

Cactus PSE의 활용을 통한 전산유체역학 문제 해석

고 순 흠^{*1}, 조 금 원², 나 정 수², 김 영 균³, 송 영 덕⁴, 김 종 암¹

CFD Analyses on Cactus PSE(Problem Solving Environment)

S. H. Ko, K. W. Cho, J. Na, Y. G. Kim, Y. D. Song, C. Kim

'The Grid'[1] means the collaboration of computing and experimental resources in dispersed organizations by high-speed network. It has been paid much attention for an unlimited number of potential resources available and the easiness to build collaborative environments among multiple disciplines. However, the difficulty in establishing the environments and accessing and utilizing the resources has prevented application scientists from conducting Grid computing. Thus, the present study focuses on building PSE(Problem Solving Environment) which assists application researchers to easily access and utilize the Grid. The Cactus toolkit, originally developed by astrophysicists, is used as a base frame for Grid PSE. Some modules are newly developed and modified for CFD(Computational Fluid Dynamics) analysis. Simultaneously, a web portal, Grid-One portal, is built for remote monitoring/control and job migration. Cactus frame through the web portal service has been applied to various CFD problems, demonstrating that the developed PSE is valuable for large-scaled applications on the Grid.

Key Words: The Grid, Cactus PSE, CFD, Web Portal

1. 서 론

무어의 법칙[2]에서 제시한 바와 같이 마이크로 프로세서는 매 18개월당 두 배의 발전 속도를 나타낸다. 그러나 이와 같은 프로세서의 발전 속도에도 불구하고 단일 계산 자원만으로는 해석이 불가능한 규모의 문제들이 산재하는 것이 현실이며, 이에 전산 연구자들은 다수의 자원을 고속 통신망에 연결하여 동시 활용하는 방식의 해석 기술인 병렬 컴퓨팅 기술을 개발하였으며, 최근에는 광역에 걸쳐 분포하는 고성능의 연구 자원들을 초고속 네트워크망으로 연

결하여 공유하는 그리드[2] 기술을 연구하고 있다.

그러나 이와 같은 자원적 한계 극복 방안은 동시에 각 응용 연구자들에게 전산 분야의 새로운 지식 흡수를 위한 노력을 강제한다. 다수의 자원을 동시에 활용함에 따라 프로세서간 통신을 담당하는 MPI[3] 라이브러리를 부가적으로 사용해야만 하며, 그리드 기술의 활용을 위해 globus[4]와 같은 새로운 소프트웨어의 사용법을 숙지해야 한다. 계산 자원의 규모 확대는 분명 응용 연구자들에게 보다 발전된 연구 환경을 제공하기 위한 것이었으나, 오히려 각 연구자들에게 자신의 비전공 분야 지식 습득에 노력을 기울이도록 요구하는 상황이 된 것이 사실이다.

이와 같은 응용 연구자들의 부가적 노력을 줄이기 위하여 연구자들이 전산 분야의 지식 없이도 발전된 계산 자원 형태 내에서 자신의 해석자를 활용할 수 있게 하고자 하는 연구들이 진행되어 왔다. 특정 문제 해석을 위해 필요한 모든 계산적 편의를 제공하는 컴퓨터 시스템을 문제 풀이 환경(PSE : Problem Solving Environment)이라 지칭하며, Nimrod/G[5],

Triana[6] 및 Cactus[7]등이 현재 개발되어 있다. 이 중 Cactus는 기본적으로 천체물리학 연구자들의 공동 연구를 위한 기반으로 개발되었으나, 천체물리학 연구 분야 뿐 아니라 전산유체역학 분야에서도 활용 가능하다. 응용 연구자들은 기존의 Cactus frame에 자신의 응용 해석자를 porting하는 과정만으로 Cactus 내에서 수치해석을 수행할 수 있으며, 기존의 Cactus frame이 지원하는 각종 전산 기술들을 제공받을 수 있다.

본 연구는 위에서 기술한 Cactus를 전산유체역학 분야로 적용하는 것을 목표로 한다. 이에 응용 연구자, 특히 전산유체역학분야의 연구자가 수치해석을 위해 Cactus를 사용함으로써 Grid 환경에서 수치해석을 위한 연구 방향을 제시하였으며, 각종 예제 수행을 위한 thorn의 제작 및 그 구조의 해부를 통하여 Cactus를 활용한 전산유체역학 연구의 기반을 제시한다.

2. Cactus 분석

2.1 Cactus의 특성

Cactus는 과학자들과 엔지니어를 위해 설계된 open source의 PSE이다. Cactus의 객체 지향 구조는 다 그룹간 협력에 의한 해석자의 개발 및 다중 컴퓨터 환경간 병렬처리 연산을 쉽게 할 수 있게 해준다. Cactus라는 이름이 내재하고 있는 의미와 같이 중심에 각종 hardware 및 operating system에서의 구현 가능성과 다양한 module간 연결성을 담당하는 flesh가 있고, 확장 가능한 각종 응용 module들은 thorn이라 이름지어지는 단일 개체로 제작된 후 flesh 주위에 연결된다.(그림 1)



Cactus framework의 연구를 통하여 병렬처리, 출력과 입력, 데이터 분할등과 같은 표준적인 계산 toolkit이 정형화되어 있으며, 전산유체나 천체물리학

과 같은 응용과학분야에서 수치해석을 하기 위하여는 각 application solver를 thorn으로 제작하여 첨부하게 된다.

Cactus는 Fortran이나 C 언어와 같은 기존의 응용 해석자들의 작성에 사용된 프로그래밍 언어를 지원하므로 별도의 프로그래밍 언어를 배울 필요가 없으며, 컴퓨터 구조와 운영시스템에 독립적이다. 또한, Cactus 자체가 자동적으로 병렬처리를 수행하므로 사용자가 해석자의 병렬화를 수행할 필요가 없으며, 공통의 frame 기반에서 해석을 수행하므로 다분야 연구자간 공동 연구가 용이하다. 마지막으로, 최적화된 시뮬레이션 데이터의 전송법, 계산 결과의 시각화 등과 같은 부수적 작업에 대하여 해당 분야의 전문가들이 제공하는 module을 활용하므로 최신의 소프트웨어 기술을 사용 할 수 있다.

2.2 Cactus and CFD

Cactus를 전산유체역학 해석에 활용하기 위하여 연구자들은 기 개발된 해석자를 Cactus frame에 맞추어 porting하는 작업을 수행해야 한다. 기존에 유용하게 사용되던 해석자를 새로운 frame에 적용하는 작업을 수행하는 것은 일견 무의미한 일로 생각될 수 있다. 이에 본 절에서는 Cactus를 활용한 전산유체역학 연구 수행에 따른 장·단점 및 주요 연구 과제를 고찰하기로 한다.

우선 Cactus 기반의 전산유체역학 해석시의 장점으로서는 Cactus가 Grid computing을 위한 기능을 지원하므로 응용 연구자가 별도의 부가적 지식 습득 없이 Grid 환경에서 거대 규모의 해석을 수행할 수 있다는 점이 있다. 다음으로, 동일 환경상에서 해석을 수행하므로 상호간 공동 연구가 용이해 지며, 마지막으로 응용 연구자들이 전산 분야에 대한 아무런 제반 지식 없이 최적의 해석 환경을 구현하고 최신의 전산 기술들을 활용할 수 있다는 장점이 나타난다.

반면, 몇 가지의 단점 또한 지적될 수 있다. 우선 소규모의 문제를 해석할 때나 수치기법을 개발하고 검증하는 경우에는 기존의 해석자를 굳이 새로운 frame으로 porting하는 것은 불필요한 일이다. 또, 각 연구자들이 보유하고 있는, 특정 문제에 최적화된 해석자를 일반화하기 위하여는 부가적인 많은 노력을 요구하며, 마지막으로 현재까지는 몸체 좌표계를 사용하는 격자 구성과 이에 대한 해석 결과의 가시화 등과 같은 CFD 분야의 연구를 위한 제반 기술이

제공되지 않고 있다는 문제가 있다.

3. Cactus 기반의 CFD 해석

3.1 지배 방정식 및 수치 기법

지배방정식으로써 3차원 압축성 Euler방정식이 사용되었다. 일반적인 곡선좌표계(ξ, η, ζ)로 나타내면 다음과 같다.

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} + \frac{\partial G}{\partial z} = 0 \quad \text{where}$$

$$Q = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho e \end{pmatrix}, \quad E = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (\rho e + p)u \end{pmatrix},$$

$$F = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ (\rho e + p)v \end{pmatrix}, \quad G = \begin{pmatrix} \rho w \\ \rho uw \\ \rho vw \\ \rho w^2 + p \\ (\rho e + p)w \end{pmatrix}$$

공간차분법은 AUSMPW+(modified Advection Upstream Splitting Method Pressure-based Weight function)[9]를 사용하였다. 시간 적분은 LU-SGS (Lower-Upper Symmetric Gauss Seidel)[10] 기법이 사용되었다. 시간 간격은 각 셀에서 선형화 행렬의 고유값이 CFL 안정조건을 만족시키는 국소 시간 간격(local time stepping)으로 크기를 결정하였다. 해석에 사용된 격자계는 body-fitted 좌표계를 사용하고 단일 block으로 구성된 2차원 RAE-2822 Airfoil 형상 및 3차원 Onera-M6 날개 형상을 활용하여 일반 좌표계를 사용하는 격자 시스템에서의 Cactus의 활용 가능성을 분석하였다.

3.2 3차원 수치해석자의 Cactus로의 적용

3차원 Euler 방정식을 위한 알고리즘의 일반적인 구성은 다음과 같다. 전처리 단계에서 해석대상에 대한 격자생성(mesh generation)이 수행되고, 해석 단계에서는 유동조건 초기화(initial conditions) 및 격자 입력(mesh input), 해석 격자를 computational domain으로 전환(metrics and jacobian)이 수행된 후 반복 계산이 실행된다. 반복 계산 영역은 경계조건 적용(boundary conditions), 국소 시간전진 계산(local time stepping), 공간 차분에 의한 flux계산, 시간적분(time integration) 등으로 구성된다. 이후 후처리 단계에서 결과 데이터에 대한 visualization

및 분석이 수행된다. 본 연구에서는 해석 단계에 포함되는 각각의 구성요소를 독립적인 thorn으로 작성하여 Cactus가 지향하는 모듈화를 수행한다.

각각의 thorn은 CCL파일을 통해 상태정의(configuration)를 하며, src/ 폴더 내에 수치해석코드의 구성 루틴을 저장한다. 기존의 수치해석 루틴은 Cactus에서 제공하는 파라미터(parameter) 및 함수(function)를 사용하기 위한 선언 추가, 기존 변수의 Cactus 변수(Cactus variables)로 변환 등의 설정 수행 후 저장된다.

3.3 유동 해석 결과

현재까지의 Cactus frame 개발 연구를 바탕으로 실제 비행기의 날개 주위의 유동을 해석하였다. 일단 일반 격자계를 활용하여 전산유체역학 해석이 가능한지의 여부 확인을 위하여 C-type 격자 구조를 가지는 RAE-2822 airfoil을 단일 프로세서를 활용하여 해석하였다. 본 형상은 기본적으로 2차원 유동을 나타내며, 161 X 41개의 격자점을 가진다. 그러나 현재의 Cactus frame이 3차원 해석 전용으로 개발되었으므로 z-방향으로 격자를 뺐아내어 총 161 X 41 X 3개의 격자점을 가지는 문제를 해석하도록 하였다. 유동 속도는 마하수 2의 supersonic 유동과, 마하수 0.78의 transonic 유동으로 각각 주어 각 경우에 대하여 타당한 경계 조건이 부여되는지의 여부를 확인했다. 각각 받음각은 0도로 처리하였다.

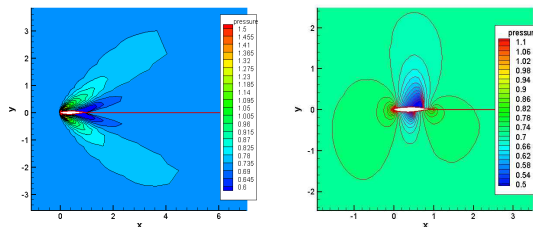


그림 14 초음속(L) 및 천음속(R) 유동 해석 결과 본 연구를 통해 비행기 형상에 대하여 타당한 경계 조건의 부여를 확인할 수 있었으므로 3차원의 Onera-M6 비행기 날개 형상에 대한 병렬 해석을 수행하였다. 이 경우 격자계는 아래 그림 15와 같으며, 총 격자점은 141 X 33 X 65개이다. 총 6개의 프로세서를 사용하여 병렬 해석을 수행한 결과 Cactus frame은 1 X 2 X 3 parts로 영역 분할을 수행하는 것을 알 수 있었다. 그리고 유동 해석은 마하수 0.78, 받음각 0도에 대하여 수행되었다. 실제로 Onera-M6의 해석 문제는 마하수 0.84 및 받음각 3.06도에서

lambda-shock이 생성되는 문제가 가장 유명하며, 실험치가 존재하나 본 문제에서는 현재의 해석 가능성 확인이 중요하므로 앞의 airfoil 예제에서의 동일한 마하수 및 받음각 처리를 하였다. 그 결과 나타나는 압력 분포는 그림 16과 같다. 실제 실험치가 존재하지 않아 결과의 정확성을 확인할 수는 없으나, 날개 leading edge 근처의 압력 상승 및 점진적 압력 하강 분포와 날개 표면에서의 압력 분포 등으로부터 결과의 타당성을 확인할 수 있다. 그러나, 병렬 해석 시 8개 이상의 프로세서를 사용하게 되면 날개 단면의 회전 방향으로의 경계조건으로 periodic boundary condition을 부여해야 하며, 현재까지는 periodic boundary condition의 적용시의 결과의 부정확성이 존재하고 있는 바, 이에 대한 개선이 요구된다.

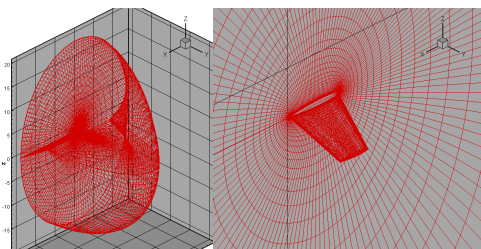


그림 15 3차원 Onera-M6 격자계(O-type)

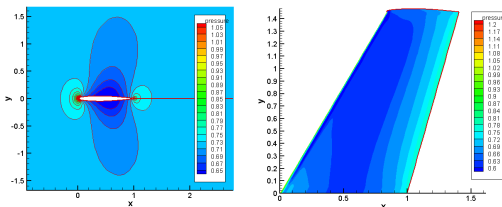


그림 16 압력 분포

3. Cactus 기반의 CFD 해석

본 연구에서는 과학 기술을 위한 문제 풀이 환경을 제공하는 미들웨어로서 Cactus를 CFD분야에 적용하여 Cactus 기반의 전산유체역학 수치 해석을 수행하였다. Cactus의 구조에 대한 이해를 바탕으로 Cactus frame 기반에서 일반 좌표계를 사용하는 전산유체역학 문제를 해석할 수 있는 arrangement인 CactusEuler3D를 개발하였다. 개발된 thorn을 활용하여 3차원 wedge 충격파 문제에 적용함으로써 각종 thorn의 기능 및 연결 관계 분석, 결과의 타당성 검증을 수행하였고, 개발된 General Coordinate I/O 루틴을 적용하여 몸체 격자계를 사용하는 비행기 날

개 주위의 유동을 해석하였다. 이 같은 연구를 통하여 Cactus의 전산유체역학 분야로의 적용에 관한 가능성을 확인하였고, 향후 Cactus frame을 활용한 각종 과학기술분야 연구의 공동 수행 가능성을 제시하였다.

현재까지의 연구를 기반으로 향후에는 다수의 block을 가지는 복잡한 형상의 몸체에 대한 해석을 수행할 수 있도록 하는 병렬화 작업 및 load balancing이 진행될 것이며, 동시에 가시화 연구자들과의 연계를 통하여 일반 좌표계를 활용하는 해석 문제의 효율적 원격 가시화 방안 마련 및 전산 분야 연구자들과의 협업을 통한 자동 job migration 및 resource management 등의 작업이 수행될 것이다.

[참고문헌]

- [1] <http://www.intel.com/research/silicon/mooreslaw.htm>
- [2] M. M. Resch, "Metacomputing in High Performance Computing Center," IEEE 0-7659-0771-9/00, pp. 165-172 (2000)
- [3] <http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/>
- [4] <http://www.globus.org/>
- [5] D. Abramson, K. Power, L. Kolter, High performance parametric modelling with Nimrod/G: A killer application for the global Grid, in: Proceedings of the International Parallel and Distributed Processing Symposium, Cancun, Mexico, 2000, pp. 520 - 528.
- [6] <http://www.triana.co.uk/>
- [7] <http://www.cactuscode.org/>
- [8] <http://www.pointwise.com/>
- [9] Kyu Hong Kim, Chongam Kim and Oh Hyun Rho, 1998, "Accurate Computations of Hypersonic Flows Using AUSMPW+ Scheme and Shock-aligned-grid Technique," AIAA Paper 98-2442.
- [10] Yoon, S., and Jameson, A., 1988, "Lower-Upper SymmetricGauss-Seidel Method for the Euler and Navier-Stokes Equations," AIAA Journal, Vol. 26, No. 9, pp. 1025-1026.