

EDISON 계산화학 SW 활용 및 확산 방안 연구

김우현[○], 이종숙*, 박선례**, 이준***
 *한국과학기술정보연구원 슈퍼컴퓨팅융합연구센터
 *{woohyun, jsruthlee, srpark, rjlee98}@kisti.re.kr

A Study on the Utilization of EDISON Computational Chemistry SW

Woohyun Kim[○], Jongsuk Lee*, Sunrae Park**, Joon Lee***
 *National Institute of Supercomputing and Networking

요 약

EDISON은 5개 전문응용분야(전산열유체, 나노물리, 계산화학, 구조동역학, 전산설계)로 구성되어 있으며, 계산과학공학의 교육·연구 활성화를 위하여 2011년부터 제공하고 있는 사업이다. 본 연구는 EDISON 계산화학 전문분야를 중심으로 현재 활발히 제공하고 있는 SW 및 사용자 활용 현황을 분석하여, EDISON 시스템을 확산할 수 있는 방안을 제안하였다.

1. 서론

오늘날 이공계 분야에서 최신기술 활용능력을 겸비한 선도적 과학인재 양성을 위하여, 여러 교육·연구 산업에서 최신 IT 기술을 활용한 교육 도구 사업이 활발히 진행되고 있다.

한국과학기술정보연구원(KISTI: Korea Institute of Science and Technology Information)은 이처럼 변화하고 있는 이공계 교육의 필요성을 미리 예측하고 선도하기 위하여, 과학기술 연구 성과와 최신 IT 기술을 융합한 EDISON 사업을 2011년부터 활발히 수행하고 있다.

2. 본론

EDISON(EDucation-research Integration through Simulation On the Net) 사업은, 슈퍼컴퓨터 및 초고속연구망 자원을 연동하여 5개 전문응용분야의 시뮬레이션 프로그램 및 콘텐츠 활용을 위하여 웹 포털 서비스를 지원하고 있다. 본 서비스를 통하여 대학(원)생 및 연구자들은 무료로 최신 R&D 성과를 활용한 SW를 실행 및 직접 개발할 수 있는 기회가 주어진다.

EDISON 사업은 슈퍼컴퓨팅 자원 제공을 기반으로 하여, 프레임워크 및 미들웨어 개발, EDISON 개방형 플랫폼을 구축하는 순으로 개발 된 것으로, 2015년에는 4,500core 및 사용자 16,000명(누적) 지원을 위하여 컴퓨팅 자원 추가 확장, 서비스 통합 모니터링 환경 구축을 진행하고자 한다. 현재 EDISON은 5개 전문응용분야(전산열유체, 나노물리, 계산화학, 구조동역학, 전산설계)를 통합하여 Liferay Portal 프레임워크를 기반으로 시뮬레이션 수행이 가능하도록 온라인 웹 구축을 완료하였다.



(그림 2) EDISON 통합포털



(그림 3) 시뮬레이션 실행



(그림 4) 사이언스앱스토어



(그림 5) 콘텐츠



(그림 1) EDISON 인프라 구축 및 제공

EDISON 개방형 플랫폼을 기반으로 5개 전문응용분야의 SW 및 콘텐츠가 탑재되어 서비스가 제공되고 있는데, 그중 계산화학 전문응용분야는 61개의 SW 및 140개의 콘텐츠

츠를 개발('15.07기준)을 완료하는 등 다른 분야보다도 활발히 연구가 진행되고 있다.

전문분야	콘텐츠	SW
전산열유체	99	94
나노물리	70	62
계산화학	140	61
구조동역학	34	18
전산설계	22	14
합 계	365	249

(표 1) 계산화학 시뮬레이션 SW 및 콘텐츠 개발 현황

대표적인 계산화학 SW로는 EDISON Web-based Poisson-Boltzmann Solver, Self-assembly of block copolymers, Rotational noise model simulation program, ACE-Molecule, GALAXY protein modeling package PNU-PILLAR-MC 등이 있으며, 계산화학의 모든 솔버들은 모델링 및 대규모 계산 수행을 기반한 시뮬레이션 프로그램 개발 연구 수행에 목적을 두고 있다.

현재 EDISON 계산화학은 57개 대학에서 270개 교과목을 12,579명이 수행('15.07 기준)하고 있으며, 지속적으로 증가 추세를 보이고 있다.

전문분야	대학	교과목	활용자
2012년	10	15	1,077
2013년	18	53	4,987
2014년	19	161	4,935
2015년 ('15.07기준)	10	41	1,580
합 계	57	270	12,579

(표 2) 계산화학분야 년도별 활용 현황

3. 결론

EDISON 계산화학은 교육·연구용 SW 및 콘텐츠를 지속적으로 개발 중이다. 이처럼 EDISON 계산화학 포탈에는 많은 SW 및 콘텐츠가 탑재되어있지만, 사용하는 SW 중 일부에만 집중되는 현상이 발생되기 때문에, 고급 SW 및 콘텐츠 개발이 시급한 상황이다.

EDISON 경진대회나 수업시간 활용을 통해 사용자 의견 수렴을 적극적으로 하여, 맞춤형 고급 SW를 개발해야 할 것이며, 나아가 산업체 등의 상용화 추진을 위한 노력이 확보되어야 할 것으로 보인다.

계산화학 연구 분야는 심화 개발해야 할 콘텐츠들이 무궁무진하다. 좀 더 집중적으로 투자·연구하여, 원활한 사용자 지원이 가능하도록 개선이 필요한 시점이다.

ACKNOWLEDGEMENT

본 논문은 2015년도 정부(미래창조과학부)의 재원으로 한국연구재단 첨단 사이언스·교육 허브 개발 사업의 지원을 받아 수행된 연구임(No. NRF-2011-0020576)

참고문헌

[1] Kumwon Cho 외4, International Journal of Smart Home, "An Implementation of Computer Simulation-based Smart Learning System for Higher Education: EDISON"

[2] Young Jin Jung 외7, International Journal of Software Engineering and Its Applications, "Performance Improvement for Web based Simulation Service on EDISON_CFD"

[3] 정영진 외7, 한국인터넷정보학회 하계학술발표대회, "EDISON_열유체 시뮬레이션 서비스 만족도 분석"

[4] 김우현 외2, 한국컴퓨터종합학술대회, "온라인 시뮬레이션 교육 분석: EDISON_계산화학 시스템 중심으로"