

e-사이언스 환경에서 공학 교육을 위한 통합 수치 해석 프레임워크

박숙영[†] · 강혜정^{††} · 김윤희^{†††}

요 약

유동 수치 해석 분야의 실험들은 복잡한 수학 방정식의 계산 과정으로 이루어져 있고, 이러한 실험을 수행할 수 있는 거대한 계산 자원과 그 자원을 효율적으로 관리할 수 있는 환경을 요구한다. 현재 수치 해석을 위한 특정 목적의 실험을 수행할 수 있는 e-사이언스 환경에 대한 연구는 많이 진행되고 있으나 다양한 공학 교육 분야의 유동 해석을 위한 통합 수치해석 연구 프레임워크를 개발한 사례는 거의 없는 실정이다. 따라서 본 논문에서는 그리드 자원을 효율적으로 이용할 수 있는 UNICORE를 기반으로 다양한 유동 해석을 위한 기본 프레임워크를 설계하고, 이에 대한 프로토타입으로 세 가지 유동 응용들에 대한 수치해석 연구를 통합 환경에서 수행할 수 있는 e-사이언스 프레임워크를 개발하였다.

주제어 : e-사이언스, 문제풀이 환경, 수치 해석, 공학 교육, UNICORE

An Integrated Numerical Analysis Framework for Engineering Education in e-Science Environment

Sookyoung Park[†] · Hyejeong Kang^{††} · Yoonhee Kim^{†††}

ABSTRACT

The analytical experiments for fluid dynamics lead a sequence of complex scientific computations composing of numerical equations and require enormous computing resources with appropriate management tools. Currently most studies on e-Science environment for numerical studies focus on solving specific problems to drag out the best performance of matters and have less interest in providing a common framework to apply for diverse numerical domains in engineering education, especially for fluid dynamics. This paper presents an integrated e-Science experiment tool which could be easily applicable to solve various numerical analyses in fluid dynamics. As a proof-of-concept, an integrated e-Science framework with three numerical analyses has been designed and implemented over UNICORE that runs over grid computing environment.

Keywords : e-Science, PSE, numerical analysis, engineering education, UNICORE

† 정 회 원: 숙명여자대학교 컴퓨터과학과 초빙교수
 †† 학생회원: 숙명여자대학교 컴퓨터과학과 석사
 ††† 정 회 원: 숙명여자대학교 컴퓨터과학과 교수(교신지자)
 논문접수: 2012년 01월 30일, 심사완료: 2012년 03월 24일, 게재확정: 2012년 03월 26일
 * 본 연구는 숙명여자대학교 SRC여성질환경연구센터 특별연구비 지원으로 수행되었음(2011).

1. 서 론

유동 분야의 실험은 주로 복잡한 수치해석 방정식의 계산 과정으로 이루어져 있으므로, 거대한 계산 자원과 그 자원을 사용하여 계산수행이 가능한 환경을 요구한다. 최근 이러한 계산 집약적인 과학 응용들을 위한 실험 환경으로 e-사이언스 환경이 많이 사용되고 있으며, 수치해석이나 유동 등 각각의 연구 환경을 제공하는 연구들도 존재한다[1][2][3][4]. 그러나 이러한 연구들은 대개 특정 응용 실험을 위한 환경이거나[3], 수치해석을 위한 연산 방정식을 풀기 위한 용도로 사용되는 등[4] 유동용 수치해석 연구를 위한 e-사이언스 환경은 거의 전무하다.

유동 현상을 해석하기 위한 수치 기법을 개발하는데 있어서 효율적인 연구 개발 환경 구축은 매우 중요하다. 기존에 검증된 빌딩 블록을 쉽게 이용할 수 있는 연구 개발 환경이 구축될 경우, 새로운 수치 기법을 검증하는데 있어서 해석 프로그램 개발 시간을 단축하고 다양한 분야에 적용할 수 있어 수치 기법 개발 연구의 효율성을 크게 향상시킬 수 있다. 또한 통합된 개발 및 실험 환경, 가시화와 같은 전처리 모듈이 구축될 경우, 수치 기법을 공부하고 개발하는데 있어서 편의성을 크게 향상시킬 수 있다. 그러나 현재까지는 범용적인 수치 해석에서 사용할 수 있는 루틴화된 라이브러리나 간단한 모델 방정식을 해석하는 샘플 코드 수준의 빌딩 블록은 개발되어 있으나, 이를 쉽게 사용할 수 있는 해석 코드 개발 및 검증 전반을 관리하는 연구 프레임워크는 아직까지 개발되지는 않았다.

따라서 본 논문에서는 최근 급격하게 발달하는 컴퓨팅 기술을 접목하여 효율적인 수치 해석 기법 연구 개발이 가능한 교육용 연구 프레임워크를 개발하여 수치 기법 개발의 효율성 증가 및 편의성 향상을 기대하고자 한다. 이를 위해 UNICORE(Uniform Interface to COmputing Resources)[5]의 가시적인 사용자 인터페이스인 URC(Unicore Rich Client)를 이용하여 이미 검증된 빌딩 블록을 쉽게 이용할 수 있고, 개발 및 실험 환경을 제공하는 다양한 공학 교육 실험을 위한 통합된 e-사이언스 통합 수치 해석 프레임워

크 개발을 목표로 고속 유동(Hyperbolic Conservation Laws Numerical Study), 난류 유동(Turbulence Numerical Study), 다상 유동(Multi-phase Fluid Dynamics Numerical Study)의 세 가지 응용 연구를 위한 프로토타입 프레임워크를 개발하였다.

연구 및 교육을 목적으로 하는 사용자가 e-사이언스 환경에서 사용가능한 그리드 자원의 특성이나 구체적인 사용법 및 응용의 실행 방법을 모르더라도 이 논문에서 제안하는 통합 프레임워크를 통하여 관심 응용에 대한 수치해석 실험을 수행할 수 있다. 사용자는 다양한 유동 수치해석 실험에 대하여 작업을 설계하고 그리드 자원을 통하여 실험을 수행하며, 그 결과를 가시화하는 것까지 모든 작업을 통합 환경에서 수행할 수 있어 편리하다. 그리고 사용자 PC 상에서 프로젝트 단위의 작업 이력관리가 체계적으로 관리되어 과거에 수행한 실험과 그와 관련된 파일들을 관리하고 재활용하기에 용이하다. 이러한 e-사이언스 기반 통합 프레임워크는 수치해석 연구 및 개발자의 실험 환경을 개선시켜줄 뿐만 아니라 수치해석 교육 분야에서도 활용도가 높을 것으로 예상된다.

본 논문의 2장에서는 관련 연구를 논하고 3장에서는 기본 프레임워크 구조 및 실험 구성 과정 등 설계에 대해 알아본다. 그리고 4장에서 구현과 관련된 내용을 설명하며 마지막으로 결론을 맺는다.

2. 관련연구

공학 교육 분야에서의 유동 현상을 분석하기 위한 수치 해석 연구용 e-사이언스 전용 프레임워크가 개발된 사례는 거의 드물다. 연구 목적이 아닌 다른 이유로 물리 시뮬레이터 수준으로 개발된 사례는 있으나, 복잡한 물리 현상을 수치적으로 정확하게 해석하는 데에는 한계가 있다. 또한 국외 몇몇 연구 그룹에서 제공하는 수학 라이브러리 또는 공개용 소스코드 형태로도 개발된 사례가 거의 전무하다. 다만 국내에서는 항공분야를 중심으로 수치해석 중심의 유체역학 교육을 위한 웹기반 환경(e-AIRS)[1][2]을 구축하여, 이를 실제 대학 교육에 활용한 사례가 있다. 교육

목적의 웹기반 환경인 e-AIRS에서는 1차원 및 2차원 Euler, Navier-Stokes 방정식 해석을 위한 수치해석자와 별도의 전후처리를 동시에 제공함으로써, 웹기반 유체역학 교육을 성공적으로 수행한 사례라 할 수 있다. 그리고 EDISON-CFD[6]는 e-AIRS에서의 서비스 경험을 바탕으로 유체 역학 분야의 서비스를 위한 문제 해결 환경을 제안하며, 비슷한 분야의 교육 및 연구를 위한 융합 환경 구축을 목표로 웹 기반의 포털 서비스를 제공하는 플랫폼을 제시하였다. 그러나 e-AIRS나 EDISON-CFD는 범용적인 수치해석 분야에 대한 연구보다는 항공분야의 응용 연구에 집중되어 있어 수리과학 연구자들을 위한 실험 환경 구축을 위한 연구는 별도로 추진되어야 할 것으로 판단된다.

범용적인 수치 해석 프로그램 개발을 위한 수치 선형 대수학 분야의 다양한 루틴은 이미 개발되어 있으며, 연구용 뿐 아니라 상용 수치 해석 프로그램에서도 이를 이용하기도 한다. 유동 해석을 위한 수치 기법 개발에 특화된 경우는 CLAWPACK[7]과 같이 모델 방정식을 해석하는 소스 코드 형태로 제공되며, 이를 변형하여 새로운 수치 기법 개발에 응용되기도 한다. 대표적인 패키지를 살펴보면 다음과 같다.

CLAWPACK(Conservation Laws Package)은 University of Washington의 R. J. Leveque 연구 그룹에서 1995년부터 개발한 패키지로 1차원부터 3차원까지 일반적인 비선형 Hyperbolic Conservation Laws를 해석할 수 있다. 모듈화된 소스 프로그램으로 공개되어 사용자의 목적에 따라 특정 모듈만 수정하여 수치 기법을 개발할 수 있도록 설계되어 있으며, 지속적인 개발을 통해서 패키지의 기능이 확장되고 있다.

PETSc (Portable, Extension Toolkit for Scientific Computation) [8]는 대용량 과학 계산을 위한 수치 해석 라이브러리로 PDE 해석에 필요한 다양한 수치 기법 루틴을 체계적으로 다루고 있다. Argonne National Lab.에서 개발하였으며 유동 해석 등 다양한 과학 및 공학 분야의 수치 해석 기법 개발에 사용되고 있다.

수치해석 응용을 대상으로 그리드 자원에 접근 가능한 독립 소프트웨어를 개발한 연구로는

FLOWGRID[3]와 SciLab[4]이 존재한다. FLOWGRID는 전산 유동을 위한 실험환경 연구로서, 규모가 큰 실험을 수행할 수 있으며 가시적인 사용자 인터페이스를 제공한다. 하지만 전산유동 전문가를 대상으로 하는 FLOWGRID는 일반 연구 및 학습을 목적으로 하는 사용자가 새로운 실험을 적용하는 것이 어렵다. 그리고 고성능의 수치 해석 알고리즘을 지원하는 연구인 SciLab은 수치 연산 수행에만 집중되어 있어 다양한 수치 방정식을 풀 수는 있지만 수치해석 코드를 개발하고 검증하기에는 한계가 있다.

앞서 설명한 바와 같이 수치 해석 개발에 유용한 빌딩 블록은 몇몇 국외 연구 그룹에서 개발하고 있으나 e-사이언스 환경을 제공하지 않거나, e-사이언스 환경을 제공하더라도 대개 특정 목적만을 위한 실험만을 제공하거나 순수 수치해석의 연산 방정식을 풀기 위한 용도로만 사용된다. 이와 같이 공학 교육 분야에서 편리하게 실험 및 연구를 수행할 수 있는 통합된 실험 환경이 구축된 사례는 없으므로, 공학 교육 분야의 여러 수치 해석 응용들을 대상으로 실험 환경을 제공해 줄 수 있는 e-사이언스 환경에서의 통합 프레임워크 설계 및 개발이 필요하다.

3. 프레임워크 설계

3.1 유동 수치해석을 위한 프레임워크 요구 사항

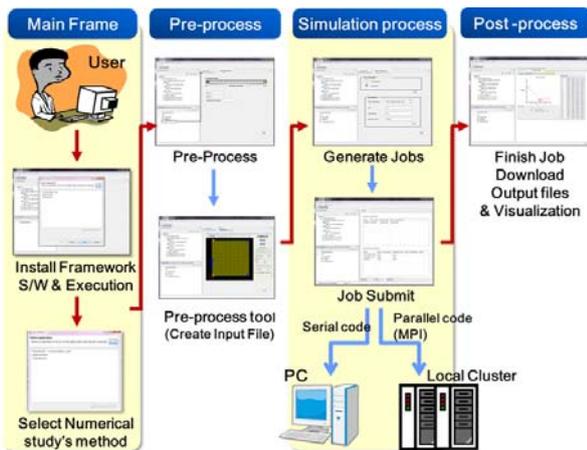
유동 수치해석을 위한 수치 연구 프레임워크 구성을 위해서는 수치모델에 따른 다양한 계산 환경을 고려해야 하기 때문에 개인 PC 및 로컬 기반과 원격지에서의 리눅스 클러스터 사용을 모두 지원하도록 해야 한다. 그리고 수치 연구를 위한 해석 코드의 프로그래밍 언어는 계산 과학 분야에서 일반적으로 널리 사용되고 있는 Fortran을 주 언어로 하되 C 언어 지원도 가능하도록 한다. 해석 코드의 실행 환경은 수치 모델에 따라 해석 코드의 계산 방식이 다양하므로, serial 계산과 parallel 계산이 모두 가능하도록 시스템을 구성하도록 하여야 하며 병렬화 기법으로는 OpenMP 또는 MPI 라이브러리를 사용가능하도록 시스템을 구성하여야 한다. 이러한 수치해석 코드를 실행

가능하게 하는 사용자 환경 구성과 관련해서는 수치 모델에 따라 다양한 형태의 사용자 환경 구성이 가능해야 하며, 확장성과 프로그램 개발의 용이성을 고려한 JAVA 응용프로그램 기반의 전처리 모듈과 연동 가능해야 한다.

본 논문에서는 다양한 유동 수치해석 실험 환경 구축을 위해 위와 같은 요구사항을 만족시키면서 응용 분야의 연구자들이 개인 PC 및 분산 자원을 보다 쉽게 활용하면서, 쉽고 편리하게 실험을 수행하고 관리할 수 있는 통합 수치 연구 프레임워크를 설계하였다.

3.2 e-사이언스 프레임워크에서의 실험 수행 과정

유동분야의 수치 모델 해석을 위한 수치 연구 프레임워크의 사용 시나리오는 그림 1과 같이 나타낼 수 있다. 그림과 같이 사용자는 Main frame 단계(사용자 환경, GUI)에서 수치 연구 프레임워크 설치 파일을 이용하여 프로그램을 설치하고, 이를 실행하는 과정을 통해 프로그램을 시작하게 된다. 프로그램을 구동하고 나면 사용자가 수행하고자 하는 적절한 수치모델에 따른 응용을 선택하고, 실험을 위한 전처리 단계로 넘어가게 된다.



<그림 1> e-사이언스 프레임워크에서의 실험 수행 시나리오

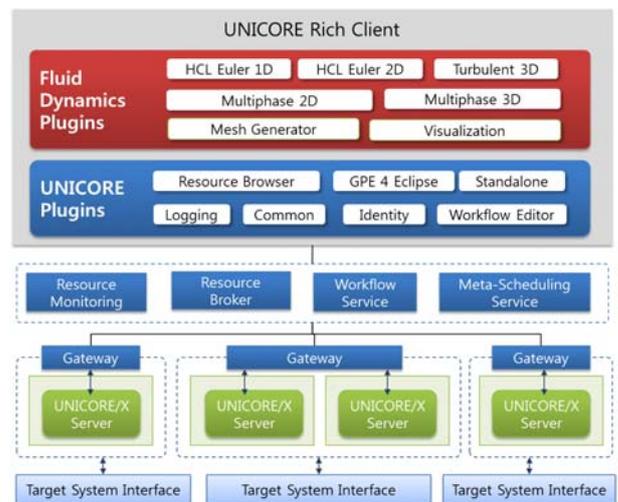
전처리 단계에서는 각 수치모델에 최적화되어 있는 전처리 프로그램을 구동하여 필요한 파라미터를 설정함으로써 전처리 과정을 수행하거나 미리 가지고 있는 전처리 파일을 업로드 하는 형태

로 해석하고자 하는 공간을 구성하게 된다. 확장형 해석 프레임 워크에서는 Hyperbolic Conservation Law 해석 모듈은 1, 2차원 해석, 난류 해석 모듈은 3차원 해석, 다상 비압축성 N-S 해석 모듈은 2, 3차원 해석을 지원하도록 한다. 전처리 프로그램을 통해 해석 공간을 구성하고 나면 해석 단계로 넘어가게 된다.

시뮬레이션 단계에서는 해석하고자 하는 문제의 종류에 따라 적절한 변수 입력, 경계조건 설정 등의 작업을 거친 후에 작업 제출을 하게 되며, 시스템은 입력받은 파라미터 값에 따라 작업 명세를 생성하고 생성된 작업이 작업의 종류에 따라 해당 계산 자원으로 제출되어 실험을 수행하게 된다. 실험 수행이 완료되면 사용자의 실험 환경에 실험이 완료되었다는 표시가 나타나고 결과 파일을 사용자 PC로 다운로드 하여 확인하는 후처리 과정으로 이동하게 된다. 특히 가시화가 필요한 결과 파일에 대하여서는 해당 응용 실험의 결과 확인에 알맞게 제작된 가시화 툴 또는 오픈 소스인 paraview를 통해 확인 가능하다.

3.3 e-사이언스 프레임워크 구조

본 논문에서 제안하는 UNICORE 기반 e-사이언스 프레임워크의 전체 구조는 그림 2와 같다.



<그림 2> 전체 구조

클라이언트는 URC의 핵심 플러그인과 유동 해석 실험 설계 환경을 위한 플러그인들을 포함한

다. 먼저 UNICORE 플러그인[9]을 살펴보면 Resource Browser 플러그인은 응용에 따라 사용 가능한 자원 목록을 보여주며, GPE4Eclipse 플러그인은 작업 명세를 그래픽으로 표현하고 GPE (Grid Programming Environment)[10] 컴포넌트와 URC를 연결한다. Standalone 플러그인은 워크벤치와 perspective를 생성한다. Logging 플러그인은 모든 플러그인들이 그들의 로그 메시지를 기록하고 표시할 수 있도록 한다. Common 플러그인은 미들웨어와 상호작용할 수 있는 코드와 클라이언트 스텝을 제공하며, Identity 플러그인은 URC의 Security view와 보안 서비스를 관리한다. 마지막으로 Workflow Editor 플러그인은 워크플로우를 그래픽으로 표현하는 역할을 수행한다.

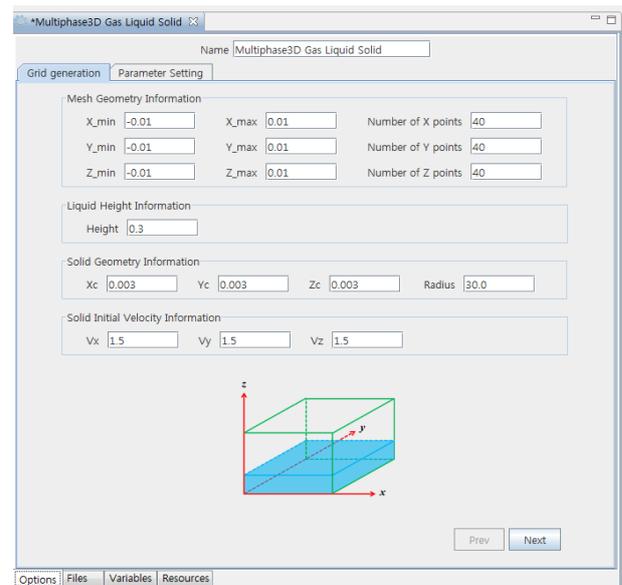
사용자가 URC 기반의 통합 수치해석 프레임워크를 사용하여 특정 응용을 위한 작업 또는 워크플로우 작업을 생성하여 UNICORE 서버에 제출하면, Resource Broker가 작업 제출요청을 받고 Resource Monitoring을 통해 작업 수행이 가능한 자원을 선택하기 위해 클라이언트로부터 필요한 정보(응용 이름, 자원 정보, 노드의 수, CPU core 수 등)를 수집한다. 만약 적절한 자원이 선택되면 제출된 작업은 사용자 정보와 함께 해당 자원의 Gateway에서 인증 과정을 통과하여 서버 모듈인 UNICORE/X를 거쳐 실제 머신을 관리하는 Target System Interface를 통해 실행되게 된다. 워크플로우 작업 또한 Resource Broker와 Meta-Scheduling Service와 상호 작용하는 Workflow Service 모듈을 통해 일반 작업의 실행과 유사하게 제출 및 수행이 가능하다.

본 논문에서 설계한 유동 해석 플러그인에서 포함하고 있는 각각의 플러그인이 하는 일은 다음과 같다. HCL Euler 1D와 2D는 고속 유동 해석 모듈을 위한 것이며, Turbulent 3D는 난류 해석 모듈을 위한 3차원 해석 플러그인이다. 그리고 Multiphase 2D와 3D는 다상 비압축성 N-S 해석 모듈을 지원하는 플러그인이다. Mesh Generator는 여러 응용들의 전처리 단계에서의 입력 파일을 생성하거나 경계 조건을 설정하는 플러그인이며, Visualization은 실험의 결과를 가시화 형태로 보여주기 위한 플러그인이다.

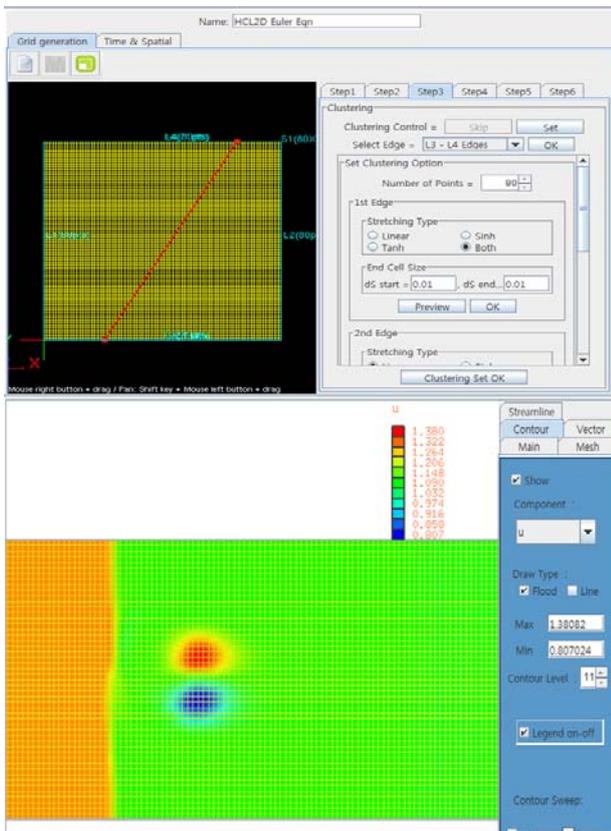
4. 통합 프레임워크 구현

e-사이언스 실험을 위한 필수적인 요소들로 이루어진 이클립스 RCP 기반의 URC에 GPE[11]의 하나인 그리드빈[10]을 이용하였다. URC는 이클립스 RCP 및 그리드빈의 특성중 하나인 동적으로 새로운 인터페이스 및 기능을 추가할 수 있는 플러그인을 이용하여 새로운 응용의 적용이 용이하며 본 논문에서는 대상 응용인 유동 수치해석 중에서도 충격파의 발생에 따른 불연속 구간의 수치 불안정성을 해결하기 위한 수치 기법을 연구하는 고속유동과 미세규모의 유동 특성까지 엄밀한 분석을 할 수 있는 수치해석 기법을 연구하는 난류유동, 서로 다른 특성의 유체가 혼재하는 유동현상을 해석하기 위한 보다 정확한 수치해석 기법을 연구하는 다상유동의 세 가지 응용들에 대한 수치해석 연구를 위한 플러그인을 개발하였다. 기본적으로 프레임워크의 사용자 인터페이스는 수치해석 기법의 종류별로 하나 또는 다수의 인터페이스와 하나의 데이터 모델이 존재한다.

그림 3은 난류 수치해석에 대한 실험 환경으로 실험을 위한 파라미터를 설정하는 화면을 보여주고 있으며, 그림 4는 고속 유동을 위한 메쉬 파일을 생성하는 전처리기와 실험 결과를 시각화하여 보여주는 후처리기의 화면이다.



<그림 3> 실험 환경



<그림 4> 전처리기와 후처리기

교육 환경에서 지원하고자 하는 응용 실행파일 및 GUI 플러그인의 추가에 따라 UNICORE 미들웨어가 설치된 계산 자원에서 실험을 진행할 수 있도록 추가 설정작업을 해야 한다. 그리고 계산 자원의 UNICORE 미들웨어 서버에서 응용 정보를 저장하고 있는 IDB (Incarnation DB)에 대상 응용들의 실험들에 대한 이름, 버전 및 실험수행에 필요한 실행파일위치, 파라미터 정보들을 추가함으로써 응용의 GUI에 해당하는 클라이언트에서 해당 계산 자원을 사용할 수 있도록 하였다.

5. 결 론

본 연구에서는 유동 수치해석 분야의 고속 유동, 난류 유동, 다상 유동의 세 가지 응용을 대상으로 해당 응용들의 연구를 e-사이언스 환경에서 수행할 수 있도록 하는 교육용 프레임워크를 설계하고 개발하였다. 수치해석 프레임워크는 UNICORE의 가시적인 사용자 인터페이스인 URC를 기반으로 확장하였고 통합 환경에서 e-사이언스 환경으

로의 접근 및 작업을 수행, 관리, 모니터링 할 수 있다. 또한 실험의 대상개체인 격자를 사용자가 전처리기를 통해 생성하고 실험의 결과를 가시화 틀을 이용하여 확인하는 작업을 단일 프레임워크 상에서 수행할 수 있는 편리한 환경을 구축하였다. 이 연구는 수치해석이라는 서로 같은 분야의 다른 도메인의 응용에 대한 실험들을 공통의 인터페이스를 통하여 통합된 환경에서 제공할 뿐만 아니라 e-Science 환경이 거의 전무한 유동 수치해석 분야에 필요한 연구 환경을 제공하여 유동 해석을 위한 수치해석 기법 연구 및 교육의 효율성을 증진시킬 수 있다. 또한 이후 새로운 응용을 추가하는 것도 가능하여 유동 수치해석 응용 연구에의 교육용 연구 환경 구성비용을 절감하는데에도 크게 기여할 수 있다.

참 고 문 헌

- [1] Jongbae Moon, Chongam Kim, Yoonhee Kim, and Kum Won Cho. **CFD Cyber Education Service using Cyberinfrastructure for e-Science**. Networked Computing and Advanced Information Management, 2008, 2-4 Sept.
- [2] 조정현, 허신영, 김윤희, 김종암, 조금원. **e-Science 기반 사이버 교육을 위한 유체 해석 연구 시스템**. Korean Network Operations and Management (KNOM) Review, Vol. 12, No. 1, pp.42~50, June, 2009.
- [3] **FLOWGRID** <http://www.unizar.es/flowgrid/>
- [4] **SciLab**. <http://www.scilab.org/>
- [5] **UNICORE**. <http://www.unicore.eu/>
- [6] 정영진, 진두석, 김규진, 임재형, 남덕윤, 문중배, 유정록, 안부영, 박선례, 이종숙, 조금원. **EDISON-CFD: 웹 기반의 유체역학 교육 연구 융합 환경 구축**. 한국전산유체공학회 2011년도 추계학술대회, 2011.
- [7] **CLAWPACK**. <http://depts.washington.edu/clawpack/>
- [8] **PETSc**. <http://www.mcs.anl.gov/petsc/>
- [9] Bastian Demuth, Bernd Schuller, Sonja Holl, Jason Daivandy, Andre Giesler, Valentina Huber. **The UNICORE Rich**

Client: Facilitating the Automated Execution of Scientific Workflows. 6th IEEE International Conference on e-Science, 2010.

- [10] **Grid Programming Environment(GPE).** <http://sourceforge.net/projects/gpe4gtk/>
- [11] Sandra Bergmann. **GridBean Developer's Guide.** UNICORE, 2009.



박 숙 영

2000 숙명여자대학교
컴퓨터과학과(학사)
2003 숙명여자대학교
컴퓨터과학과(석사)

2010 숙명여자대학교 컴퓨터과학과(박사)
2010 ~ 현재 숙명여자대학교 컴퓨터과학과
초빙교수

관심분야: 그리드 컴퓨팅 환경(PSE), 무선 네트워크
E-Mail: blue@sm.ac.kr



강 혜 정

2010 제주대학교
컴퓨터공학과(학사)
2012 숙명여자대학교
컴퓨터과학부 (석사)

관심분야: 그리드 컴퓨팅 환경(PSE), 온톨로지,
지능형 시스템 등

E-Mail: hjkang@sm.ac.kr



김 윤 희

1991 숙명여자대학교
전산학과(학사)
1996 Syracuse University
전산학과(석사).

2000 Syracuse University 전산학과(박사).

1991~1994 한국전자통신연구원 연구원.

2000~2001 Rochester Institute of Technology
컴퓨터공학과 조교수.

2001~현재 숙명여자대학교 컴퓨터과학부 교수.

관심분야: 그리드 컴퓨팅 환경(PSE), 워크플로우
제어, 그리드/클라우드 관리 등

E-Mail: yulan@sm.ac.kr