슈퍼컴퓨터 기반 가상 척추 시뮬레이션 환경 개발

Development of e-Spine Simulation Environment based on Supercomputers

남 덕 윤, 구 기 범*, 조 용 성, 임 재 형, 문 종 배, 조 금 원
한국과학기술정보연구원

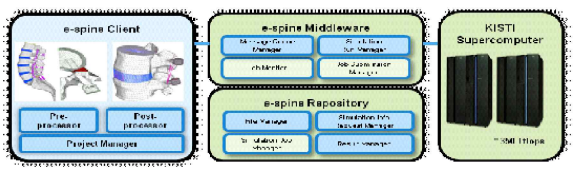
Dukyun Nam, Gibeom Gu, Youngseong Cho, Jae Hyoung Lim, Jongbae Moon, and Kum Won Cho
Korea Institute of Science and Technology Information

요약

슈퍼컴퓨터 기반 시뮬레이션을 수행하기 위해서는 해석 프로그램에서 받아들이는 형태의 입력 파일을 수작업으로 작성해야 할 뿐만 아니라, 명령어 기반 인터페이스에 익숙하여야 한다. 본 논문에서는 가상척추 시뮬레이션을 지원하기 위한 슈퍼컴 기반 가상 척추 시뮬레이션 환경을 소개한다.

Ⅰ. 서론

본 논문에서 제안하는 슈퍼컴퓨터 기반 시뮬레이션 환경은 컴퓨팅 자원 뿐만 아니라 정보, 실험 장치 등을 통합하여 지원하는 Science Gateway [1] 이며, 나아가 사용자들이 유용한 정보와 도구들을 추출할 수 있는 지능형 환경인 Cyber environment [2]를 지향하고 있다. 사용자들은 본 환경을 활용하여 기존의 이론이나 새로운 이론에 대해 증명하고 이해할 수 있다. 시뮬레이션 환경은 확장성과 안정성을 고려하여, 1) 사용자 인터페이스와 작업 실행 기능을 분리하고, 2) Job repository 기반으로 시뮬레이션 작업을 제출한다. 이를 위해 슈퍼컴퓨터 기반 가상 척추 시뮬레이션 환경에서는 e-Spine 클라이언트, e-Spine 미들웨어, e-Spine 저장소, 슈퍼컴퓨팅 자원으로 구성한다. e-Spine 클라이언트에서는 작업 제출에 필요한 정보, 예를 들어 모델파일, 해석프로그램 설정, 입력 파라미터 등을 입력한다. 그러면 e-Spine 미들웨어에서는 시뮬레이션 데이터 관리를 위해 설계한 데이터 모델 기반으로 데이터를 저장하여 활용하게 한다. 작업 제출 메니저에 의존적이지 않게 저장해 둠으로써, 미들웨어 서비스에서는 컴퓨팅 자원에서 지원하는 작업 제출 방식으로 작업 제출 파일을 생성하여 수행하게 한다. 이렇게 하면 사용자 인터페이스가 웹 인터페이스이던 특정 언어로 개발된 클라이언트이건 상관없이 컴퓨팅 자원을 이용하게 할 수 있다. 다음 장부터는 슈퍼컴퓨터 자원 연동 미들웨어 구조에 대해 보다 상세히 기술한다.



▶▶ 그림 1. e-Spine 시뮬레이션 환경

Ⅱ. e-Spine 클라이언트 지원

시뮬레이션을 수행하는 데 있어서 고급 사용자들은 터미널을 통해 서버에 접속하여 시뮬레이션 코드 편집 및 수행을 명령어 기반으로 수행한다. 이러한 명령어 기반 인터페이스 (Command-Line Interface; CLI)는 키보드를 이용하여 명령어들을 입력하게 되는데, 여기서 활용되는 명령어들은 매우 많을 뿐만 아니라, 단어와 심볼의 연속으로 복잡한 명령어를 완성해야 한다. 많은 명령어들을 익히고 나게 되면 매우 뛰어난 효율성과 생산성을 보이게 되지만, 이러한 명령어들은 쉽게 인지되고 기억되는 단어들이 아니기 때문에 CLI을 능숙하게 쓰게 되기까지 상당한 학습시간이 요구된다. 한편 그래픽 사용자 인터페이스 (Graphical User Interface; GUI)는 사용자들에게 프로그램과 상호작용을 할 수 있는 다양한 위젯 (Widget) 으로 명령어를 수행 할 수 있게 한다. 컴퓨터 프로그래밍에서 위젯은 컴퓨터 사용자가 상호 작용하는 인터페이스 요소이다. e-Spine 클라이언트는 상기 기술한 사용자 툴킷 기반으로 작성하며, 가상 척추와 임플란트의 메쉬 모델에 자동 중첩 기능을 제공한다. 기제작된 가상척추 모델에서 임플란트가 들어갈 위치를 임플란트 모델로 중첩을 하게되면, 클라이언트 프로그램에서 메쉬 재생성을 통해 가상척추와 임플란트가 중첩된 새로운 모델을 얻을 수 있다. 이 모델 기반으로 입력값들을 작성하여, e-Spine 미들웨어에 작업 제출을 의뢰한다.

Ⅲ. e-Spine 미들웨어

1. 실행 과정

미들웨어의 실행과정은 시뮬레이션 작업 전체의 중요한 부분을 담당하고 있다. 미들웨어의 실행과정은 클라이언트, 미들웨어, 저장소, 그리고 계산 노드 (슈퍼컴퓨팅 자원) 총 4가지 주요 요소들이 서로 상호작용한다.

미들웨어 실행과정은 클라이언트에서 전송하는 시뮬레이션 요청으로부터 시뮬레이션 결과의 다운로드까지 1) 1단계 시뮬레이션 작업 요청 단계, 2) 2단계 시뮬레이션 작업 작업 제출 단계, 3) 3단계 작업 제출된 시뮬레이션 작업 모니터링 단계, 4) 4단계 시뮬레이션 작업 완료 단계, 마지막으로 5) 5단계 시뮬레이션 결과 다운로드 단계 등 5단계로 나누어 시스템 흐름을 설계하였다.

1단계 시뮬레이션 작업 요청 단계: 인증된 사용자가 클라이언트를 통하여 시뮬레이션 작업을 요청하면 해당 요청은 시뮬레이션 입력 파일과 함께 미들웨어의 메시지 큐에 등록하게 된다. 등록된 요청 메시지는 백엔드 노드의 해당 모듈에 의해 해석되고 데이터베이스에 저장하고, 입력 파일은 파일 저장소에 저장된다.

2단계 시뮬레이션 작업 제출 단계: 미들웨어의 작업 실행 관리자가 1단계에서 클라이언트로부터 전달된 작업 요청 데이터를 이용하여 계산 노드 (슈퍼컴퓨터 및 기타 클러스터 등)에 시뮬레이션 입력 파일과 함께 작업 스크립트를 작성하여 작업을 제출한다. 제출된 작업은 해당 작업에 고유 번호를 매기고 이것을 전달받은 작업 실행 관리자는 데이터베이스의 정보를 업데이트한다.

3단계 제출된 시뮬레이션 작업 모니터링 단계: 미들웨어의 작업 실행 관리자는 계속하여 계산 노드의 작업이 제대로 수행되고 있는지, 제출된 작업 수행이 완료되었는지를 주기적으로 모니터링한다. 계산 노드에서 실행 중인 작업의 상태가 변경되면 해당 상태 정보를 데이터베이스에 반영하여 업데이트한다.

4단계 시뮬레이션 작업 완료 단계: 계산 노드에서 실행 중인 시뮬레이션/분석 작업이 완료가 되면 작업 실행 관리자에 의해 데이터베이스 내의 해당 상태 정보가 업데이트되고 결과물 (결과 파일)은 파일 저장소로 전송된다.

5단계 시뮬레이션 결과 다운로드 단계: 사용자 클라이언트가 접속하여 (작업 제출과 다운로드는 계속 온라인일 수도 있고, 중간에 로그아웃하고 다시 접속하는 비연속적인 경우도 있다) 요청한 작업이 완료된 것을 확인하고 다운로드 요청을 한다. 작업 완료 확인 요청이 미들웨어 메시지 큐로 전달되면 작업 관리자가 데이터베이스로부터 정보를 전달해 준다. 해당 다운로드 요청은 미들웨어 메시지 큐로 전송되고 이 메시지의 응답으로 파일 관리자가 파일 저장소로부터 결과 파일들을 전송한다.

2. 시뮬레이션 관리자

시뮬레이션 관리자는 시뮬레이션 작업 관리자와 작업 제출 관리자, 작업 모니터, 어뎁터로 구성된다.

시뮬레이션 작업 관리자(SJM)은 사용자가 제출하는 모든 작업을 관리한다. 시뮬레이션 작업 관리자는 데이터베이스로부터 제출된 작업들을 주기적으로 가지고와서 그 작업들이 이미 제출되었는지 확인한다. 동일한 입력값을 가지는 작업이 제출되었을 때에는 시뮬레이션 작업 관리자는 계산 자원에 작업을 제출하지 않는다. 그 대신, 시뮬레이션 작업 관리자는 데이터베이스로부터 기존에 수행되었던 작업의 결과를 찾아서 사용자에게 전송한다. 새로운 작업일 경우에는 시뮬레이션 작업 관리자가 작업 제출 관리자에게 해당 작업 스크립트를 생성하여 작업을 제출하도록 요청한다. 또한, 시뮬레이션 작업 관리자는 작업 모니터 모듈과 통신을 하면서 제출된 작업의 상태를 데이터베이스에서 업데이트 한다.

일반적으로 사용자는 작업을 다양한 조건으로 다양한 자원에 제출하고자 한다. 이럴 경우에 작업 제출 관리자는 다양한 조건으로 제출되는 작업들을 작업 스케줄링 기술을 이용하여 효율적으로 할당할 뿐만 아니라, KISTI 의 슈퍼컴퓨터등과 같은 고성능 컴퓨팅 자원들을 활용하여 대량의 계산 작업을 수행할 수 있도록 작업을 할당한다.

작업 모니터링(JM) 모듈은 주기적으로 제출된 작업의 상태를 체크하여 다음과 같은 여러 상태로 데이터베이스를 업데이트한다: QUEUED, STAGE-IN, RUNNING, STAGE-OUT, and DONE. 작업이 계산 자원에서 수행을 마치고 완료되면 작업 모니터링 모듈은 그 상태를 STAGE-OUT 이라는 상태로 변환한다. 그리고 그 결과 파일들을 스토리지 서버로 복사한다. 그리고 나서 상태를 DONE 으로 변경한다.

Ⅳ. e-Spine Repository

e-Spine repository에서는 미들웨어에서 사용하는 데이터 모델을 포함하며, 입출력 데이터 및 파일을 관리하기 위한 모듈로 구성된다. 데이터 모델은 크게 1) 시뮬레이션 작업 관리에 해당하는 부분과 2) 시뮬레이션 작업에 사용되는 파라미터 관리에 해당하는 부분으로 나누어진다. 이 두 부분은 서로 동떨어져 있는 것이 아니며, 여러 테이블이 두 부분에 공히 관계를 가지고 역할을 담당한다. 이와 더불어 미들웨어의 데이터 스키마는 시뮬레이션 환경에 대한 기본적인 정보를 모델링하고 있다. 즉, 사용자, 시뮬레이션 해석 프로그램, 그리고 자원 등에 대한 정보를 기본적으로 가지고 있다.

시뮬레이션 분석 데이터는 재사용성을 높이고 이를 통해 계산 비용을 줄여서 사용자에게 빠른 응답시간을 제공할 수 있게 한다. 데이터베이스에 축적된 시뮬레이션 분석 데이터는 사용자-모델-툴-파라미터의 관계를 통하여 추가적인 정보를 추출하여 고급화된 사용자 서비스 및 기능 구현을 가능하게 한다.

시뮬레이션 작업 관리에 해당하는 데이터 모델은 시뮬레이션 요청에 대한 정보, 작업 정보, 구조 모델, 파라미터 정보, 작업 파일, 결과 및 결과 파일 정보 등이 있다. 시뮬레이션 작업에 사용되는 파라미터 관리에 해당하는 데이터 모델은 작업 정보, 파라미터 정의, 파라미터 그룹 및 인스턴스 정보 등이 있다.

Ⅴ. 결론 및 향후 계획

지금까지 가상척추 시뮬레이션을 위한 환경에 대해 기술했다. 향후 시뮬레이션 데이터 및 워크플로우에 대해 Semantic content 관리를 지원하고, 데이터 출처관리를 지원할 예정이다. 또한 다중 사용자와 대용량 결과 데이터의 원격 가시화 지원을 위해 10 Gigabit 이상의 네트워크 속도로 내부 서버들을 구성하고, 가시화 시스템을 연동하며, 병렬 파일 시스템을 도입하여 서비스할 예정이다.

■ 참 고 문 헌 ■

[1] D. Abramson, B. Bethwaite, C. Enticott, S. Garic, and T. Peachey, "Parameter Space Exploration using Scientific Workflows", in Proceedings on the 9th International Conference on Computational Science, pp. 104-113, May 2009.

[2] A. Andronico, R. Barbera, A. Falzone, P. Kunszt, G. L. Re, A. Pulvirenti, and A. Rodolico, "Genius: a simple and easy way to access computational and data grids," Future Generation Computer Systems, 19(6):805?813, August 2003.