기계우주응용 수치해석을 위한 통합형 문제풀이환경

윤경아 O 강혜정 김서영 최윤희 김윤희 김종암 [1]
숙명여자대학교 컴퓨터과학과, 서울대학교 기계항공공학부 [1],
{ yoonka, hjkang, sssyyy77, choiyhyo ,yulan}@sookmyung.ac.kr, chogam@snu.ac.kr[1]

An Integrated Problem Solving Environment for Numerical Study of Mechanical Aerospace Application

Kyoung-a Yoon O, Hyejeong Kang, Seoyoung Kim, Yoonhee Choi, Yoonhee Kim,
Chongam Kim[1]
Computer Science, Sookmyung Women's University,
Mechanical and AeroSpace Engineering, Seoul National University[1]

요 약

과학연구 분야와 IT 기술을 융합하여 연구의 생산성을 높이고자 하는 e-사이언스 환경 구축이 다양한 분야에서 활발하게 이루어지고 있다. 그러나 응용마다 e-사이언스 전용 환경 구축으로 인해 공통의 인터페이스의 부재로 각각의 응용들이 유사함에도 불구하고 개발된 기술의 공유와 재사용을 기대하기 어렵다. 따라서 e-사이언스 응용 기술의 지속적인 발전을 위해서는 응용 기술들 간 표준화된 서비스를 통하여 단일 환경에서의 실험환경이 제공되어야 한다.

따라서 본 논문에서는 수치해석 기법을 연구하는 3개의 과학 응용 분야를 대상으로 응용마다 유사하게 적용되는 수리과학 현상을 해석하기 위한 UNICORE 기반의 기본형 통합 연구 프레임워크를 구축하였다.

1. 서 론

국내외 응용 수학 분야와 자연 과학 분야에서는 연구 수행의 한계를 극복하기 위해 새로운 수치 기법 개발이 활발하게 진행되고 있다. 특히 e-사이언스 환경에서 수치해석 기법 연구를 전산 환경 기술과 접목하여 다양한 종류의 연산 자원에 접근할 수 있도록 하고 이로써 과학 연구에서의 생산성을 올리고 있다. 그러나 현재 이를 효율적으로 연구할 수 있는 다양한 응용을 지원하는 통합된 연구 프레임은 아직 구축되어있지 않다. 현재 개발된 e-사이언스 연구 환경은 해당 응용 분야 전용의 환경 이거나 단순히 모델 방정식을 해석하는 수준에 불과하다.

이렇게 응용 별 연구 환경 구축으로 인해 e-사이언스 환경에서 제공하는 공통의 인터페이스의 부재로 응용들이 수치 해석의 기술 공유와 재사용을 기대하기 어렵다. 또한 앞으로 e-사이언스 사업이 진행되어 나아감에 따라 다수의 응용분야에서 개발되는 다양한 기술들을 응용연구자들에게 제공하기 위해서는 공통적인 서비스 제공으로 응용 기술이 관리 되고 효율적인 연구가 수행될 수 있도록 하는 통합된 연구 환경이 필요 하다.[1] [2]

이를 위한 연구로 UNICORE(UNiform Interface to COmputing REsources)[3]가 존재하며 UNICORE는 통합된 보안 환경 하에서 슈퍼컴퓨터나 클러스터와 같은 분산된 그리드 자원으로의 한결같고(seamless) 직관적인 접근을 통해 일관적으로 작업을 관리 할 수 있는 환경을 제공해 준다.

본 논문에서 우리는 다양한 물리 해석을 수행하는 3개의 응용을 대상으로 응용마다 특화된 인터페이스를 제공할 뿐만 아니라 비슷한 연구 수행 시나리오를 갖고 있는 응용들을 단일 환경에서 수행할 수 있도록, 수치해석 연구를 위한 UNICORE 기반으로 통합형 프레임워크를 구축 하였다. 결과적으로 본 논문에 제안된 수치해석 프레임워크를 이용하여 각 응용에서 개발된 수치해석 기법은 실험수행을 통해 검증이 가능하다.

2. 대상 응용의 특징 분석 및 요구사항 도출

본 논문에서 대상으로 하는 기계항공(Hyperbolic Conservation Laws 수치해석), 계산과학(난류 수치해석), 수리과학(Multi-phase 유체 역학 수치해석) 분야에서는 현재 e-Science 환경이 존재하는 응용도 있으나, 이 환경은 수치 해석 자체에 대한 연구보다는 응용 연구에 집중되어 있어 수리과학 연구자들을 위한 연구 환경 구축이 필요하다.

또한 각 응용에서 사용되는 수치 방정식은 응용의 상호 의존성이 크고 복잡한 방정식으로 구성되어 있으며

이 논문은 2010년도 정부(교육과학기술부)의 재원으로 국가수리과학연구소의 주요사업에서 지원을 받아 수행된 연구임 (NO.A21001)

난류 수치 해석의 경우 Multi-scale 특성이 있어 수치 기법이 미세규모의 특성까지 엄밀히 분석할 수 있어야 하고, 서로 다른 특성을 갖는 유체가 혼재하는 Multi-phase 유체 역학 현상을 해석하는 경우에는 각 유체의 특성에 맞는 해석 기법을 적용해야 한다. 따라서 위와 같은 복잡한 유체 역학 현상의 경우, 현재의 개발된 다양한 수치 기법을 통해서 유체 물리를 정확하게 해석하는 데에는 한계가 있어 더욱 정밀하고 정확한 수치해석 기법이 필요하고 이러한 수치해석 기법을 개발하는데 있어서 효율적인 연구 개발 환경 구축은 매우 중요하다.

이러한 수치해석 기법 연구를 위한 프레임워크는 수치해석 기법의 다양한 실험규모에 대하여 사용자가 다양한 환경에서 실험을 수행할 수 있도록 사용자 개인 PC와 그리드 환경을 모두 지원하고, 연구자들이 개발하는 실행 파일형태의 시리얼, openMP, MPI parallel 수치해석 기법 코드들이 실행 가능해야 한다. 또한 각각의 수치 모델에 따라 다양한 형태의 사용자 환경 구성이 가능해야 하며, 수치해석 기법의 입력파일인 격자 생성을 위한 전처리 모듈과 해석된 결과를 가시화하기 위한 후처리 모듈이 존재해야 한다.

3. 다양한 기계우주응용 수치해석 프레임워크 구축을 위한 분석

3.1 e- 사이언스 어플리케이션

응용 수학 및 자연과학 분야에서는 이론적으로 해결할 수 없는 문제에 대하여 새로운 연산 기법 개발을 통해 이를 보안 하고 있다.

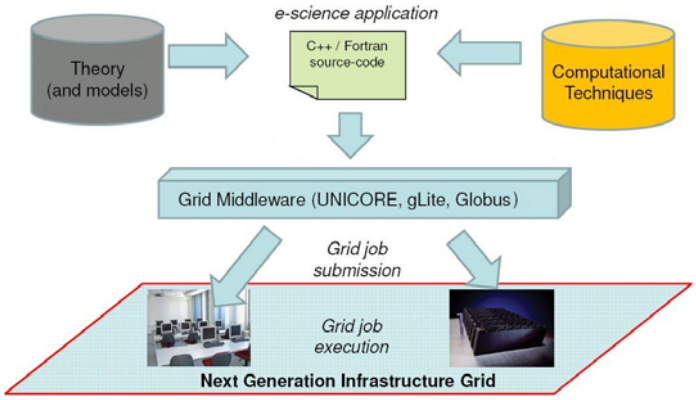

그림 1. e- 사이언스 어플리케이션의 실험수행[4]

그림 1에서는 e-사이언스 어플리케이션이 어떻게 이용되고 있는지 보여주고 있는데 연산 기법이 적용된 시리얼 코드나 병렬 코드는 사이언스 어플리케이션을 이용하여 검증 과정을 거치게 되고 이때 작업에 대한 추가적인 명세나, 자원에 대한 요구를 정의를 할 수 있다.

어플리케이션을 통해 생성된 작업은 UNICORE나 gLite[5], Globus[6] 와 같은 그리드 미들웨어를 통하여 그리드 자원에 제출되고 실행 된 결과는 로컬 환경에서 연구자들이 직접 확인이 가능하다.

e-사이언스 어플리케이션은 연구자들에게 효율적으로 연구 할 수 있는 환경을 제공 할 수 있지만 대부분의 어플리케이션은 자체 그리드 미들웨어를 사용하도록 개발되었기 때문에 다른 환경에서 상호운용이 되지 않는 단점이 있다.

이런 문제를 해결하기 위한 대안책으로 다른 미들웨어 환경에서 동작 하고 상호운용을 가능케 하는 프레임워크 개발도구로 유럽에서 개발된 UNICORE가 있다.

3.2 UNICORE

UNICORE는 독일 슈퍼컴퓨터 센터의 사용자들에게 각 센터의 이기종 컴퓨팅 자원을 쉽고 편리하고 보안성을 가지고 접속할 수 있도록 하기 위해 개발되기 시작하였다. [7]

이것은 통합된 보안 환경, 일관된 작업 환경 및 관리 환경, 그리고 많은 다양한 종류의 자원들을 지원해 주는 차세대 Grid 시스템으로 발전하고 있다. 최신버전인 UNICORE6에서는 OGSA(Open Grid Services Architecture)에 기반을 두고 있고, OGF(Open Grid Forum), W3C(World Wide Web Consortium), OASIS(Organization of the Advancement of Structured Information Standards), IETF(Internet Engineering Task Force)에서 제정되는 웹 기반 표준 WSRF(Web Services Resource Framework), JSDL(Job Submission Description Language), BPEL(Business Process Execution Language), WS*(Web Services -*) 등을 지원하는 특징이 있다. 이렇게 UNICORE6에서 모든 층이 표준을 채택함으로써 다른 시스템 혹은 미들웨어 상에서 동작이 가능한 상호 운용성을 증가 시킨다.

UNICORE에는 상호 운용성 제공 이외에도 몇 가지 특징이 있으며 그 특징들은 아래와 같다.

- 자체 통합 미들웨어 지원
- 다양한 사용자 인터페이스 제공 : GUI를 제공 하는 URC(Unicore Rich Client)와 UCC(Unicore Command Client), 포탈 등을 통하여 사용자는 계산 자원으로의 무결절한 접근을 할 수 있다.
- 다양한 플랫폼 지원 : 사용자로 하여금 로컬 유닉스 워크스테이션이나 윈도우PC 등의 GUI를 통해 구조화된 작업을 준비하고 수정할 수 있게 해준다.
- 다양한 작업 관리 기능 제공 : 사용자는 Job에 대한 모든 작업과 자료에 대한 제어권 가지고, Job의 상태를 모니터링 가능하며, 수행 후 job에서 발생하는 큐의 모든 로그 정보 제공을 통하여 에러 조건 분석에 유용하게 사용할 수 있다.

- 자료 관리 : 자료의 입력/ 출력의 흐름을 파악하는 정보 제공하고 사용자 작업 영역인 Uspace에서 관리할 수 있다.
- Workflow 제어 : 반복 수행 되는 계산 작업 or 특정 조건에 대한 제어 기능 제공한다.
- 응용 지원 : 응용 별 패키징을 통하여 효율적인 툴을 제공하고 유연한 플러그인 구조 지원으로 새로운 기능을 쉽게 추가 할 수 있으며 다양한 사용자를 만족 시킬 수 있다. 또한 다양한 계산 자원과 연동이 가능하다.
- 보안 : X.509인증서를 사용하여 클라이언트 인증을 하게 되고, 인증서의 교환으로 여러 site에 접속 가능 하다. 또한 사용자 데이터베이스를 사용하여 그리드 자원에 대한 사용자의 권한을 관리한다.
- Meta-Computing 가능 [8]

4. 다양한 물리 수치해석 프레임워크 구축

UNICORE 프레임워크 개발 도구가 사용자로 하여금 어느 워크스테이션이나 인터넷 상의 PC로부터 특정 작업을 생성, 제출, 그리고 제어 할 수 있도록 해준다고 앞장에서 설명 하였다. 이 장에서는 이러한 UNICORE에서 최신 버전인 UNICORE6를 기반으로 수치해석 기법 연구를 위한 프레임워크의 전체 구조와 기능에 대해서 알아보고 프레임워크의 개발과 개발된 프레임워크상에서 실험을 수행하는 내용을 다룬다.

4.1 수치해석 프레임워크

그림 2는 UNICORE의 시스템 구조를 나타내고 있다. 사용자는 URC(Unicore Rich Client)를 기반으로 하고 있는 수치해석 프레임워크 인터페이스를 통하여 응용에 맞는 연구 환경을 선택하게 된다. 작업을 생성 한 후에는 각 응용마다 제공되는 그리드 자원에 접근 하기 위해서 실제 작업을 수행할 타겟 시스템을 선택 한다. 타겟시스템이 선택되면 해당 시스템으로 작업을 제출하게 되고 서버에 접근하기 위해 보안 및 접근 포인트인 게이트웨이를 통하여 사용자 인증을 거쳐 서버인 UNICOREX에 접근 한다.

서버의 게이트웨이를 통과해 전송된 작업은 서버에 있는 XNJS(eXtended Network Job Supervisor: 서버에서 작업을 제어하는 핵심적인 역할을 담당하는 컴포넌트로 작업 관리, 스토리지 관리, 데이터 전송 서비스, 스케줄링과 같은 서비스들의 세트를 제공) 로 전송되고 XNJS는 서비스에 대한 사용자의 인증 정보를 담고 있는 XUUDB와 상호작용을 통해 서비스에 대한 접근을 확인 한 후 사용자가 선택한 타겟 시스템에 작업을 매칭 시킨다.

그 다음 XNJS는 사용자가 제출한 추상적인 작업 정보에 대하여 IDB(Incarnation DataBase)를 통해 실제 실험수행을 위한 정보를 얻고 이를 작업과 매칭된 타겟 시스템에 제출 하게 된다.

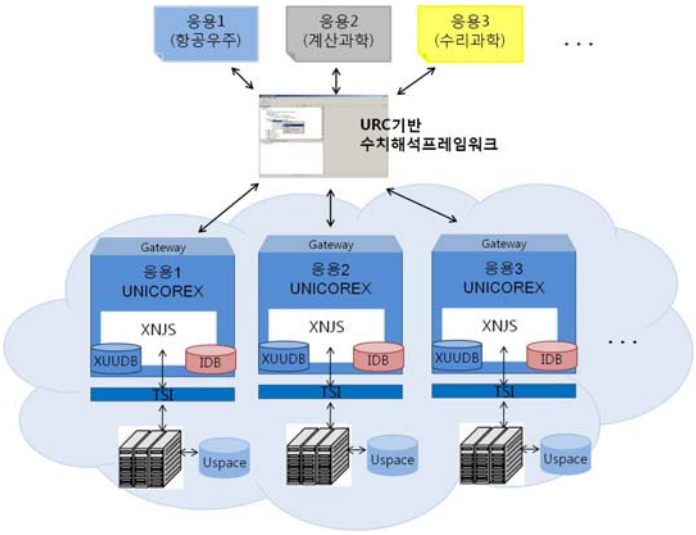

그림 2. 수치해석 프레임워크 구조[9]

TSI(Target System Interface)는 로컬 운영체제와 XNJS의 상호작용을 통하여 XNJS에서 IDB에 의해 구체화된 작업을 가져오고 그것을 타겟 시스템에서 실행 한다. 작업이 실행 되면 일시적인 작업공간인 Uspace에 특정 작업과 관련된 모든 데이터가 저장이 된다.

이러한 수치해석 프레임워크는 현재 3개의 응용만을 지원 하고 있지만 응용분야가 추가됐을 때 그에 따른 응용 어플리케이션 구성 및 환경을 쉽게 추가구성이 가능하여 확장성 있는 구조를 가지고 있다.

4.2 통합 연구 프레임워크 개발

4.2.1 GridBean

GridBean[10]은 GPE(Grid Programming Environment)[11]중의 하나로 그리드 클라이언트를 위한 확장된 프로그래밍 환경이며, High-level 그리드 API에 기반하고 있다. 작업 명세를 생성하고, 플러거블(pluggable)한 GUI를 제공해주며, 기존 UNICORE의 플러그인 개발 방법이 아닌 GridBean을 사용함으로써 JSDL, BPEL, 웹 서비스와 같은 그리드 표준을 지원하고, UNICORE 그래픽 인터페이스인 URC에서 독립적인 클라이언트들을 개발 할 수 있도록 해준다.

조금 더 자세히 살펴보면 그림 3과 같이 GridBean은 응용에 특화된 GUI를 개발할 수 있는 GridBean 플러그인과 이런 GUI를 통해 생성된 작업의 수행과 관련해서 중요한 역할을 하는 GridBean 모델로 나누어진다.

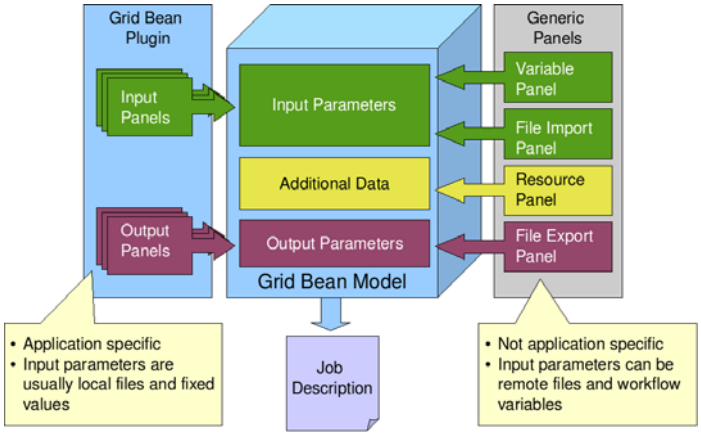

그림 3 GridBean 구조

GridBean 모델에서는 입출력 파일 및 파라미터들을 정의하고 실험수행에 따른 데이터를 저장하여 작업 명세 파일(JSDL or BPEL)을 구성할 수 있도록 해준다.

GridBean 플러그인의 경우 자바 스윙 기반의 독립 소프트웨어 클라이언트나 포틀릿 기반의 웹 포탈 클라이언트를 개발할 수 있는 API를 제공한다. GridBean 플러그인을 이용하여 개발된 독립 소프트웨어 GUI는 컴포넌트와 GridBean 모델을 연결시켜주는 것이 필요한데 이것을 위하여 link*Component*()함수를 제공한다. 또한 해당 컴포넌트들에서 입력 받은 파라미터 값을 GridBean 모델에 저장하기 위한 transrator()와 해당 값의 유효성 검사를 위한 validator()를 사용하도록 하고 있다.

그림의 오른쪽 Generic Panels는 GridBean을 이용하여 클라이언트를 개발하였을 때, 모든 응용에 공통적으로 필요한 기능인 파일 입출력, 자원선택, 파라미터 값 확인 및 수정 기능을 지원하는 패널들을 기본적으로 제공해주는 것을 나타낸다.

본 연구에서는 Generic Panels을 통해 여러 응용을 선택하도록 하는 대신 응용의 복잡성을 고려하여 응용마다 독립적으로 Panels 구성을 해줌으로써 독립적인 응용 수행 환경이 이루어 지도록 하였다.

4.2.2 기본형 통합 연구 프레임워크 개발

우리가 목표로 하는 통합된 워크벤치 프레임워크를 개발하기 위하여 위에서 설명한 GridBean을 이용하여 다물리 수치 모델 해석을 위한 URC기반 기본형 사용자 인터페이스를 개발 하였다. GUI의 디자인은 각각의 응용 분야와의 의견 조율을 거쳐 설계하였으며 그림 4는 설계를 바탕으로 우리가 개발한 기계항공 분야의 1D Euler 수치해석 기법 실험을 위한 사용자 인터페이스를 보여준다. 기본적으로 프레임워크의 사용자 인터페이스는 응용의 수치해석 기법 종류별로 하나의 인터페이스와 하나의 데이터 모델(GridBean 모델)이 존재한다. 하지만 수치해석 기법을 가지고 실험을 수행하는 데에는 여러 가지 방법이 있으며, 실험방법 선택에 따라 실험수행에 필요한 파라미터가 달라지게 된다.

사용자 편의를 위해 실험방법선택에 따라 이벤트를 주어 사용자 인터페이스의 컴포넌트들이 동적으로 구성되도록 개발하였다. 또한 GridBean 모델에서 이러한 실험들의 작업명세와 파라미터 관리를 보다 정확하고 효율적으로 관리, 수행할 수 있도록 하기 위해서 실험 방법 별로 하나의 파라미터 셋을 정의하지 않고 실험방법들마다 똑같이 적용되는 공통된 부분과 각각의 방법 별로 추가되어야 하는 부분을 분리하여 필요할 때에 사용되도록 개발하였다. 또한 응용에서 실험에 공통적으로 적용되는 전처리와 후처리 부분에 필요한 전후처리기를 연동하여 가시화가 필요한 부분에 대하여 가시화를 시켜주었다.

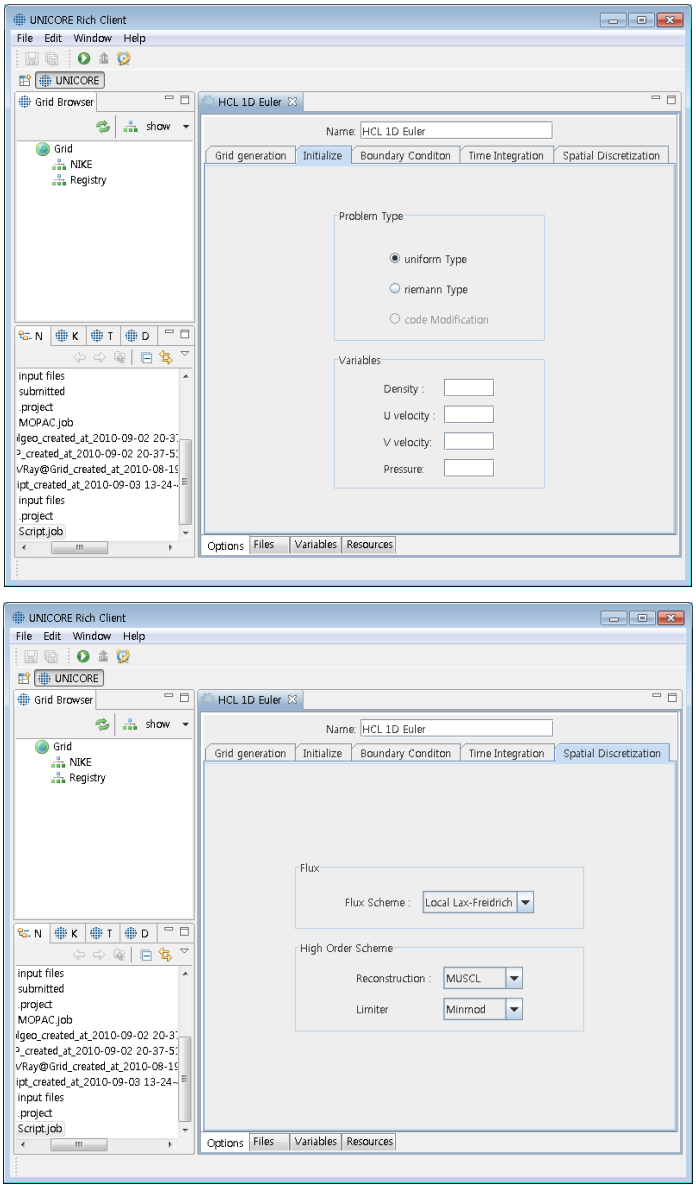

그림 4 기계항공 응용에 대한 사용자 인터페이스 사례 (Hyperbolic Conservation Law UI)

미들웨어의 경우는 UNICORE에서 제공하는 것을 그대로 사용하였으며, UNICORE 미들웨어에서 우리가 제공하는 응용의 실험을 수행할 수 있도록 응용 정보를 저장하고 있는 IDB의 simpleidb 파일에 세 가지 응용의 다양한 실험들에 대한 이름, 버전 및 실험수행에 필요한 실행파일위치, 파라미터 정보들을 추가하였다.

그리고 우리가 개발한 프레임워크에 대하여 인증된 사용자만이 사용할 수 있도록 인증키를 발급하였고, 유니코어 서버에서 UNICOREX와 계정을 관리하는 XUUDB를 통해 발급한 키와 사용자들을 관리 할 수 있다.

이로써 클러스터를 사용하는 실험에 대한 환경구축 및 응용 별 실험 환경 그리고 이를 통합한 프레임워크 개발은 완료되었다. 그러나 UNICORE가 그리드 자원 활용을 위한 워크벤치로 웹 서비스를 기반으로 실험수행 환경이 제공되기 때문에 사용자가 간단한 응용 실험을 개인 PC에서 실험수행을 하는 경우에는 개인PC에도 서버를 설치하여야 하는 불편함 및 어려움이 있다. 그래서 우리는 개인PC에서도 사용자가 서버 설치 및 기타 환경설정의 부담 없이 우리의 프레임워크를 사용할 수 있도록 UNICORE 서버가 이미 설치된 환경을 가상 이미지로 작성한 VM이미지를 추가로 제공하였다.

4.3 기본형 통합 연구 프레임워크에서의 실험수행

수치해석을 수행하는 3개의 응용은 전처리 시뮬레이션처리 그리고 후처리의 공통적인 과정을 거치게 된다.

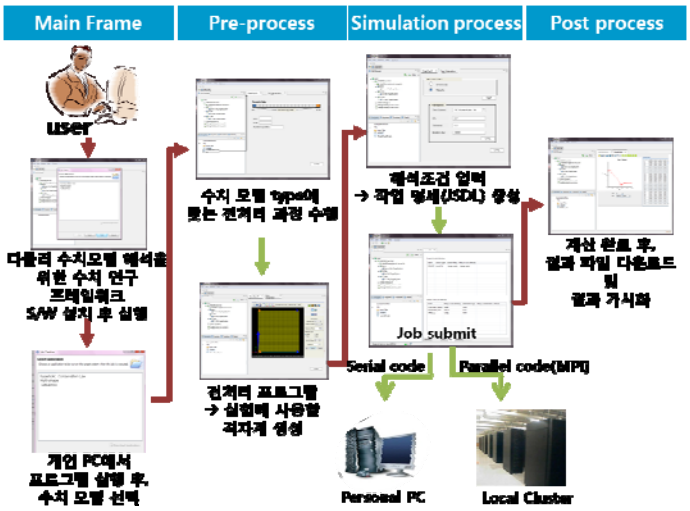

그림 5 기본형 통합 연구 프레임워크 실험수행 시나리오

그림 5는 우리가 개발한 프레임워크의 사용 시나리오이다. 처음에 사용자는 여기서 제안한 수치해석용 프로그램을 개인PC에 설치하고 실험을 수행할 때 어떤 응용 분야의 수치해석 기법을 사용할 것인지를 선택하게 된다. 그 다음으로 사용자는 수치해석 기법의 수치모델 형태에 맞는 전처리를 수행하여 격자를 생성하거나 업로드하고 시뮬레이션 단계에서 실험방법을 포함한 해석조건을 입력하며 마지막으로 작업이 수행될 자원을 선택하게 된다. 그러면 입력된 해석조건을 가지고 GridBean 모델에서 작업을 명세한 JSDL파일이 사용자가 선택한 자원으로 제출되어 실험을 수행하게 된다. 실험 수행이 완료되면 클라이언트에 실험이 완료됐다는 표시가 되고 결과 파일을 클라이언트(PC)로 다운로드 하여 확인하게 된다. 특히 가시화가 필요한 결과 파일에 대하여서는 가시화 툴을 제공해 확인할 수 있다.

5. 결 론

본 연구에서는 물리 현상에 대한 수치해석을 수행하는 응용들에 대해 응용 별로 e-사이언스 환경을 구축하고 이를 하나의 통합된 환경하에서 제공하는 프레임워크에 대해 논의 하였다. 본 개발에 앞서 현재 응용 연구의 문제에 대한 충분한 이해를 통하여 효율적인 연구 수행을 위한 프레임워크를 설계하였다. 수치해석 프레임워크는 UNICORE 개발 도구를 기반으로 하여 구성하였고 단일 환경에서 응용 별로 각각의 그리드 자원의 접근 및 작업을 수행, 관리, 모니터링 할 수 있다. 이 시스템은 현재 국내에서는 수치 해석 전용으로 처음 시도되고 있는 연구로 비슷하지만 다른 분야의 응용을 공통의 인터페이스를 통하여 통합된 환경에서 제공한다는 점에서 중요한 의미를 갖는다. 또한 본 프레임워크를 이용하여 응용수학 분야와 과학 분야에서는 수치 기법 개발에 있어 효율성과 편의성 향상이 기대된다.

향후 이 프레임 워크는 연구대상이 고차원으로 확대되고, 수치해석 기법이 다양해 짐에 따라 그에 따른 작업 환경을 확장할 것이다. 또한 3가지 분야 응용 이외에도 유사한 시나리오를 갖는 응용에 대해서 추가적으로 응용 어플리케이션을 프레임워크에 확장할 계획이다. 더 나아가서는 독립 소프트웨어 클라이언트뿐만 아니라 포탈 클라이언트를 제공할 것이다.

6. 참고 문헌

[1] http://www.fz-juelich.de/jsc/hgfgroup/show_attach.php?pubid=32

[2] 김남규, 김주범, 이준학, 임상범, “응용 연구를 위한 e-Science 서비스 프레임워크 설계”,한국 인터넷 정보학회 2007 임시총회 및 춘계학술발표대회 제8권 제1호, pp. 373~378, 2007

[3] UNICORE, www.unicore.eu

[4] http://www.isgtw.org/?pid=1001251
[5] gLite, http://glite.web.cern.ch/glite/
[6] Globus, http://www.globus.org/
[7] 김태훈,이동일,허의남,오재호,"Grid 기반 기상 모델 구현", 2005년도 한국기상학회 봄철 학술대회 논문집,pp.392~393, 2005
[8] http://www.unicore.eu/documentation/
[9] http://www.unicore.eu/unicore/architecture.php
[10] Development of GridBeans , http://www.unicore.eu/documentation/presentations/unicore6/files/2007-07-26-DGrid-UNICORE6GridBeans.pdf
[11] GPE Project Page, http://sourceforge.net/projects/gpe4gtk/
[12] Wasim Bari, Ahmed Shiraz Memon, and Bernd Schuller,"Enhancing UNICORE Storage Management Using Hadoop Distributed File System",EURO-PAR 2009 - PARALLEL PROCESSING WORKSHOPS,pp. 345~352, 2009