
계산과학 시뮬레이션을 위한 웹 인터페이스 자동 생성 시스템 개발

진두석* · 이종숙* · 조금원* · 정재유** · 정회경**

*한국과학기술정보연구원 · **배재대학교

EDISON Platform to Supporting Education and Integration Research in Computational Science

Du-Seok Jin* · JongSuk Ruth Lee* · Kumwon Cho* · Jae-You Jeong* · Hoe-Kyung Jung**

*Korea Institute of Science and Technology Information

**Paichai University

E-mail : dsjin@kisti.re.kr, hkjung@pcu.ac.kr

요 약

컴퓨터 시뮬레이션을 이용한 계산과학 응용분야 연구에서는 대용량 컴퓨팅 자원 및 고성능 네트워크 기반의 사이버 인프라스트럭처를 활용하여 복잡한 공학문제를 수치적 모델링과 대규모 계산을 통해 해결한다. 최근에는 이러한 계산과학 시뮬레이션 수행을 다수 사용자가 언제 어디서나 쉽게 접근하여 사용할 수 있도록 해주는 웹기반 시뮬레이션 수행 환경의 필요성이 요구되고 있다. 그러나 화학, 물리, 구조, 등 계산과학 응용분야의 연구자들이 웹기반 시뮬레이션 수행 환경에서 동작하는 시뮬레이션 도구를 직접 개발하기 위해서는 추가적으로 복잡하고 다양한 IT기술들을 습득하기 위한 많은 시간과 노력이 소요된다. 따라서, 본 논문에서는 응용분야 연구자들이 핵심 알고리즘 연구에만 집중할 수 있도록 웹기반 시뮬레이션 수행을 위한 웹 인터페이스 자동 생성 시스템을 제공한다.

ABSTRACT

Computational science is a field of study concerned with constructing mathematical models and quantitative analysis techniques and using large computing resources to solve the problems which are difficult to approach in a physical experimentally. Recently, a new web-based simulation environment for computational science is becoming more and more popular for supporting multi-user access without restriction of space or time, however, to develop web-based simulation applications, the researchers performed their works too much difficulty.

In this paper, we present automated web interface generation tool that allows applied researchers to concentrate on advanced research in their scientific disciplines such as Chemistry, Physics, Structural Dynamics.

키워드

Automated web-interface, Computational Science, Computer Simulation

1. 서 론

다양한 분야에서 계산과학을 이용한 연구의 필요성이 점점 증가하고 있다. 예를 들면, 기후예측, 충돌실험, 신약개발 등은 컴퓨터 시뮬레이션을 통

한 결과 예측 없이는 거의 불가능하며, 이는 계산과학의 중요성을 보여주는 단면이라고 볼 수 있다. 이처럼 계산과학 연구는 실험적으로 접근하기 어렵거나 분석하기 어려운 문제들에 대해 대규모의 컴퓨팅 자원(하드웨어, 소프트웨어, 네트워크)

즉, 사이버 인프라를 이용한 가상 시뮬레이션을 통해 문제 이해도 및 해결 능력을 증진시킴으로써 실제 실험과도 상호보완적인 역할을 수행한다.

하지만, 응용분야의 연구자들이 사용자 접근성이 우수한 웹기반 시뮬레이션 수행 환경에서 동작하는 시뮬레이션 도구를 직접 개발하기 위해서는 추가적으로 복잡하고 다양한 IT기술들을 습득하기 위한 많은 시간과 노력이 소요된다. 따라서, 본 논문에서는 응용분야 연구자들이 핵심 알고리즘 연구에만 집중할 수 있도록 웹기반 시뮬레이션 수행을 위한 웹 인터페이스 자동 생성 시스템을 제공한다.

II. 관련 연구

Rappture[1-3] 툴킷(Toolkit)은 과학기술 시뮬레이션 응용을 위한 nanoHUB[4-5]의 기본적인 소프트웨어 기반체계이다. Rappture는 나노 분야의 연구자들이 핵심 알고리즘 연구와 관련 없는 부수적인 작업을 줄여주기 위한 도구로써, 웹 기반 자동 인터페이스 생성 기능, 입력 값과 시뮬레이션 프로그램과의 연동기능 및 결과 값의 가시화 도구 등을 제공한다. 따라서, Rappture를 이용하는 연구자들은 새로운 시뮬레이션 프로그램을 개발할 때 설명서나 사용자 인터페이스 상세 설계, 소프트웨어 설치 등의 부수적인 영역보다 핵심 시뮬레이션 알고리즘에 집중할 수 있다.

연구자들이 Rappture를 이용하여 자신의 시뮬레이션 도구를 개발하여 업로드하면, 제작자 외에 다른 사용자에게 공개되어 교육 및 연구에 다양하게 사용된다. 사용자들은 Rappture에서 작성된 시뮬레이션 도구를 웹을 통해 쉽게 찾을 수 있고, 관심 있는 도구를 협력 연구하거나 사용 후 평가를 남길 수도 있으며, 해당 시뮬레이션 도구가 교육과 연구 활용된 통계 분석 정보도 얻을 수 있다.

III. 인터페이스 자동 생성 시스템

본 논문에서 제안하는 시뮬레이션 SW 웹 인터페이스 자동 생성 시스템을 이용한 시뮬레이션 응용 개발은 핵심 시뮬레이션 프로그램 코드 개발과 XML을 이용한 시뮬레이션 SW 명세서 작성으로 이루어진다. 시뮬레이션 코드 개발은 응용분야 연구자들이 문제 해결을 위해 필요한 계산수행을 처리하는 모듈로서 다양한 프로그램 언어들(C/C++, Python, Fortran, MATLAB 등) 중에 하나를 이용하여 프로그램을 작성한다. 그리고 시뮬레이션 SW 명세서는 작성된 코드가 웹상에서 사용될 수 있도록 해당 프로그램 코드에 사용되는 입력 파라미터, 출력 값에 대한 설명과 해당 프로그램 구동을 위한 명령부분이 포함된다. 프로그램

구동을 위한 명령부분에서는 입력데이터 생성을 위한 전처리기 및 해석결과 가시화 도구를 설정할 수도 있다. 그림 1은 웹 인터페이스 자동 생성 시스템을 통한 웹 서비스 사용자 인터페이스 생성 화면의 예를 보여주고 있다



그림 1. 자동 웹 인터페이스 생성 예

자동 웹 인터페이스 생성기에서 입력 값으로 사용되는 시뮬레이션 SW 명세서의 예는 그림 2와 같다. 주요 내용으로는 해당 시뮬레이션 SW에 대한 기본 정보를 표현하는 부분과 입력 파라미터의 특성을 나타내는 부분으로 구분된다. 이 중에서 입력파라미터의 속성 중에 "exposure" 값이 FALSE인 경우에는 사용자 웹 인터페이스에는 출력되지 않고 정의된 기본 값(default value)이 시뮬레이션 코드에 전달된다. 일반적인 문제 해결을 위해 사용되는 해석 코드의 입력 파라미터들은 대부분 기본 값이 사용되고, 특정한 경우에만 파라미터 전체 입력이 필요하기 때문에 자주 사용되지 않는 파라미터는 사용자 인터페이스에서 동적으로 나타나거나 숨겨질 수 있다.

```
<?xml version="1.0" ?>
<solver>
  <property>
    <name>2D_Comp</name>
    <author>dsjin</author>
  </property>
  <parameter>
    <para name="Mach_Number" type="number" default="0.8d0" />
    <para name="Reynolds_Number" type="number" default="600000" />
    <para name="AOA" type="number" default="6.0d0" />
    :
    <para name="Flow_Type" type="enum" default="Flow_type" />
    <para name="INTWRT2" type="number" default="20000" />
    <para name="MUSCL_ON_OFF" type="bool" default="1" exposure="false"/>
  </parameter>
  <enum name="Flow_type" default="-1">
    <case_id="-1" _value="invidic flow(Euler)"/>
    <case_id="0" _value="laminar flow(Navier-stokes)"/>
    <case_id="1" _value="turbulent flow"/>
  </enum>
</solver>
```

그림 2. 시뮬레이션 SW 명세서 예

그림 3은 자동으로 생성된 시뮬레이션 수행 웹 인터페이스를 나타낸다. 첫 번째는 입력과일 생성을 위한 전처리기와 계산을 수행하는 해석 SW 그리고 결과파일 가시화 도구를 선택하는 위크플로우 생성 단계를 나타낸다. 두 번째는 선택된 해석 SW의 명세서를 분석하여 사용자 입력 인터페이스가 생성된 예이며, 세 번째는 입력된

파라미터 정보들을 조합하여 최종적으로 계산 수행을 하기위한 작업 제출 정보를 나타낸다.

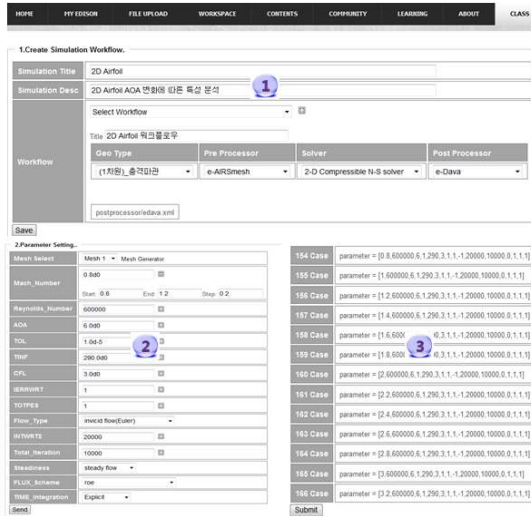


그림 3. 자동 생성된 웹 인터페이스 예

V. 결 론

본 논문에서는 응용분야의 연구자들이 웹기반 시뮬레이션 수행 환경에서 동작하는 시뮬레이션 SW를 개발할 때 사용자 인터페이스 상세 설계, 필요한 소프트웨어 설치 등 복잡하고 다양한 IT 기술 등의 부수적인 영역보다 핵심 시뮬레이션 알고리즘에 집중할 수 있도록 웹 인터페이스를 자동으로 생성해주는 도구를 제안하였다. 즉, 본 논문에서 제안하는 웹 인터페이스 자동 생성 도구와 같은 부가적인 SW의 제공은 응용과학 분야를 연구하는 연구자, 교수, 학생 등이 인터넷을 통해 공개되어 교육 및 연구에 다양하게 활용할 수 있다. 또한, 관심 있는 시뮬레이션 SW를 협력 연구하거나 활용된 통계 분석정보를 바탕으로 해당 알고리즘의 우수성을 검증할 수도 있을 것이다.

참고문헌

[1] Rappture, <http://rappture.org>
 [2] R. Olivares-Amaya, R. Salomon-Ferrer, et al., "Creating a GUI for Zori, a Quantum Monte Carlo Program," *Computing in Science & Engineering*, vol. 11, no. 1, pp. 41-47, 2009.
 [3] W. Qiao, et al., "Hub-based simulation and graphics hardware accelerated visualization for nanotechnology applications," *IEEE Trans. Vis. Comput*

Graph., vol. 12, no. 5, pp. 1061-1068, 2006.

[4] nanoHUB, <http://nanohub.org>
 [5] B. Haley, G. Klimeck, M. Luisier, et al., "Computational nanoelectronics research and education at nanoHUB.org," *Journal of Computational Electronics*, vol. 8, no. 2, pp. 124-131, June 2009.