기 위해, 웹 기반의 이종 계산 자원 및 시뮬레이션 작업 관리 프로그램 개발에 대해 기술한다. 제안한 계산과학 시뮬레이션 관리 프로그램은 물리·가상 계산 자원 제어뿐만 아니라 사용자 인증, 데이터 관리, 시뮬레이션 작업 관리 등의 기능을 제공하며, 모듈식 플러그인 구조 설계를 통해 고도의 확장성을 가진다. 다분야 계산과학공학 교육 및 생명의료 분야 적용 사례를 통해 그 우수성을 확인한다.

■ 중심어 : | 계산과학 | 시뮬레이션 | 이종환경 | 작업관리 |

### Abstract

Heterogeneous high performance computing systems are gaining acceptance as the environments for computational scientific simulations of various application fields. Those computing systems, however, have been mostly used with the legacy consoles, resulting in the severe decrement of accessibility and usability of heterogeneous computing assets. To solve this problem, this paper presents the design and implementation of web-based computational science simulation management program. The proposed program provides fundamental primitives including user authentication, data management, physical/virtual computing resource management, job management, etc. that can be used to manage different kinds of simulations efficiently, and also offers highly extensible feature through a modular plug-in architecture. We also present the best practical examples of applications (e.g., scientific simulation education and bio-medical) to confirm our program's effectiveness.

■ keyword : | Computational Science | Simulation | Heterogeneous Environment | Job Management |

## 1. 서론

고성능 서버, 계산 가속기 및 네트워크의 발전으로

이종의 컴퓨팅 시스템은 인터넷 서비스 뿐만 아니라 거대 계산과학공학 시뮬레이션 처리 도구로써 활용이 확대되고 있다[1]. 물리, 화학, 구조역학, 생명의료 등 다

\* 이 논문은 2017년도 정부(미래창조과학부)의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 기초연구사업임 (2017R1A2B1007779)

접수일자 : 2018년 06월 28일

심사완료일 : 2018년 07월 30일

수정일자 : 2018년 07월 30일

교신저자 : 유정록, e-mail : junglok.yu@kisti.re.kr

양한 계산과학공학 응용연구자들은 기존의 이론이나 값비싼 실험을 탈피하여 시공간 제약을 받지 않는 과학공학 시뮬레이션을 통해 혁신적인 과학적 발견을 앞당길 수 있다[2]. HEP (High Energy Physics) 분야에서 신의 입자라 불리는 힉스입자를 발견하기 위한 CMS (Compact Muon Solenoid) 실험도 거대 규모의 시뮬레이션이 필수적으로 필요하며, 새로운 반도체 소자/재료의 발견을 위해서는 다양한 조건에서의 전자구조 특성과 물성치를 파악하기 위해서도 엄청난 양의 시뮬레이션이 필요하다. 그러나 기존의 이종 컴퓨팅 자원에 대한 활용 방법이 명령어 기반의 콘솔만을 통해 제공되므로 인해 그 접근성과 활용성이 크게 떨어지게 된다[3]. 이에 대한 근본적인 원인은 이종 컴퓨팅 자원들에 접근하여 여러 다양한 종류의 응용 시뮬레이션 소프트웨어를 실행할 수 있는 정형화되고 개방된 응용 프로그램 인터페이스의 부재 때문이다.

본 연구에서는 기능성, 효율성, 확장성에 중점을 둔 웹 기반의 이종 계산 자원 및 시뮬레이션 작업 관리 프로그램의 설계·구현과 개방형 응용 프로그램 인터페이스(OpenAPIs[4])에 대해 기술한다. 본 연구에서 제안한 프로그램은 다양한 계산과학 시뮬레이션 처리 서비스를 위해 반드시 필요한 사용자 인증, 시뮬레이션 입·출력 데이터 관리, 물리·가상의 이종 컴퓨팅 자원 관리 및 시뮬레이션 작업 관리 등의 기능을 제공한다. 또한 독립된 모듈 및 플러그인 구조를 설계에 고려함으로써, 상이한 특성의 시뮬레이션 처리와 이종의 계산자원 연계성 측면에서 고도의 확장성을 제공한다.

본 연구의 구성은 다음과 같다. 2장에서는 본 연구와 관련된 문헌 연구에 대해 살펴본다. 3장에서는 본 연구에서 제안한 프로그램의 설계 및 구현에 대해 기술하며, 4장에서는 계산과학 시뮬레이션 관리 프로그램이 제공하는 정형화된 개방형 프로그래밍 인터페이스를 설명한다. 5장에서는 계산과학공학 생명의료 및 교육 분야 적용사례에 대해 살펴보고, 마지막으로 6장에서는 결론 및 향후 연구계획을 설명한다.

## II. 관련 연구

### 1. 이종 컴퓨팅 환경

빅데이터 분석 및 머신러닝의 활용으로 인해 효율성과 다양성을 제공하는 이종 컴퓨팅 환경[5]이 큰 관심을 받고 있다. 이종 컴퓨팅 환경은 일반적으로 특성이 다른 두 개 이상의 계산 자원을 포함하는 환경이다. 멀티/매니코어 CPU[6]와 GPGPU 계산 가속기(범용계산에 사용 가능한 그래픽 처리장치)[7]등의 특성이 다른 계산장치로 구성된 환경이나, 물리머신들과 가상머신들이 통합되어 사용, 서비스되는 클라우드 컴퓨팅 환경[8]이 대표적인 예이다. 본 연구는 물리머신들과 가상머신들이 혼재할 수 있고, 더 나아가 특성이 다른 여러 작업/스토리지 관리자와 연계 가능한 계산과학 시뮬레이션 작업 관리 프로그램을 제안한다.

### 2. 시뮬레이션 환경

사이버 인프라스트럭처를 연계한 다양한 종류의 시뮬레이션 활용 환경이 제안되었다. 대표적인 예로는 미국의 NanoHUB[9]와 유럽연합의 ICEAGE[10] 등이 있다.

계산나노 연합 (Network for Computational Nanotechnology; NCN) 프로젝트의 일환으로 1995년 시작된 미국 NanoHUB는 다양한 시뮬레이션 소프트웨어와 콘텐츠를 연계한 시뮬레이션 활용 환경을 제공하고 있으며, 전 세계 170여개국 이상의 나노분야 연구자들에 의해 사용되고 있다. 특히 HubZero[11] 플랫폼과 연계한 Rapture[12] 시뮬레이션 도구, 시뮬레이션/콘텐츠 공유 등의 30여개 이상의 기능을 제공하고 있으며, 제조, 재해예방, 의료 분야로 그 사용이 확대되고 있다. 그러나 HubZero 플랫폼은 웹 중심의 e-Science 게이트웨이를 통해 콘텐츠의 활용·공유에 초점을 맞추고 있으며, 실제 다양한 계산자원들과의 연동을 위해 시뮬레이션 툴 개발자들에게 제한된 커맨드라인 도구를 제공하고 있는 점이 특징이다. 반면, 본 연구에서 제안한 계산과학 시뮬레이션 관리 프로그램은 물리머신/가상머신 라이프사이클 관리를 통해 계산자원을 직접 제어할 수 있으며, 또한 다양한 작업/스토리지 관리자와의 연계 기능을 통해 확장성과 범용성을 제공한다.

유럽 연합 주도로 만들어진 ICEAGE 프로젝트는 e-Science 시뮬레이션 환경 제공을 목적으로 한다. 특

히, 연구자들이 제공하는 특수 목적의 시뮬레이션 교육 도구 및 콘텐츠 연계가 가능하며, EGEE (Enabling Grids for E-Science; EGEE) 기반의 대규모 범용 사이버 인프라스트럭처를 제공한다. 그러나 ICEAGE의 이러한 기능들은 공개될 수 있을 정도의 정형화된 API를 제공하지 못하며, 그 활용 분야도 소수인 점에서 한계를 가지고 있다.

이외에도 PACS (Picture Archiving and Communication System)[13]는 영상의료 데이터의 아카이빙 및 진단/배포를 담당하는 생명의료분야에 특화된 시스템이다. PACS 시스템은 DICOM (Digital Imaging and Communications in Medicine)[14] 표준을 준수하는 여러 다양한 응용 프로그램의 실행이 가능한 형태의 확장성을 제공한다. 본 연구에서 제안한 프로그램은 PACS 시스템을 보완하는 것으로, PACS에서 대규모의 데이터 처리 작업이 필요한 경우 본 프로그램을 연계, 활용할 수 있다.

### III. 이종 컴퓨팅 자원 및 시뮬레이션 작업 관리 프로그램

대규모 사용자들에게 효율적인 시뮬레이션 처리 환

경을 제공하기 위해서는 사용자 인증, 시뮬레이션 입출력 데이터 처리, 이종(물리/가상)의 계산자원 관리, 시뮬레이션 작업 관리 등의 기본적인 기능들을 제공해야 한다. 본 장에서는 이러한 기능들을 제공하는 이종 컴퓨팅 자원 및 시뮬레이션 작업 관리 프로그램의 설계와 구현에 대해 살펴본다.

#### 1. 설계 고려사항

본 연구에서 개발한 이종 컴퓨팅 자원 및 시뮬레이션 작업 관리 프로그램의 주요 목적은 이종의 계산자원을 연계하여 시뮬레이션 작업을 효율적으로 처리하는데 있으며, 다양한 응용 분야에 적용 가능하도록 개방형 응용 프로그래밍 인터페이스를 제공하는 것이다. 이를 위한 프로그램 설계 고려사항은 1) 효율성, 2) 확장성, 3)개방성이다. 첫째, 효율성 측면에서 제안한 프로그램은 성격이 다른 시뮬레이션 작업을 효과적으로 처리하기 위해 가용한 이종 계산 자원을 최대한 연계할 수 있어야 한다. 둘째, 확장성 측면에서 제안한 프로그램은 추상화 계층과 모듈식 플러그인 구조를 사용해 시뮬레이션이 실행되는 계산자원의 특성에 독립적이어야 하며, 다양한 가상화 환경[15] (Xen, KVM 등)과 작업 관리자[16] (Torque, LoadLeveler, SGE 등)와의 연계가

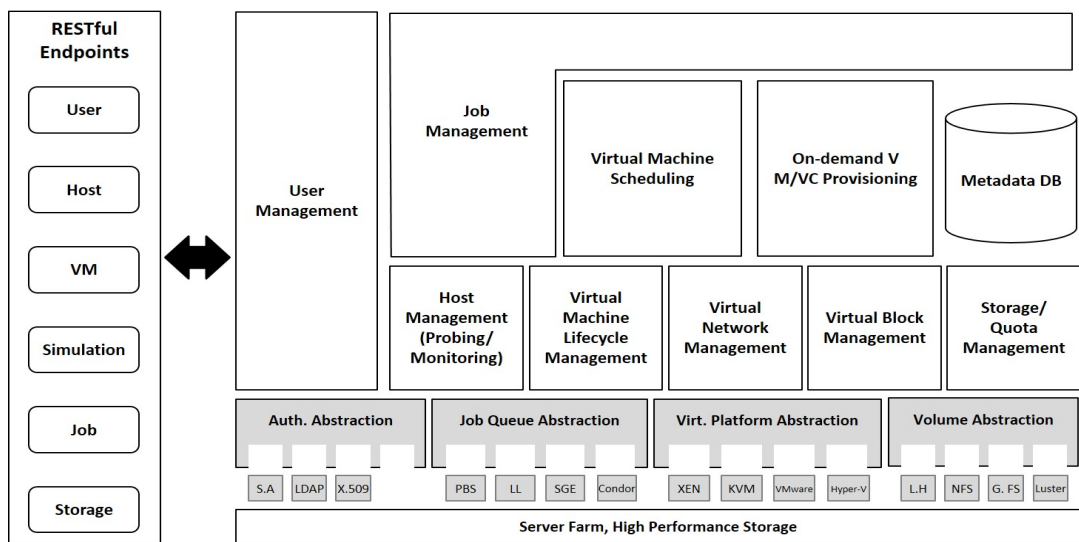


그림 1. 이종 컴퓨팅 자원 및 시뮬레이션 작업 관리 프로그램 전체 계층 구조

가능해야 한다. 마지막으로, 개방성 측면에서는 웹, 독립형 응용프로그램, 모바일 등 다양한 사용자 환경에 대응 가능하도록 웹 표준을 준수하는 RESTful 응용 프로그래밍 인터페이스를 제공해야 한다.

## 2. 프로그램 구조 및 구현 상세

[그림 1]은 본 연구에서 제안한 이종 컴퓨팅 자원 및 시뮬레이션 작업 관리 프로그램의 전체 계층 구조를 보여준다.

아래 계층에서부터 위쪽으로 각각 추상화 계층, 서비스 코어 계층, 그리고 웹 인터페이스 계층으로 구성된다. 추상화 계층은 기 구축되어 있거나 특성이 상이한 다양한 컴퓨팅 환경 (사용자 인증 방식, 컴퓨팅/스토리지 서브시스템 구성 방식, 작업 관리자 방식 등)에 대응하여 리소스 연계가 가능하도록 하여 프로그램의 확장성과 독립성을 보장하기 위한 계층이다. 서로 다른 특징을 갖는 다양한 인증 방식, 컴퓨팅/스토리지 서브시스템, 작업 관리자 등과 연계 가능하도록 추상화 인터페이스를 정의하고 있으며, 정의된 인터페이스 규약을 준수하는 플러그인의 구현을 통해 실제 각 서브 시스템과의 연동이 가능하다.

서비스 코어 계층은 사용자 관리, 물리·가상 계산자원을 포함한 이종의 컴퓨팅 자원 관리, 시뮬레이션 입·출력 데이터 관리 및 시뮬레이션 작업 관리 등의 프로그램 핵심 기능을 수행한다. 아래에서 설명할 웹 인터페이스 계층에서 요청하는 메시지를 받아 사용자 등록/삭제/인증, 물리 계산자원의 등록/삭제, 가상화 환경에서의 가상자원 (서버, 네트워크, 스토리지 등)의 프로비저닝, 시뮬레이션 작업 라이프사이클 관리 및 파일 입·출력 관리 등의 핵심 서비스를 구현한 계층이다.

가장 상단의 웹 인터페이스 계층은 HTTP(S) 표준 프로토콜을 준수하는 RESTful 웹 인터페이스를 제공한다. 사용자, 호스트 (물리 계산자원), 가상머신, 시뮬레이션, 작업, 스토리지 등의 RESTful 엔드포인트로 구분되며, 사용자의 다양한 HTTP 요청/답변을 처리한다.

[그림 2]는 본 연구에서 제안한 프로그램의 상세 구현 및 계층 간 연계를 설명한다. 앞서 기술하였듯이, 추상화 계층은 사용자 인증, 이종 컴퓨팅 자원, 작업 관리자, 스토리지 자원의 특성들에 대한 의존성을 탈피하여 프로그램 확장성/독립성을 보장하기 위해 고안된 계층이다. 현재 로컬 데이터베이스 (LocalDB) 및 LDAP (Light-weight Directory Access Protocol)[17] 플러그

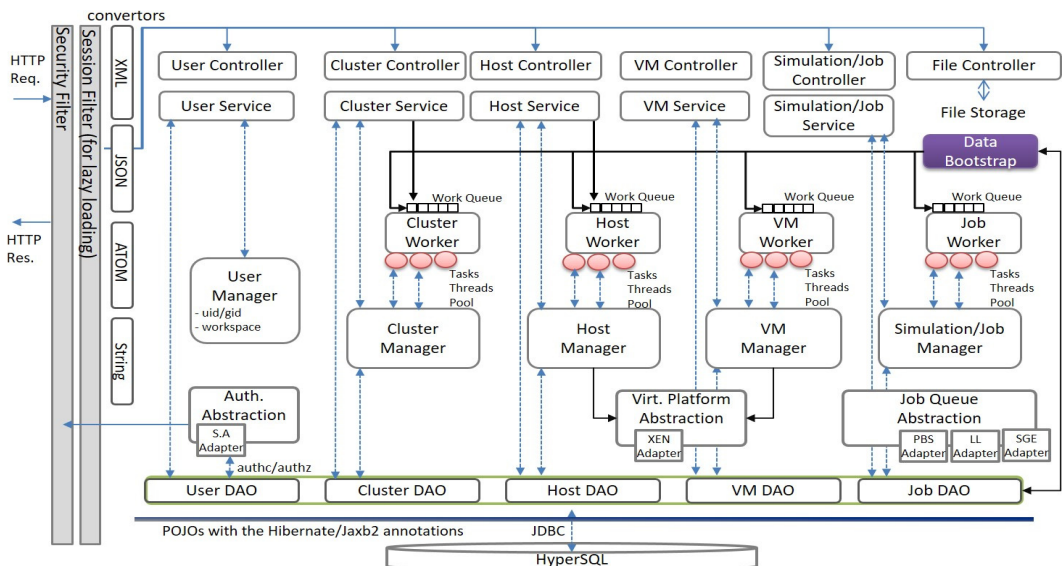


그림 2. 제안한 프로그램의 상세 구현 및 계층간 연계

인을 번들로 제공하여 기본적인 사용자 관리 및 인증 방식을 연계할 수 있도록 하였으며, 인증 추상화 계층에서 정의한 인터페이스 규약에 따라 다양한 이종 인증 방식 (OAuth 등)에 대한 지원도 가능하다. 또한 이종의 물리·가상 컴퓨팅 환경과의 연계를 위해 가상화 플랫폼 추상화 계층에서는 현재 Xen과 KVM 가상화 하이퍼바이저를 지원하며, 작업관리자 및 스토리지 추상화 계층에서는 번들 플러그인 제공을 통해 각각 Torque와 NFS 서브시스템들을 지원한다.

[그림 2]에서 보듯이 서비스 코어 계층에서는 프로그램 핵심 기능을 실행에 필요한 다양한 데이터 객체 (사용자, 클러스터, 물리머신, 가상머신, 가상머신 이미지, 스토리지, 시뮬레이션 및 작업 등)를 정의하며, Hibernate/HSQL[18] 및 Data Access Object (DAO)를 사용하여 Plain Old Java Objects(POJOs) 형태로 저장, 관리된다. 또한 서비스 코어 계층은 다수개의 서브 관리자 (즉, 사용자 관리자, 클러스터 관리자, 호스트 관리자, 가상머신 관리자, 시뮬레이션 작업 관리자 등)를 통해 사용자 등록/삭제/인증, 물리머신 등록/삭제, 온-디맨드 가상머신 프로비저닝 및 시뮬레이션 작업 라이프 사이클 관리 등의 프로그램 핵심 기능을 수행하며, 프로그램의 견고성을 위해 다중 쓰레드 워커 모델을 사용하여 구현하였다.

웹 인터페이스 계층에서는 4장에서 설명할 웹 표준을 준수하는 HTTP(S) 방식의 다양한 개방형 RESTful 인터페이스를 제공하며, Model-View-Control (MVC) 모델에 따라 서비스 코어 계층과 연동된다. 또한 관리되는 데이터 객체들에 대해서 각각 컨트롤러/서비스 서브 계층 (사용자, 클러스터, 물리머신, 가상머신, 시뮬레이션 작업, 파일 등)을 두어 Create - Retrieval - Update - Delete (CRUD) 기반의 프로그램 로직이 수행되도록 하였다. 실제 웹 인터페이스 계층 구현은 Spring 웹 MVC[19] 프레임워크를 사용하였다.

#### IV. 개방형 응용 프로그래밍 인터페이스

본 장에서는 이종 컴퓨팅 자원 및 시뮬레이션 작업

관리 프로그램에서 제공하는 웹 표준 기반의 인터페이스에 대해 설명한다.

[표 1]은 본 프로그램에서 제공하는 사용자 관리 및 이종 컴퓨팅 자원 관리를 위한 RESTful 응용 프로그래밍 인터페이스를 보여준다. 시스템 관리자가 일반 사용자들의 계정 등록/삭제 및 컴퓨팅 자원의 등록/삭제를 수행할 수 있다. 일반 사용자는 등록된 사용자 계정에 대해 login 인터페이스를 사용하여 인증 토큰을 부여 받은 후 (HTTP(S) BASIC 인증 메커니즘 사용), 모든 서비스들을 호출할 수 있다. 시스템 관리자에 의해 등록된 컴퓨팅 자원(물리머신)은 사용자가 요청한 시뮬레이션 작업 수행을 위한 개인화된 가상머신 프로비저닝에 활용된다.

[표 2]는 시스템 관리자에 의해 등록된 물리머신에서 프로비저닝되는 가상머신 라이프사이클 관리와 시뮬레이션 입출력 파일 관리를 위한 RESTful 인터페이스를 보여준다. 일반 사용자는 프로세서 개수, 메모리 크기 등의 가상머신 명세를 입력으로 하여 가상머신 프로비저닝을 요청할 수 있으며, 생성된 가상머신에 대해 일시정지, 재개, 셧다운 등의 요청을 수행할 수 있다. 또한 시뮬레이션 작업 수행에서 필요시 되는 입력 데이터에 대한 파일 업로드 및 시뮬레이션 작업 완료시 생성되는 결과 데이터에 대한 파일 다운로드 등의 파일 관리를 수행할 수 있다.

[표 3]은 시뮬레이션 작업 관리를 위한 RESTful 인터페이스를 보여준다. 일반적으로 시뮬레이션은 다수개의 연관된 작업들로 구성된다(예, 파라미터 스터디 등). 따라서 사용자는 시뮬레이션 작업 처리를 위해 임의의 시뮬레이션 오브젝트를 생성해야 하며, 시뮬레이션 생성 시 부여받은 SimID를 기준으로 작업을 제출할 수 있다. 실제 작업은 작업의 이름, 작업의 종류 (sequential 또는 parallel 작업 등), 작업 수행 프로그램 등을 포함하는 작업 명세서 (XML 또는 JSON 파일 포맷)를 입력으로 하여 제출되며, 사용자는 작업 제출 시 부여받은 JobID를 사용하여 작업 제어/모니터링 등의 작업 관리를 수행할 수 있다.

표 1. 사용자 및 이종 컴퓨팅 자원 관리를 위한 RESTful Endpoints

Category	HTTP Method	Endpoints	Description	Access Control	
				admin	user
User Management	POST	-/api/user/login	Login	0	0
	GET	-/api/user/logout	Logout	0	0
	GET	-/api/user/list	Show all the registered users	0	X
	GET	-/api/user/{UserId}/info	Show the specified user	0	0
	POST	-/api/user/register	Add a new user	0	X
	PUT	-/api/user/{UserId}	Update the user info.	0	0
	DELETE	-/api/user/{UserId}	Unregister the specified user	0	X
Resource Management	POST	-/api/host/register	Register a new host to the system	0	X
	GET	-/api/host/list	Show all the hosts	0	X
	GET	-/api/host/{HostId}/info	Show the specified host	0	X
	DELETE	-/api/host/{HostId}	Delete the specified host	0	X

표 2. 가상 자원 및 시뮬레이션 입출력 파일 관리를 위한 RESTful Endpoints

Category	HTTP Method	Endpoints	Description	Access Control	
				admin	user
VM Management	POST	-/api/vm/provision	Provision a new VM	0	0
	PUT	-/api/vm/{Vmid}/suspend	Suspend the specified VM	0	0
	PUT	-/api/vm/{Vmid}/resume	Resume the specified VM	0	0
	PUT	-/api/vm/{Vmid}/shutdown	Shutdown the specified user	0	0
	GET	-/api/vm/list	Show all the owned VMs	0	0
	GET	-/api/vm/{Vmid}/info	Show the specified VM's information	0	0
File Management	POST	-/api/file/upload?cluster={clusterName}	Upload a file to the user's repository on the clusterName storage	0	0
	POST	-/api/file/write?name={fileName}&cluster={clusterName}	Write the body content to a file on the clusterName storage	0	0
	GET	-/api/file/download?id={fileId}	Download the file	0	0
	GET	-/api/file/read?id={fileId}	Read the file	0	0

표 3. 시뮬레이션 작업 관리를 위한 RESTful Endpoints

Category	HTTP Method	Endpoints	Description	Access Control	
				admin	user
Simulation/ Job Management	POST	-/api/simulation/create	Create a simulation	0	0
	DELETE	-/api/simulation/{SimID}	Delete the simulation	0	0
	GET	-/api/simulation/list	Show all the owned simulations	0	0
	POST	-/api/simulation/{SimID}/job/submit	Submit a job	0	0
	GET	-/api/simulation/{SimID}/job/{JobID}/status	Show the job's status	0	0
	GET	-/api/simulation/{SimID}/job/list	Show all the jobs in the simulation	0	0
	PUT	-/api/simulation/{SimID}/job/{JobID}/cancel	Cancel the job	0	0
	GET	-/api/job/{JobID}/output?dir={dirName}	Get the metadata of output files	0	0
	GET	-/api/job/{JobID}/download/zip	Download the zipped output file	0	0

### V. 적용 사례

본 연구에서는 이중 컴퓨팅자원을 활용하여 효율적인 시뮬레이션 관리 서비스를 제공하는 프로그램과 그 응용 프로그래밍 인터페이스에 대해 설명하였다. 특히, 본 연구에서 기술한 시뮬레이션 작업 관리 프로그램의 유용성 및 기능성을 평가하기 위해서 계산과학 교육 분야의 웹 기반 시뮬레이션 수행 환경을 개발하였다[그림 3]. 계산과학 교육에서의 다양한 응용 분야 문제해결을 위한 시뮬레이션 수행 과정을 간략히 설명하면 다음과 같다.

첫째, 문제필터 또는 키워드 검색을 통해 시뮬레이션에 사용하고자 하는 시뮬레이션 소프트웨어를 선택한다[그림 3-a].

둘째, 선택된 소프트웨어를 이용하여 수행하고자 하는 시뮬레이션의 이름과 설명을 명시하고 만약 시뮬레이션 소프트웨어가 외부 입력파일을 필요로 하는 경우에는 해당 파일을 업로드 한다[그림 3-b].

셋째, 파라미터 입력 단계에서는 시뮬레이션에 사용되는 각 변수의 단일 값 또는 다중 값(최소, 최대, 증가분)을 입력하여 계산하고자하는 작업 리스트를 생성한다. 사용자는 생성된 작업 리스트의 변수 값들을 최종 확인한 후에 수행하고자 하는 작업들을 시스템에 제출한다[그림 3-c].

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 다양한 가시화 도구를 연동하여 계산 결과를 확인해 볼 수 있다[그림 3-d].

[그림 4]는 본 연구에서 제안한 시뮬레이션 관리 서비스를 적용한 또 다른 적용 사례인 생명의료(가상척추) 시뮬레이션 수행 환경을 보여준다. 계산과학 교육 분야의 시뮬레이션 수행 절차와 유사하지만, 유체역학 응용분야의 해석 목적으로 사용되는 Abaqus 계산 소프트웨어를 대상으로 하는 점과 유체해석을 위한 입력 격

자를 생성하는 전처리기와 연계한 점이 다른점이다.

위 적용사례 이외에도, 본 연구에서 제안한 시뮬레이션 관리 프로그램은 고도의 확장성, 개방성 등의 장점 때문에 다양한 분야에 적용될 수 있다. 실제 공학분야에서의 빅데이터 분석이나 딥러닝을 활용한 시뮬레이션 도구들(예, 고해상도의 이미지 데이터 처리 및 인공지능을 활용한 단백질 구조 분석 등)과의 연계를 통해 다양한 응용분야의 지원이 가능하다.

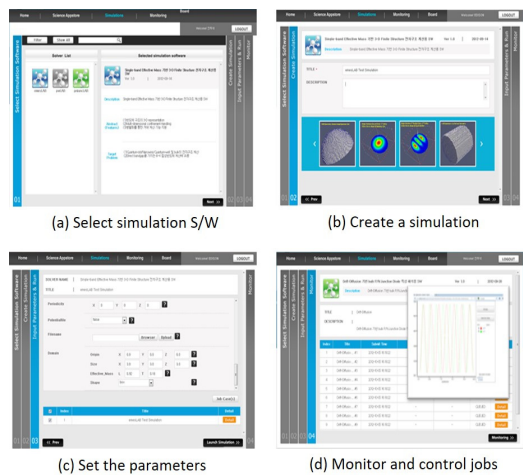


그림 3. 계산과학 교육 분야 시뮬레이션 수행 환경

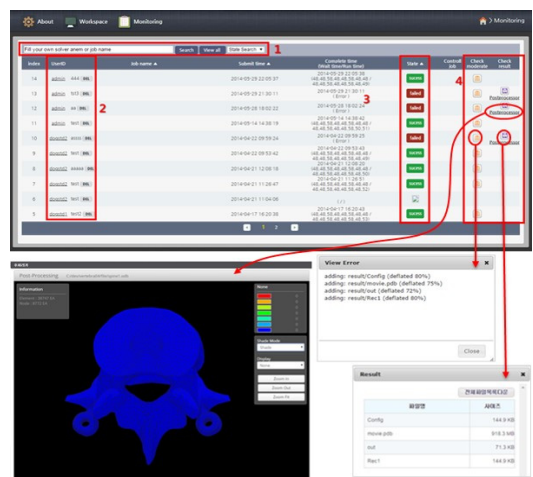


그림 4. 생명의료(가상척추) 분야 시뮬레이션 환경

## VI. 결론 및 향후 계획

이중 컴퓨팅 시스템은 다양한 응용 분야의 거대 계산 과학공학 시뮬레이션 처리 환경으로 그 활용이 확대되고 있다. 본 연구에서는 이중 컴퓨팅 환경에서의 효율적인 시뮬레이션 관리 프로그램의 설계 및 구현에 대해 기술하고, 프로그램이 제공하는 세부적인 개방형 응용 프로그래밍 인터페이스에 대해 살펴보았다. 제안한 시뮬레이션 관리 프로그램은 물리-가상 컴퓨팅 자원에 대한 제어뿐만 아니라 사용자 인증, 시뮬레이션 입출력 데이터 관리, 시뮬레이션 작업 관리 등의 핵심 기능을 제공하며, 모듈식 플러그인 구조 설계를 통해 고도의 확장성을 가진다.

이러한 고도의 확장성을 제공하는 시뮬레이션 관리 프로그램은 다양한 이중 계산자원을 연계한 거대 계산 과학공학 분야의 시뮬레이션 처리를 위한 필수불가결한 기초 프레임워크를 제공한다. 더불어 본 프로그램에서 제공하는 웹 기반의 개방형 응용 프로그래밍 인터페이스를 활용하여 기초/응용 과학 및 산업 분야 (예, 제품 설계 등) 에서 필요한 웹, 모바일 또는 독립적인 응용 프로그램 형태의 e-Science 게이트웨이를 실현할 수 있다. 그러나, 본 연구에서 제안한 프로그램의 기능이 이중의 계산자원 연계 및 시뮬레이션 작업 관리에 초점을 맞춘 것이니 만큼 더 나은 범용성을 제공하기 위해 추가적인 기능 개선이 필요하다. 예로, 본 프로그램은 시뮬레이션 소프트웨어에 대한 관리 기능은 제공하지 않는다. 이는 최근 응용 프로그램 개발/배포에 장점을 가지고 있으며, 소프트웨어 실행환경에 독립성을 제공하는 컨테이너 (예, Docker, Singularity 등) 기반 소프트웨어 관리 기법[20]에 대한 연계가 필요하다. 또한 시뮬레이션 결과에 대한 복잡한 3차원 가시화가 필요한 경우, 오픈소스 기반의 가시화 솔루션 (예, ParaviewWeb[21] 등)과의 연계도 필요하다. 이러한 기능 개선에 우선순위를 두고 향후 프로그램 개발을 진행할 예정이며, 현재 본 프로그램이 적용된 생명의료 및 교육 분야 이외의 다양한 계산과학공학 응용분야로 확대 적용할 예정이다.

## 참고 문헌

- [1] B. Hindman, A. Konwinski, M. Zaharia, and I. Stoica, "A common substrate for cluster computing," Workshop on Hot Topics in Cloud Computing 2009.
- [2] R. Seungwoo, K. Jik-Soo, K. Sangwan, K. Seoyoung, and H. Soonwook, "Effective Distributed Supercomputing Resource Management for Large Scale Scientific Applications," J. of KIISE, Vol.42, No.5, 2015.
- [3] L. Kotthoff, T. Kelsey, and M. McCaffery, "Web-scale distributed eScience AI search across disconnected and heterogeneous infrastructures," Proceedings of the 10th IEEE International Conference on e-Science 2014.
- [4] RESTful OpenAPIs, [http://en.wikipedia.org/wiki/Representational\\_state\\_transfer](http://en.wikipedia.org/wiki/Representational_state_transfer), 2018-06-21
- [5] F. Jan, C. Jiří, D. Marie, and J. Janecek, "New Approach for Virtual Machines Consolidation In Heterogeneous Computing Systems," International Journal of Hybrid Information Technology, Vol.9, No.12, 2016.
- [6] A. Tiwari, A. C. Chantrenne, A. Jundt, J. Peraza, R. Löhner, J. D. Baum, and L. Carrington, "Running large scale CFD applications on Intel KNL - based clusters," International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol.86, No.11, 2018.
- [7] K. SeongKi, "A Survey on Issues at the GPGPU Acceleration of the Monte Carlo Tree Search," International Journal of Applied Engineering Research, Vol.12, No.15, 2017.
- [8] J. Bi, H. Yuan, W. Tan, M. Zhou, Y. Fan, J. Zhang, and J. Li, "Application-aware dynamic fine-grained resource provisioning in a virtualized cloud data center," IEEE Transactions on Automation Science and Engineering, Vol.14,



No.2, 2017.

[9] nanoHub, <http://nanohub.org>, 2018.06.21.

[10] ICEAGE (International Collaboration to Extend and Advance Grid Education), <http://www.iceage-eu.org/>, 2018.06.21.

[11] HubZero Platform, <https://hubzero.org/>, 2018.06.21.

[12] <https://nanohub.org/infrastructure/rappture/>, 2018.06.21.

[13] F. Y. Calderon, F. Wihardja, E. Melamed, M. Song, G. Paladini, N. Lepore, M. Nelson, S. Erberich, S. Bluml, and J. G. McComb, "Extending PACS functionality: towards facilitating the conversion of clinical necessities into research-derived applications," 12th International Symposium on Medical Information Processing and Analysis. Vol. 10160. International Society for Optics and Photonics, 2017.

[14] S. Piyamas, K. Dejhan, and S. Yimmun, "A web-based DICOM-format image archive, medical image compression and DICOM viewer system for teleradiology application," SICE Annual Conference, Proceedings of IEEE, 2010.

[15] A. Chierici and R. Veraldi, "A quantitative comparison between xen and kvm," Proceedings of the 17th International Conference on Computing in High Energy and Nuclear Physics, 2009.

[16] Y. Yonghong and C. Barbara, *Comparative Study of Distributed Resource Management Systems - SGE, LSF, PBS Pro, and LoadLeveler*, 2004.

[17] H. Johner, L. Brown, F. S. Hinner, W. Reis, and J. Westman, *Understanding LDAP*, IBM 1998.

[18] G. Shahram and M. Ankit, "An evaluation of the hibernate object-relational mapping for processing interactive social networking actions," Proceedings of the 16th International Conference on Information Integration and Web-based Applications & Services, ACM,

pp.64-70, 2014.

[19] Spring Web Framework, <https://spring.io>, 2018.06.21.

[20] W. Felter, A. Ferreira, R. Rajamony, and J. Rubio, "An updated performance comparison of virtual machines and linux containers," Performance Analysis of Systems and Software (ISPASS), 2015 IEEE International Symposium On. IEEE, 2015.

[21] J. Sebastien, U. Ayachit, and B. Geveci, "Paraviewweb, a web framework for 3d visualization and data processing," IADIS international conference on web virtual reality and three-dimensional worlds, Vol.7, 2010.

#### 저 자 소 개

변 희 정(Hee-Jung Byun)

정회원



- 2005년 2월 : 한국과학기술원 전  
기전자공학과(공학박사)
- 2010년 2월 : 삼성전자 책임연구  
원
- 2010년 3월 ~ 현재 : 수원대학  
교 ICT 융합대학 정보통신학부

부교수

<관심분야> : 이종컴퓨팅, 네트워크

유 정 록(Jung-Lok Yu)

정회원



- 2007년 2월 : 한국과학기술원 전  
자전산학과(공학박사)
- 2010년 8월 : 삼성전자 책임연구  
원
- 2010년 9월 ~ 현재 : 한국과학  
기술정보연구원 슈퍼컴퓨팅부

부 책임연구원

<관심분야> : 병렬처리, 클러스터/클라우드 컴퓨팅