


국내 슈퍼컴퓨팅 산업 1

EDISON 시스템을 활용한 웹기반 시뮬레이션 교육·연구 환경

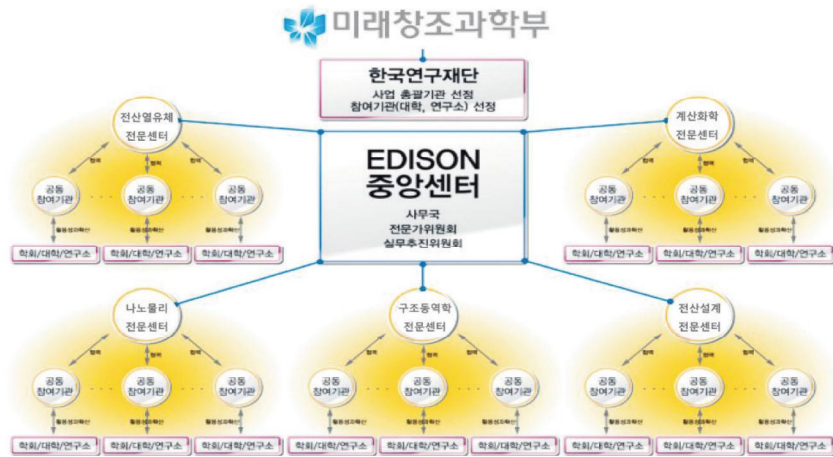
박선례 연구원, 조금원 연구원 (KISTI 국가슈퍼컴퓨팅연구소)



현대 과학은 이론, 실험, 그리고 계산이라는 세 가지 축으로 연구된다. 과거에도 과학에 있어서 계산이라는 분야가 없었던 것은 아니지만, 계산의 위치와 중요성이 크게 변모되어 이제는 이론이나 실험보다도 더욱 중요한 위상을 지니고 있다. 전통적으로 이론은 우리에게 법칙을 제공해 주고, 실험은 이 법칙을 검증해 주었다. 이때 계산은 단지 보조적인 수단으로 쓰였을 뿐이었다. 하지만, 컴퓨터 기술의 발전으로 과거에는 불가능했던 복잡한 계산이 가능해 짐에 따라, 실험 자체가 컴퓨터 시뮬레이션으로 대체될 수 있게 되었다. 컴퓨터 시뮬레이션은 실제 실험에 필요한 시간과 돈을 절약해 줄 뿐만 아니라, 기술적으로나 윤리적인 문제로 불가능 했던 실험까지 가능하게 해 주었다. 바로 여기에 21세기 과학과 산업이 계산과학에 주목하는 이유가 있는 것이다[1]. 또한 IT 혁명은 21세기에 접어들어 컴퓨터 및 네트워크 성능의 눈부신 발전으로 사이버인프라스트럭처를 구축하면서 그 파급력은 높아가고 있다. 이미 이러한 패러다임은 교육 등 일상생활의 기본적인 틀을 급격히 변화시키고 있다[2]. 특히, 우수한 계산과학공학 기술을 이용한 교육은 이공계 기초 과목 내용에 대해 컴퓨터 시뮬레이션을 활용할 경우 보다 쉽고 깊이 있게 이해하는데 도움을 주며, 동시에 교과서에서 배운 지식들이 실제 연구에 어떻게 응용되는지 보여줄 수 있으므로 이공계 교육에 직접적인 임팩트를 줄 수 있다. 또한, 사이버 인프라 기반의 편리한 교육환경을 활용한다면, 인터넷 세대라 불리는 10-20대 학생들의 교육에 더욱 효과적으로 적용할 수 있을 것이다. 인터넷과 같은 사이버 공간의 특성상 기존의 실험에 바탕을 둔 교육에 비해 시공간에 구애를 받지 않으므로, 접근성이 뛰어나고 유지보수비용이 기존의 실험실을 관리하는 비용에 비해 저렴하다는 장점이 있다[3]. 이에 미래창조과학부에서는 EDISON(Education-Research Integration through Simulation On the Net) 개발 사업을 통해 고성능 컴퓨팅, 네트워크 등의 사이버인프라스트럭처 기반 시뮬레이션 소프트웨어 및 콘텐츠를 교육과 연구에 언제, 어디서나 쉽게 사용할 수 있는 교육·연구 환경을 개발하여 서비스하고 있다. 본고에서는 국내 우수한 이공계 인력양성을 위해 계산과학공학 분야 최신 연구 성과를 IT기술과 접목하여 전산열유체, 나노물리, 계산화학 분야의 교육·연구에 활용하는 EDISON 시스템을 설명하고, 교육현장에서 활용되고 있는 현황을 소개하고자 한다.

1. EDISON 추진 체계

미래창조과학부 후원으로 수행하고 있는 EDISON 사업은 EDISON 중앙센터와 전산열유체, 나노물리, 계산화학 전문센터를 두어 센터 간 협력을 통해 다분야에 활용할 수 있도록 추진하고 있으며, 2014년부터는 구조동역학, 전산실계전문센터를 신설하여 분야를 확대할 예정이다.



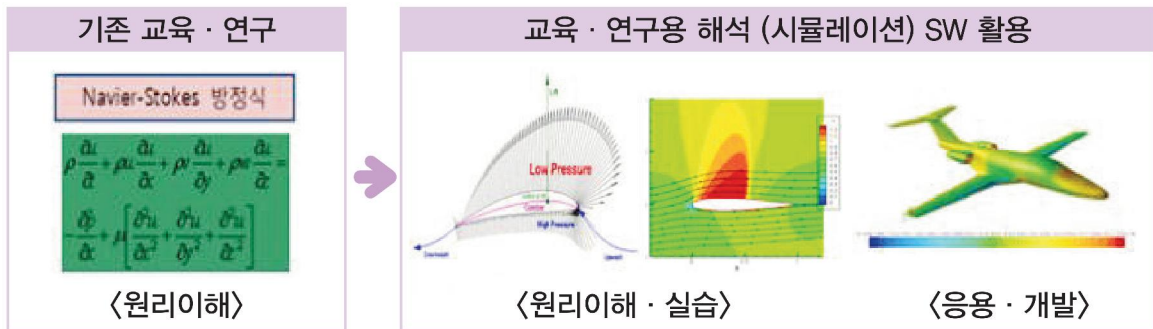
〈EDISON 추진체계〉

EDISON 중앙센터(KISTI, 조금원 센터장)는 계산과학공학 시뮬레이션 프로그램을 슈퍼컴퓨터에 쉽고 자유롭게 탑재하여 실행할 수 있는 EDISON 플랫폼 기술과 수백 개의 다양한 시뮬레이션 프로그램들을 연계활용이 가능하도록 지원하는 데이터 호환기술, 결과가시화 및 전처리 기술개발, 사용자 서비스 등을 수행하고 EDISON 사업을 총괄하고 있다. EDISON 전문센터에서는 학부 수준(기초 단계)의 기초 함양에 적합한 이론 및 프로그램 사용법이 포함된 콘텐츠 개발은 물론이고, 학부 심화/대학원 수준(고급 단계)에서 이용할 수 있는 실용성이 높은 소프트웨어와 최신 연구 성과를 활용한 콘텐츠를 개발하고 있다. 더 나아가 전문가 수준(융합·응용 단계)에 이르기까지 다양한 소프트웨어 및 콘텐츠를 개발 제작하여 보급할 예정이다. 분야별 전문센터의 역할은 다음과 같다. EDISON 전산열유체 전문센터(센터장: 서울대 김종암 교수, 8개 대학 참여)는 2011년 7월부터 항공우주, 기계, 조선 토목분야에서 대학(원)에 교육과 연계 및 연구에 활용 가능한 시뮬레이션 프로그램과 콘텐츠를 개발하여 교육·연구에 활용하고 있다. EDISON 나노물리 전문센터(센터장: KAIST 신민철 교수, 5개 대학 참여)는 2012년 7월부터 나노기반, 나노소재, 나노소자 분야의 시뮬레이션 프로그램과 콘텐츠를 개발하여 교육·연구에 활용하고 있다. EDISON 계산화학 전문센터(센터장: 서울대 신석민 교수, 5개 대학 참여)는 2012년 7월부터 학문적 파급효과가 큰 연구개발 성과를 활용한 교육·연구용 분자모델링 프로그램과 융합콘텐츠를 개발하고 화학분야의 교육·연구에 활용하고 있다.

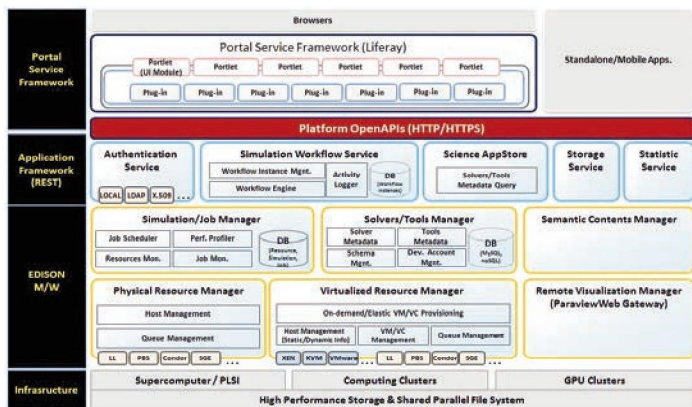
2. EDISON 시스템

EDISON 시스템(<http://www.edison.re.kr>)은 대학(원)생 등 이용자들은 기본 및 응용 원리를 가상 실험과 연계해 시각적으로 배울 수 있어 매우 뛰어난 학습 효과를 올릴 수 있고, 대학 3~4학년 과정부터는 교육과 연구를 병행할 수 있다. 예를 들어, 신약개발 이론교육을 받은 학생이 곧바로 그 자리에서 최신 신약 후보 물질을 가져다 인간 단백질과 결합 시뮬레이션을 수행함으로써 교육 효과를 높이거나, 자신이 설계한 자동차를 실시간 가시화해 교수와

함께 토론수업을 진행하는, 즉 연구와 교육을 동시에 수행하는 융합 환경을 누릴 수 있다. 또한 KISTI 슈퍼컴퓨터와 클러스터 컴퓨터를 활용하여 안정적인 환경을 제공받을 수 있다.

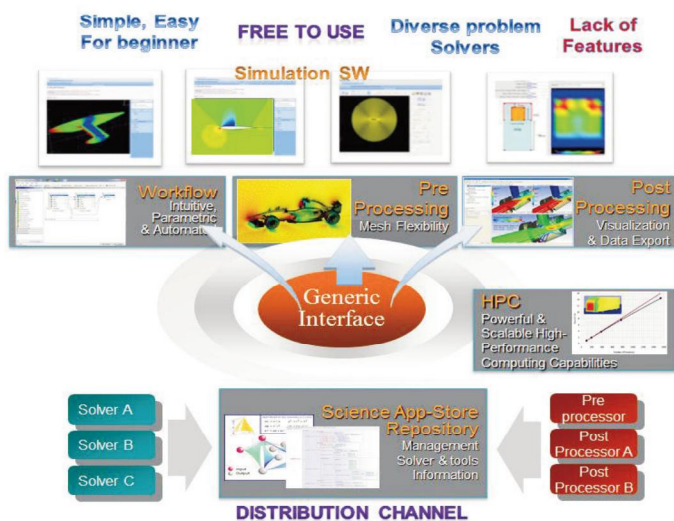


EDISON 시스템은 그림과 같이 EDISON 응용프레임워크, 미들웨어, 인프라 자원이라는 3개의 계층으로 구성되



<EDISON 시스템 구조>

어 있으며, 해석 도구들의 메타데이터를 관리하는 사이언스앱스토어(Science AppStore)기술, 계산과학 워크플로우(Scientific workflow) 실행기술, 대규모 이기종 계산 자원을 활용한 시뮬레이션 구동/관리(Simulation management) 기술 및 웹 기반 포털 서비스 등의 핵심 컴포넌트들로 구성되어 있다.



<사이언스 앱스토어 개념도>

특히 사이언스앱스토어는 EDISON 시스템에서 처음으로 고안된 독창적인 기술로 시뮬레이션 수행의 3단계인 전처리, 해석, 가시화를 One-Stop으로 자동 처리할 수 있다. 그리고 시뮬레이션 소프트웨어 관련 연구 결과물을 웹을 통해 배포 및 공유하고 성능을 평가 받을 수 있다.

3. 분야별 EDISON 시스템 활용 현황

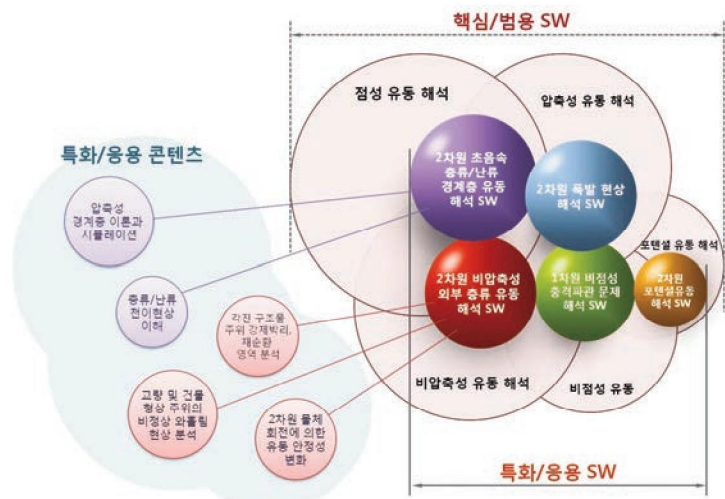
EDISON 시스템은 기존의 이론 중심적인 교육 방법에서 벗어나 시뮬레이션 프로그램 및 교육 콘텐츠를 활용한

실제적이고 체험적인 교육 방법을 통해 피교육자의 학습동기를 고취할 수 있다는 점과 웹기반의 교육·연구 환경으로서 대학(원)생들이 시공간의 제약을 받지 않고 활용 가능하다는 점에서 교육 활용도가 매우 높다고 할 수 있다. 그림은 분야별 서비스를 위한 EDISON 포털을 나타내고 있으며, 이 포털을 활용하여 98종의 시뮬레이션 프로그램과 124종의 콘텐츠를 93개 대학, 193개 교과목, 10,210명이 활용하였다.(2011년 7월부터 2013년 6월 기준)



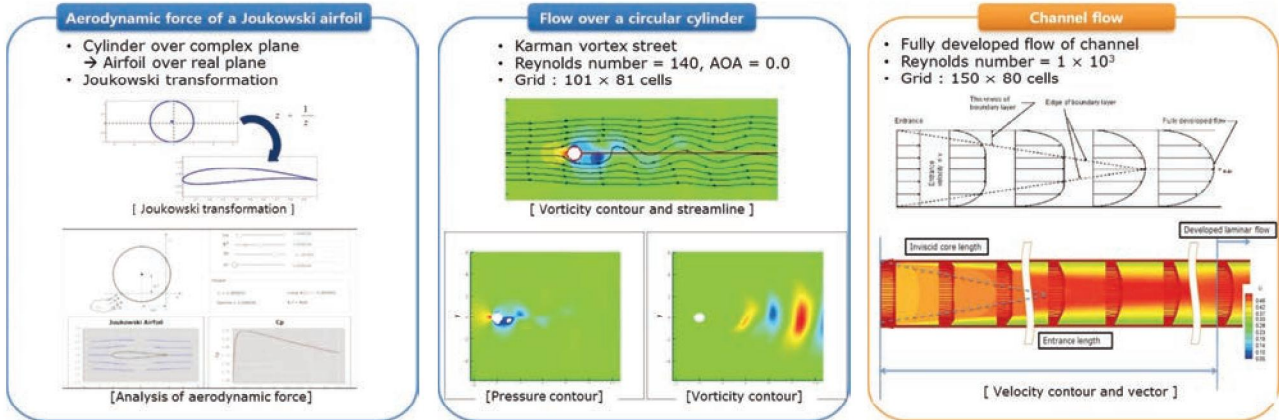
가. EDISON 전산열유체 활용

열유체 분야 대학(원)생들의 보다 다양한 요구를 수용하기 위하여, EDISON 전산열유체 시스템에서는 포텐셜 유동, 압축성/비압축성 유동, 층류/난류 유동, 내부유동, 열유동, 이상유동, 유동설계 등을 포함한 다양한 시뮬레이션 프로그램 및 콘텐츠를 탑재운용하고 있다. 2011년 7월부터 2013년 6월까지 해석적 복소수 기법을 활용한 Joukowski 익형 생성과 공력해석 프로그램을 비롯한 59종의 프로그램과 실린더 회전 속도와 자유류 속도 변화에 따른 매그너스 효과 분석, 날개의 형상에 따른 압력 분포 및 양력 변화 분석 등 54종의 교육 콘텐츠를 60개 대학, 130개 교과목, 4,251명이 활용하였다.



〈EDISON 전산열유체 시뮬레이션 프로그램과 콘텐츠 범위〉

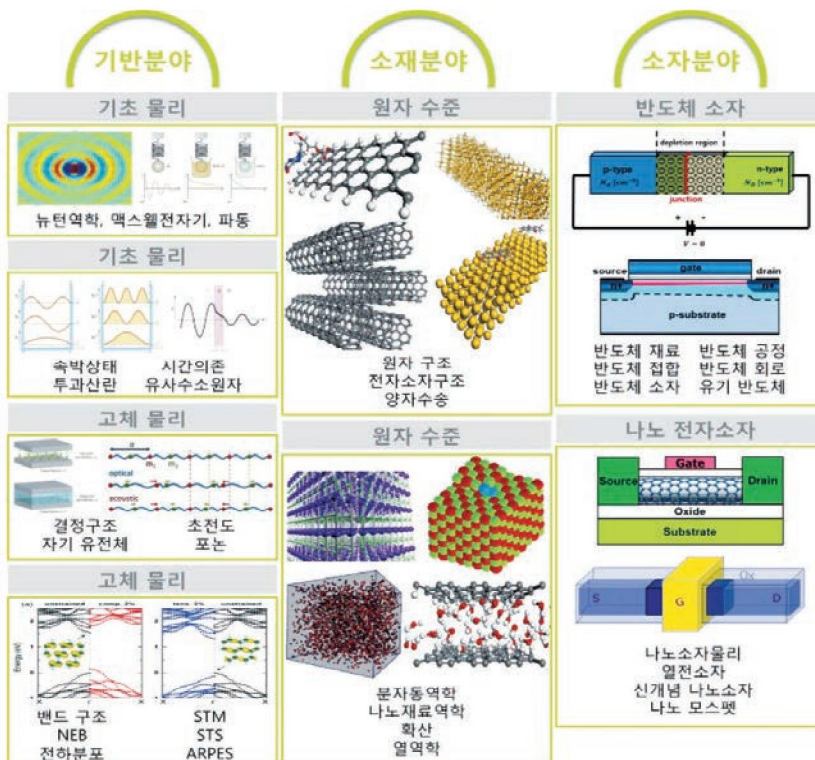
학생들은 EDISON 전산열유체를 활용하여 교과목에 소개된 다양한 유체 역학 문제에 대한 전산해석을 수행하였으며, 본 시스템의 활용에 높은 관심과 호응을 나타냈다. 그림은 EDISON 전산열유체를 활용하여 학생들이 직접 유동해석을 수행한 응용문제의 예를 보여준다.



〈EDISON 전산열유체를 활용한 강의 예제〉

나. EDISON 나노물리 활용

나노물리 분야는 양자 속박 상태, 양자 수송 계수, 파동 함수 전파, 수소 원자 등의 양자 물리 관련 나노기반 분야와 고체 원자 구조, 나노튜브/그래핀 등 나노소재 전자구조, DFT-NEGF 연동, 포논 NEGF 계산, 양자점 등 나노소재 분야, 반도체 재료, 접합, 소자, 공정, 회로, 유기 반도체 소자 등 나노소자 교육연구용 시뮬레이션 프로그램 및 콘텐츠를 EDISON 시스템에 탑재하여 운영하고 있다.



〈EDISON 나노물리 시뮬레이션 프로그램과 콘텐츠 범위〉

2012년 7월부터 2013년 6월까지 나노 MOS 소자 특성 해석용 프로그램을 포함한 20종의 시뮬레이션 프로그램과 유전체의 두께와 게이트 누설 전류 간의 관계 이해, 유전체 재료에 따른 누설 전류 변화, 나노구조에서 갭함 효과에 의한 포논 분산변화 이해 등 26종의 콘텐츠를 학부 및 대학원 과정의 일반 물리, 고체 물리, 양자 역학, 고급 고체 물리, 고급 양자 역학, 나노 소재, 고급 MOS 소자 등의 26개 교과목, KAIST, 서울대 등 12개 대학, 1,202명이 활용하였다.

PN Junction

- Drift-Diffusion based simulator
- Uniformly doped acceptor / donor case

(PN diode) (Potential profile)

Nanowire FET

- Nanowire FET simulator
- NEGF-Poisson based, Ohmic / Schottky type

(Nanowire FET) (Charge)

Particle in a Well

- Solve Schrodinger equation under harmonic and square barrier potential profile

(Harmonic Oscillator & Potential) (Probability Density)

Nano MOS

- Quantum mechanical simulation of 1D MOS capacitor
- Tunneling current / capacitance calculation

(Local density of states) (Gate current density)

CNT FET

- Carbon nanotube FET simulator
- Ballistic transport, gate all around type

(CNT MOSFET) (I-V Characteristics)

Graphene

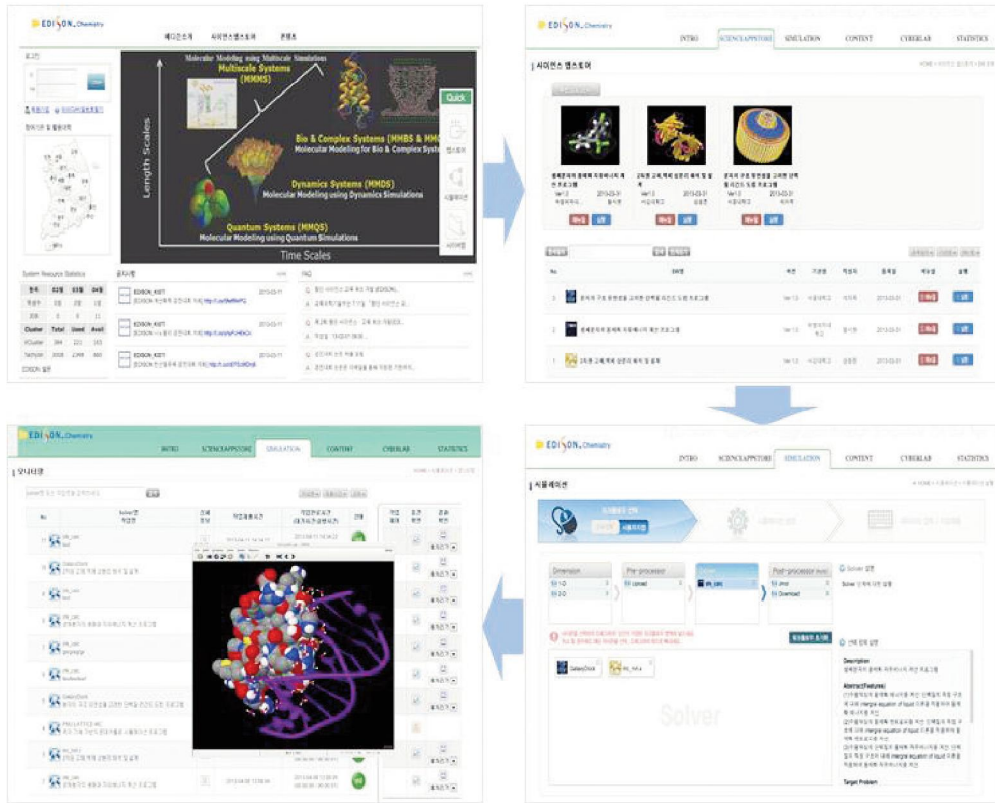
- SIESTA-based density functional theory (DFT) simulator
- Electronic structure calculation

(Graphene structure) (Band structure)

〈EDISON 나노물리를 활용한 강의 예제〉

다. EDISON 계산화학 활용

화학분야의 최신 연구 개발 성과를 바탕으로 다중척도 모의실험을 통한 분자모델링(MMMS), 동역학 계산을 통한 분자모델링(MMDS), 양자계산을 통한 분자모델링(MMQS), 생체시스템에 대한 분자모델링(MMBS), 복잡계에 대한 분자모델링(MMCS) 프로그램과 콘텐츠를 EDISON 계산화학에 탑재, 운영하고 있다. 2012년 7월부터 2013년 6월까지 화학분야의 기초/응용/심화 교과과정 교육 및 최신 연구/응용 분야에 특화된 분자모델링 프로그램 19종과 분자계에 작용하는 에너지/힘의 이해, 상전이에 대한 통계역학적 이론 및 응용 등 45종의 콘텐츠를 21개 대학, 37개 교과목, 4,757명이 활용하였다.



〈EDISON 계산화학 실행화면〉

라. EDISON 경진대회를 통한 활용

EDISON 경진대회는 학부생들의 창의적 사고와 문제 해결 능력을 향상시키고 EDISON 시스템 홍보 및 커뮤니



〈EDISON 전산열유체 경진대회〉



〈EDISON 나노물리 경진대회〉



〈EDISON 계산화학 경진대회〉

티 활성화를 목적으로 분야별로 개최하고 있다. 2013년 제 2회 EDISON 경진대회는 전국 33개 대학에서 134명의 학부생들이 참가하여 총 7편의 논문을 발표하였다. EDISON 시스템을 이용하여 학생들은 14,137건의 계산 작업을 수행하였다. 교과목 내용과의 연관성 및 확장성을 평가하는 주제 선정의 우수성, 결과의 정확도 및 분석력을 평가하는 해석 결과의 우수성, 내용의 독창성, EDISON 시스템 활용성 등을 심사기준으로 하여 평가하였다.

4. 맺음말

앞으로 컴퓨팅 기술 및 성능이 지속적으로 발달함에 따라, 시뮬레이션 소프트웨어의 개발 및 이를 기초로 한 교육·연구 활용 범위는 점점 증대될 것으로 전망된다. 교육·연구용 시뮬레이션 프로그램 통합 환경인 EDISON 시스템을 통해 기존의 이론 중심적인 교육 방법에서 탈피하고 체험적인 교육 방법으로서의 혁신을 기대할 수 있을 것이다. 또한 IT 환경에 익숙한 학생들이 쉽게 접근 가능한 웹 기반의 고등 교육 시스템을 효율적으로 활용하여, 계산과학 공학 분야의 고급 인력을 양성하고 국가 연구인력 역량 강화에 크게 기여할 수 있을 것이다.

계산과학공학 분야 소프트웨어는 상용화 수준이 높고 독점화 경향이 강하기 때문에 국가적 차원의 교육·연구를 위한 기술도입은 현실적으로 어려우며, 해외 상용 소프트웨어의 교육용 버전은 대학 교육에 상시적으로 활용하는데 상당한 비용이 소요되므로, 국산 교육·연구용 시뮬레이션 소프트웨어의 개발은 기존 해외 교육·연구용 소프트웨어 도입비용을 절감·대체시킬 수 있을 것이다. 이와 더불어 개발 소프트웨어의 기술이전 및 상용화에 따른 교육 전문 기업 시장 창출이 가능할 것으로 기대되며, 계산과학공학 분야 산업체의 전문가 재교육 및 연구 활용을 통해 산업체 기술 경쟁력 강화에도 기여할 수 있을 것으로 기대된다.

■ 참고문헌

1. 곽지훈, '계산과학협동과정소개', 자연과학 2004 가을 제17호 page 227
2. Kum Won Cho, Dukyun Nam, Dusuk Jin, Buyoung Ahn, Sunrae Park, Jongsuk Ruth Lee and Chongam Kim, 'Development and Implementation of Simulation based Higher Education Research Environment' 대한기계학회 주계 학술대회, 2012
3. 조금원, "국가 연구개발성과와 이공계 교육의 연계방안 연구 및 시범사례 개발", 교육과학기술부정책보고서, 2010년 5월