

전산유체 해석 및 설계를 위한 웹기반 워크플로우 환경

김서영 강혜정 윤경아 허신영 정소이 김윤희 김중암⁰
숙명여자대학교 컴퓨터과학과 서울대학교 기계항공공학부⁰
{sssyyy77, hjkang, yoonka, hurcy, yd95068,
yulan}@sookmyung.ac.kr, chongam@snu.ac.kr

A Web-based Workflow Environment for CFD Analysis and Design

Seoyoung Kim, Hyejeong Kang, Kyoung-a Yoon, Cinyoung Hur,
Soyi Jeong, Yoonhee Kim, Chongam Kim⁰
Dept. of Computer Science, Sookmyung Women's University⁰
Mechanical and Aerospace Engineering, Seoul National University⁰

요약

컴퓨터 인프라의 빠른 발전과 전산 기법의 발달에도 불구하고, 개개인의 과학 응용 연구자 측면에서는 여전히 비효율적이고, 특정 분야의 연구만 수행할 수 있는 제한성 때문에 유연한 연구 환경에 대한 요구가 높아지고 있다. e-Science 기반의 연구 환경을 공동으로 활용하기 위해서는 다분야 간 연구 활용도를 고려한 맞춤형 연구 환경을 구성하는 기술이 필요하다. 본 논문에서는 여러 연구를 수행할 수 있다는 e-Science 연구 환경의 궁극적 목표에 부합하는 유연한 통합 연구 환경을 제시한다. 특히 여러 과학 응용 연구 분야 중에서도 계산 반복적이고 개발 과정 중에 비용 및 시간 소비가 큰 항공 우주 분야를 대상으로 하여 확장된 맞춤형 전역 연구 환경을 제안한다. 이는 연구자들이 추가적 지식 없이 쉽고 다양한 연구 활동을 가능하게 하며, 실험 규모 확장에 따른 한계를 개선할 수 있다. 또한 워크플로우 기반의 설계 환경을 제안하여 다단계 비행체 설계 환경을 포털에 확장함으로써 더욱 정확하고 생산성을 높이는 환경을 지원한다. 이같이 제안된 환경은 각 연구자의 실험과 설계의 정확도를 높여 기존 환경의 한계를 극복하며 전문성을 높이도록 도와준다.

1. 서론

항공 우주 분야에서는 전산 유체 역학 (Computational Fluid Dynamics: CFD)[1]을 통하여 효율적이고 안정적인 비행체 형상을 개발하기 위한 시도가 활발하게 이루어지고 있다. 유체 유동 문제 해석을 이용한 비행체 설계 연구는 복잡한 계산을 반복적으로 실행하고 분석하므로 대용량의 컴퓨팅 자원과 함께 거대한 실험 환경을 필요로 하게 된다. 이러한 요구에 맞게 수치 해석 시뮬레이션을 수행하고 원격 실험 환경을 지원해주는 포털 서비스인 e-AIRS (e-Science Aerospace Integrated Research System) 시스템이 2005년부터 개발 되어 왔다[2].

이 시스템은 CFD 및 풍동 실험을 이용해서 비행체 공력 해석 및 설계, 원격 실험 모니터링 등의 연구 환경을 제공한다. 하지만 이 서비스는 간단한 형상에 대한 수치 해석만을 수행하고 응용 자체가 비교적 간단하여, 심화 연구 중심인 연구용으로 사용되기 보다는 교육용으로 사용하기에 적합하다. 즉, 실제 비행체 개발을 하는 연구자들 입장에서는 기능이 제한적이고 연구에 활용하는 데에 한계를 갖는다.

따라서 본 논문에서는 더욱 복잡해진 형상에 대한 수치 해석 및 설계를 지원하기 위해 현재 존재하는 포털 서비스들의 한계를 개선하고 워크플로우 중심의 프레임워크를 적용한 포털 시스템을 구축하였다.

이를 통하여 비행체 공력 설계 연구 분야에서 설계의 정확도를 높이기 위한 다단계 설계 기법과 같은 심화 연구를 가능하게 하였다. 또한 워크플로우 단

1) 교신저자 (Corresponding Author): 김윤희

*이 논문은 2009년도 정부(교육과학기술부)의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 연구임(No.2009-0084669).

위의 실험 설계를 통해 재사용성과 규모 확장성이 보장된 풍부한 실험 서비스를 웹을 기반으로 구축하였다.

본 논문의 2장에서는 관련 연구를 소개하고 3장에서는 워크플로우 지원 시스템에서 비행체 설계에 워크플로우가 어떻게 적용 되는지, 또 이를 위한 데이터 관리와 실행을 위한 지원 방법에 대해서 살펴보도록 하겠다. 그리고 4장에서는 확장된 웹 기반 통합 실험 환경에서 워크플로우 시스템이 어떻게 유체 해석 서비스와 실험 설계 서비스를 수행 하고 있는 지에 대하여 설명하고 마지막으로 5장에서는 결론 및 향후 과제에 대해서 정리 하였다.

2. 관련 연구

워크플로우 중심으로 작업을 구성하고 관리하는 것은 연구 규모의 확장과 각 작업의 모니터링을 용이하게 하므로 이에 연관된 연구가 다수 존재한다. 특히 워크플로우 관리도구와 워크플로우가 적용된 통합 시스템에 대한 연구가 다양하게 시도되었다.

워크플로우 관리 도구는 서비스의 재사용과 공유를 통해 연구자들이 서로 협업할 수 있는 이점을 기반으로, MyGrid 프로젝트의 Taverna[3]를 비롯하여 Kepler[4], BioWMS[5] 등의 다양한 도구들이 오픈 소스로 개발되어 사용되고 있다. 이러한 워크플로우 관리 도구는 공간적으로 떨어진 서로 다른 서비스들을 웹 서비스 기술을 기반으로 하여 하나의 작업 공간에서 연구 과정을 모델링하고 자동화 할 수 있도록 도와준다.

또한 과학 응용 분야에서 사용되는 많은 도구와 데이터베이스들이 웹 서비스 형태로 제공되어 워크플로우 관리 도구에서 사용되고 있다. 다수의 전산 과학 응용 분야 연구 중 생물정보학 또는 분자 생물학과 같은 분야에서는 기본적으로 사용되는 웹 서비스의 개발과 안정적인 서비스 제공이 필수적이라 할 수 있다.

워크플로우를 중심으로 관리하는 통합 연구로는 대표적으로 Condor프로젝트의 DAGMan[6]이 있다. DAGMan은 분산 컴퓨팅 환경에서 효율적인 워크플로우의 관리 기능을 제공하기 위해 워크플로우에 의존적인 자원들을 스케줄링 하는 기능을 제공한다. 하지만 작업들을 재사용하기 위한 기능을 제공하지 않는다. 여기서 비롯된 Pegasus 프로젝트의 DAX는 각 워크플로우를 재사용, 재구성이 가능하게 하도록 DAG(Directed Acyclic Graph)를 XML 스키마로 표현한 연구이다. 본 연구에서는 DAX를 사용하여 워크플로우를 구성하는 여러 작업들 간의 관계 및 모니터링을 명세 하는 데에 이용한다.

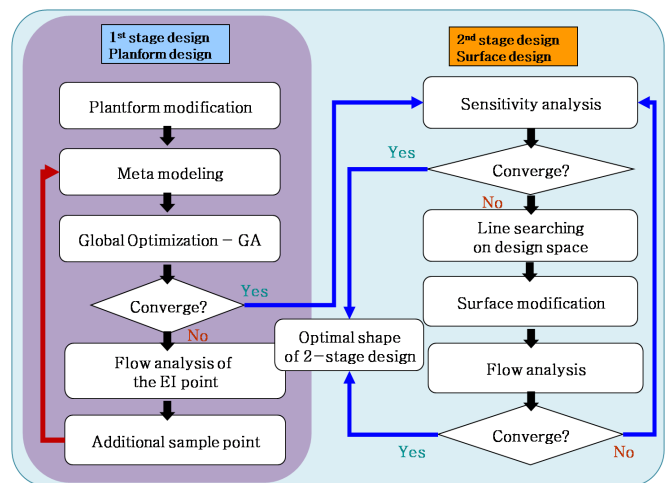
3. 워크플로우 지원 시스템

워크플로우는 단일 작업이 아닌 여러 프로세스들로 복잡하게 구성되거나 반복적으로 수행되는 작업들을 하나의 흐름으로 기술한 것이다. 이러한 워크플로우로 분산된 환경에서 명세하고, 실행, 모니터링하도록 구성되어 있는 것이 워크플로우 시스템이다.

워크플로우를 사용함으로써 특정 목표에 도달하기 위한 작업 프로세스의 전체 혹은 일부를 이미 정의된 규칙을 통하여 자동화 시킬 수 있다.

3.1 워크플로우 기반 비행체 설계

복잡한 비행체에 대한 유체 해석 및 설계를 위해서는 여러 단계의 계산 수행 및 확인 과정을 거쳐야 한다. 그림 1과 같이 최적화 조건만을 고려한 설계의 수행은 적어도 2 단계의 과정이 요구된다.



[그림 1] 2-단계 비행체 최적 설계 기법

또한, 이 설계 과정에서는 첫 번째 단계의 성공 여부에 따라 두 번째 단계인 국소 최적 설계가 수행되는 의존성(dependency)이 발생하는 특성을 갖는다. 따라서 연구자 입장에서 사용이 편리하고 습득이 쉬운 인터페이스 제공이 필요하다.

비행체 설계를 위한 유체 해석은 일반적으로 대용량의 입력 파일을 사용하여 여러 단계에 걸친 계산이 수행 되고 각 단계마다 막대한 양의 출력파일이 발생된다. 가령 한 번의 설계를 위해서는 한 입력 파일 당 3~4 GBytes의 크기를 갖으며 이를 이용해 6단계의 해석 단계를 거치고, 각 단계마다 4 GByte 이상의 크기를 갖는 파일을 출력한다. 이 전체 과정을 수행하는 데에는 약 3~4일 정도의 오랜 시간이 소요된다. 따라서 이 같은 시나리오의 작성과 수정 및 재사용을 위해서는 워크플로우 환경의 제공이 필수적이다.

본 논문에서는 유체 해석 연구를 위한 워크플로우 중심 설계 시스템을 보여, 향후 2 단계 설계 기법 적용을 목표로 하였다.

3.2 워크플로우 데이터 관리

워크플로우를 기반으로 한 설계 환경에서 실험과 연산의 반복적인 수행이 원활 하기 위해 시뮬레이션-워크플로우-케이스(case) 구조를 제안하였다. 본 논문에서 대상으로 한 비행체 설계를 위해서는 입력 파일에 대한 최적화 계산 과정을 거친 후 해석자로 계산을 수행하고 이에 따른 결과물을 이용하여 시뮬레이션을 한다. 이 설계의 전체 과정을 하나의 시뮬레이션이라고 한다면, 설계 수행을 위한 각 단계들의 조합은 워크플로우 단위로 관리 되도록 하였다. 이는 사용자가 하나의 시뮬레이션 내에서 워크플로우를 자유롭게 편집 및 구성을 가능하도록 하기 때문에 실험의 재사용, 재구성이 가능하다. 더불어 사용자는 재구성된 워크플로우를 저장하는 것이 가능하여 결과를 비교 및 분석하는 데에 더욱 효율적이다.

3.3 워크플로우 실행을 위한 지원

워크플로우를 비행체 설계 환경에 적용하기 위해서 각 단계별 의존성과 입력, 출력 정보가 명시된 DAX[7] 로 표현 하였다. 이는 DAG(Direct Acyclic Graph)의 형태로 연결 되어 있어 작업을 정의하고 자동화 된 컨트롤 흐름을 갖도록 한다. DAX를 이용한 구조에서의 장점은 의존성 표현이 가능하여 실험의 재구성을 용이하게 해준다는 것이다. 사용자가 기존의 구성한 실험들을 바탕으로 새로운 환경을 재구성을 할 때 각 의존성만 상세해 준다면, 이는 하나의 큰 워크플로우로 구성할 때 손쉬운 실험 구성이 가능하다.

유연한 워크플로우 실행을 위해 편집 기능이 작은 단위로 가능하게 하였다. 일반적으로 응용 연구자들은 자신만의 워크플로우를 가지고 있으며 그것의 전체 또는 일부를 컴퓨터로 처리하거나, 각 단계마다 일정한 규칙에 의해서 혹은 연구자들의 직접적인 판단을 통해 워크플로우의 방향이 결정되곤 한다.

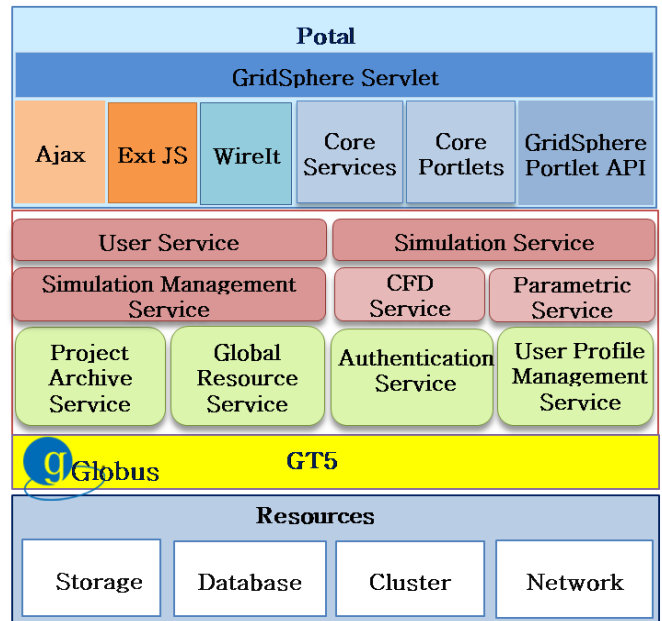
따라서 워크플로우 흐름 중 사용자의 개입이 요구된다는 응용의 특성을 고려하여, 실험 전체를 자동화 하는 것이 아닌 일정한 단위의 워크플로우들을 통합하도록 손쉽게 표현되어 설계의 확장성과 용이성을 높였다.

4. 웹 기반 통합 실험 환경

포털은 항공 우주 응용 분야의 문제 설정과 작업

수행을 사용자가 쉽게 접근 할 수 있도록 하는 서비스로서 추가 적인 지식이나 소프트웨어의 설치 없이도 쉽게 사용할 수 있도록 제공한다.

이를 위해 미들웨어로는 Globus Toolkit2 와 Globus Toolkit4를 업그레이드 한 Globus Toolkit5를 기반으로 하여 더욱 안정적인 실험이 지원되도록 하였다[8]. 이로써 GT2 에서 잦은 인터페이스 오류와 보안적인 측면 및 기능 개선이 지원되어 웹상에서 더욱 안정적인 연구 환경을 보였다.



[그림 2] 워크플로우가 추가된 포털 구조도

4.1 워크플로우 기반 유체 해석 서비스

CFD (Computational Fluid Dynamics) 는 특정 방정식에 수치 해석 기법을 적용하여 유체의 동적인 움직임에 대한 문제를 컴퓨터를 이용하여 풀고 해석하는 것을 의미한다. 전산 유체 역학은 실제 시험 기법에 비하여 다양한 형상의 해석이 가능하고 해석 시간을 절약 할 수 있으며 결과에 대한 예측 값 도출이 가능하다는 면에서 비교적 이점을 가지고 있다. 하지만 현실적이고 복잡한 물리적 현상에 대한 해를 구하기 위해서는 고성능 계산 자원을 필요로 하므로, 대규모 자원을 활용하여 그 결과를 편리하면서도 효율적으로 확인할 수 있는 시스템이 요구된다.

유체 해석 시스템은 크게 전처리(Pre-Process), 시뮬레이션 처리(Simulation Process), 후처리(Post - Process)의 세 단계로 이루어진다. 2 단계 설계 기법을 향후 적용하기 위해 더욱 정밀한 실험 수행이 가능하도록 해석 서비스 기능을 전처리 과정에 추가하였다. 기존 과학 응용 포털 시스템에서 전 처리에

해당하는 과정은 간단한 계산을 지원하여 수행에 필요한 작은 용량의 입력 파일을 생성하거나, 연구자 각자가 이미 생성해 놓은 입력 파일을 업로드 하는 방식이었다. 즉 유체 해석 시스템에 적용하였을 때 사용자가 해석하고자 하는 대상과 관련한 간단한 격자 계(Mesh)를 직접 모델링 하거나 격자 파일을 업로드 하는 것까지의 과정을 의미하였다. 그러나 이 논문에서는 심화된 설계 연구를 하는 사용자를 위한 시스템을 제안하고 있으므로 대용량의 복잡한 형상 처리와 입력 파일에 대한 처리가 가능하도록 하나의 큰 단계로 제공함으로써 심화 연구를 위한 확장된 환경을 제공 하였다.

사용자가 미리 구성된 격자 계 업로드를 통하여 격자 파일이 적절한 격자 계인지 확인, 분석 하는 해석 단계가 전처리에 확장 되어 구성되었고 이는 그림 3 에서 볼 수 있다. 이 격자 계를 확인하고 분석 하는 과정에서 계산 처리를 함으로써 최적화 과정을 거치게 되는데, 이 과정은 각각 선택적이고 반복적으로 수행 하는 것이 가능하도록 사용자의 사용과 관리의 편의를 고려해 워크플로우를 지원하였다.

이렇게 최적화 분석에서 워크플로우를 제공함은 분석에서의 시간 소비를 줄일 수 있고, 미리 해석 단계를 선택 할 수 있도록 하여 단계별 반복적인 수행이 편리하고 자동성의 제공으로 해석 과정의 효율성을 높이기 위함이다.

4.2 워크플로우 기반 실험 설계 서비스

본 논문의 3절에서 포털 시스템이 2 단계로 구성된 실험 서비스의 반복적이고 사용자의 개입을 필요로 하는 특징에 적합한 워크플로우 모델을 제공하고 언급하였다.

이를 위해 포털 시스템에서는 웹 기반의 워크플로우 개발 도구 중에서도 자바스크립트를 기반으로 하여 동적인 웹페이지 작성에 유용한 Wire-It[13]으로 포털 시스템에 특화된 워크플로우 편집환경을 개발 하였으며, 이는 사용자가 특별한 소프트웨어를 설치 하거나 따로 복잡한 기능을 익히지 않고 워크플로우의 기본적인 사용법과 실험 설계의 흐름을 아는 것 만으로도 쉽게 워크플로우를 작성할 수 있도록 하였다.

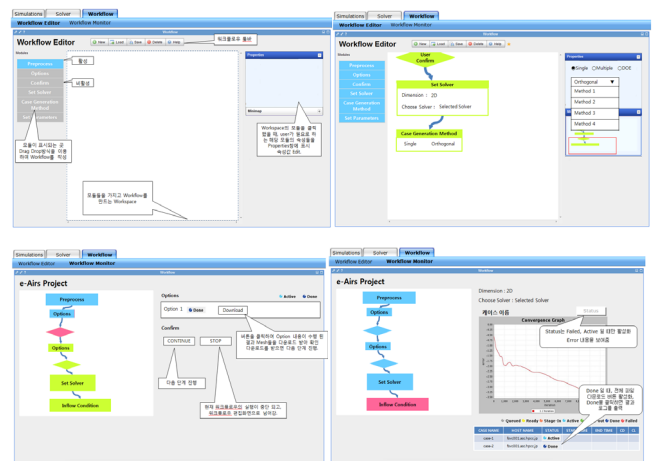
워크플로우 편집 모듈은 격자 사용방식 선택, 시뮬레이션 이름 정의, 격자 선택, 격자 최적화 옵션 선택, 솔버 선택, 유동 변수 입력 등 포털 시스템의 메뉴 구성에 따라 정의되어 있으며, 각각의 모듈 속성 값을 편집하여 사용자가 원하는 실험 모델을 설계할 수 있다.

일단 워크플로우 편집기를 이용하여 설계된 실험은

워크플로우의 연결에 관한 정보가 명세된 JSON (Java Script Object Notation)[14] 파일 포맷으로 저장되며, 이것은 다시 워크플로우를 실행하고 관리하는 단위가 되는 DAX 파일 포맷으로 변환되는데, 이 파일 포맷 변환에 관한 개발은 현재 진행 중에 있다. 또한 기존의 순차적 방식으로 설계된 작업들도 저장이 된 후에 워크플로우 명세 스키마인 DAX로 변환하여 관리해줌으로써 유연하게 작업을 관리할 수 있도록 하였다.

워크플로우 서비스는 위의 편집 서비스뿐만 아니라, 워크플로우의 형태를 이용하여 실행중인 실험의 진행 정도를 표시해 주고 사용자의 개입이 필요한 모듈이 실행 중일 때, 사용자가 적절히 개입할 수 있도록 해주는 모니터링 서비스를 제공 하며, 이러한 가시적 표현은 사용자가 보다 투명한 환경에서 실험 할 수 있도록 해준다. 하지만 모든 실험이 실행 중에 모니터링 되는 것은 아니며, 실험들이 모니터링 되고 있지 않은 중에도 실행 될 수 있게 하였다. 이것은 실험 시간이 3~4시간에서 4~5일까지의 긴 수행 시간을 갖는 실험들에 대해서 가시적이고 투명한 모니터링 서비스를 사용자에게 제공하기 위함이다.

그림 4는 워크플로우 편집, 모니터링 환경을 포함하는 포털을 보여준다.



[그림 4] 워크플로우 편집 및 모니터링 환경

5. 결론 및 향후 과제

본 논문은 비행체의 간단한 수치 해석만을 수행 하던 단일 환경과 다르게 해석 및 설계 서비스를 제공하는 웹 기반의 워크플로우 시스템을 제안 하였다. 이는 심화된 설계 연구를 하는 사용자에게 여러 단계의 설계 과정을 자유롭게 편집 및 구성 할 수 있게 하여 사용자 제어 중심의 설계가 이루어지도록 하였다. 이로써 실험의 재사용성이 보장되므로 실험

의 실패로 인한 시간과 계산 자원의 낭비를 줄이고, 연구의 확장성 및 생산성을 높였다.

또한 이 시스템에서 특화된 워크플로우 편집 환경을 통하여 사용자에게 다루기 쉬운 맞춤형 환경을 제공하고 가시적인 모니터링 기능이 제공되므로 이 또한 연구 생산성을 높이는 데에 크게 기인할 것으로 보인다.

그와 더불어 유체 해석을 이용하는 유사 형태의 연구 분야인 화학 공학, 영상 처리 분야의 학문과 복잡한 계산의 기반이 필수인 생명 과학, 분자생물학 등에 까지 다양하게 적용하기가 쉬워 통합 연구 환경 구성이 용이할 것으로 보인다.

이로서 본 연구를 통해 얻게 될 3차원 비행체 형상의 고정 및 해석 시스템의 확장 구축으로 더욱 신뢰성 있는 결과를 얻을 수 있다

우리는 향후 워크플로우 단위의 관리에서 사용되는 DAX 파일과 사용자의 인터페이스의 연결을 위한 JSON 파일 포맷의 변환에 대한 연구를 완성지어 유연한 환경이 제공되도록 할 것이다. 더불어 현재 항공 우주 포털의 기반으로 그리드 인프라만을 지원하고 있지만, 머지않아 본 연구팀에서 진행 하고 있는 Science Cloud 인프라를 동시에 지원하여 하이브리드 인프라 서비스를 추가로 제공 할 계획이다.

이것이 현실화 되면 자원 사용에 낭비를 줄일 수 있고, 실험 환경에 대해 이미지화(Appliance)를 시킬 수 있다는 장점이 더해져 시간과 자원 낭비를 최소화 하는 실험 환경을 제공해 줄 것으로 보인다.

참 고 문 헌

[1] CFD - www.cfd-online.com
[2] 조정현, 김병상, 송은혜, 김윤희, 김종암, 정민중. “e-AIRS : 협업 및 동적 파라미터 실험을 위한 항공 우주 포털”, 『한국정보과학회 가을 학술발표논문집』 Vol.33, No.2(A), 2006. pp.552-556.
[3]<http://www.taverna.org.uk>
[4]<http://kepler-project.org>
[5]<http://www.biomedcentral.com/1471-2105/8/1/S2>
[6]Condor team, DAGMan : A Directed Acyclic Graph Manager, July 2005.
<http://www.cs.wisc.edu/condor/dagman/>
[7] E. Deelman, G.Singh, M-H. Su, J. Blythe, Y. Gil, C. Kesselman, G. Mehta, K. Vahi, G.B. Berriman, J. Good, A. Laity, J.C. Jacob and D. Katz, Pegasus: A framework for mapping complex scientific workflows onto distributed systems,

Scientific Programming Journal 13 (3) 2005 pp. 219 - 237

[8] GlobusToolkit 2.0, GT4.0, GT5.0
- <http://www.globus.org>
[9]조정현, 허신영, 김윤희, 김종암, 조근원, “e-Science 기반 사이버 교육을 위한 유체 해석 연구 시스템”, KNOM Review, Vol. 12, No. 1, June. 2009, pp. 42-50
[10] 심규호, 황선태, 정갑주, 방형우, “응용 그리드를 위한 워크플로우 시스템 설계”, International Olympiad in Infomatics , 2004, pp.388
[11]<http://eairs.kisti.re.kr/eairs/index.htm>
[12]Ext Js <http://www.extjs.com>
[13]WireIt API <http://javascript.neyric.com/wireit/>
[14]JSON- <http://www.json.org>