

오픈사이언스플랫폼

계산과학 s/w 발전의 가속화

서정현

KISTI

계산과학 서비스 플랫폼

OSP_s^{7.2}

차례

1. 개념 및 개발 동기
2. PAIN POINTS
3. 불확실성
4. 핵심기술
5. 결론

Science AppStore

Science Simulation

Science Data

Science Information

Science Community

Science Education

양자화학 MQCP_m^{1.0}

유체역학 OpenFoam_m^{1.0}

계산과학 웹 포털
개발플랫폼
패키지

OSP_{de}^{7.2} OSP_{dc}^{7.2}

플랫폼

- 공급자와 소비자를 연결



- 사이트 vs 포털 vs 플랫폼

- 사이트: 관리자가 콘텐츠 공급
- 포털: 사이트를 모아 놓은 관문
- 플랫폼: 사용자가 콘텐츠 공급 및 소비

- 서비스 플랫폼 vs 개발 플랫폼

- 서비스 플랫폼: 특정한 목적으로 커스터마이징 하여 운영. 개발 플랫폼 + 커스터마이징 + 개발
- 개발 플랫폼: 서비스 플랫폼을 쉽게 구축하기 위하여 재사용 가능한 기능을 미리 구현




개발 동기

- 계산과학에도 웹 서비스를 도입해야 하는 것 아닐까?
 - 웹 기반 어플리케이션 활성화
 - 모바일 환경의 진화
- 계산과학 s/w 사용자들이 OS를 배워야 하는걸까?

계산과학 사용자

- 학생
- 교수
- 계산과학 s/w 연구개발자
- 계산과학 s/w 활용자
- 가시화 s/w 개발자

학생의 고충

고충		해결방안
이론만으로 이해하기 어려움		시뮬레이션 환경 및 가시화 S/W 제공
실습실 등 정해진 장소에서만 계산 과학 S/W 사용이 가능		웹 기반 시뮬레이션 환경 제공
간단한 실습을 위해서 컴퓨터 사용 에 대한 이해가 필요		웹 기반 시뮬레이션 UI 제공

교수의 고충

고충		해결방안
값 비싼 계산 S/W	→	교육에 필요한 계산 S/W 모듈을 무료 제공
강의마다 초기화	→	클라우드 기반 계산 S/W를 웹을 통해 제공
컴퓨팅 자원 확보 및 유지보수	→	클라우드 기반 계산 자원 제공

계산 s/w 연구개발자의 고충

고충		해결방안
개발한 계산 S/W를 논문에 활용 후 사장	→	사이언스앱스토어 공개하여 활용성 증대
다른 연구자의 연구 결과 재현이 어려움	→	사이언스앱스토어에 공개된 앱을 실행하여 손쉽게 재현
개발한 계산 S/W의 입력 및 출력 데이터 가시화가 어려움	→	가시화 S/W를 사이언스앱스토어를 통해 제공하고 연계 프레임워크를 제공
컴퓨팅 자원 확보 및 유지보수	→	클라우드 기반 계산 자원 제공

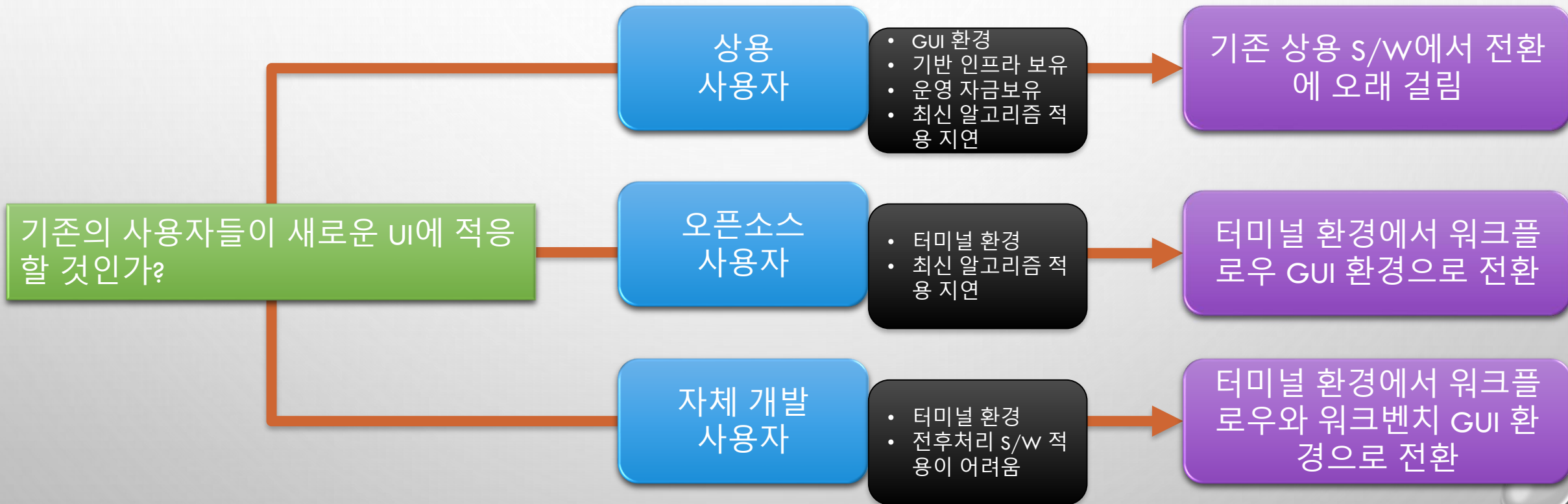
계산과학 S/W 활용자의 고충

고충		해결방안
값 비싼 계산 S/W	→	교육에 필요한 계산 S/W 모듈을 무료 제공
계산과학 전문가 확보	→	자문을 통해 원하는 시뮬레이션 수행 지원
컴퓨팅 자원 확보 및 유지보수	→	클라우드 기반 계산 자원 제공

가시화 S/W 개발자의 고충

고충		해결방안
웹 상에서 동작하는 가시화 S/W가 별로 없음		웹 가시화 S/W 개발 프레임워크를 제공
전문분야 지식을 가진 개발자가 별로 없음		사이언스애플스토어에 가시화 S/W를 노출하여 활용성 및 수익화 지원

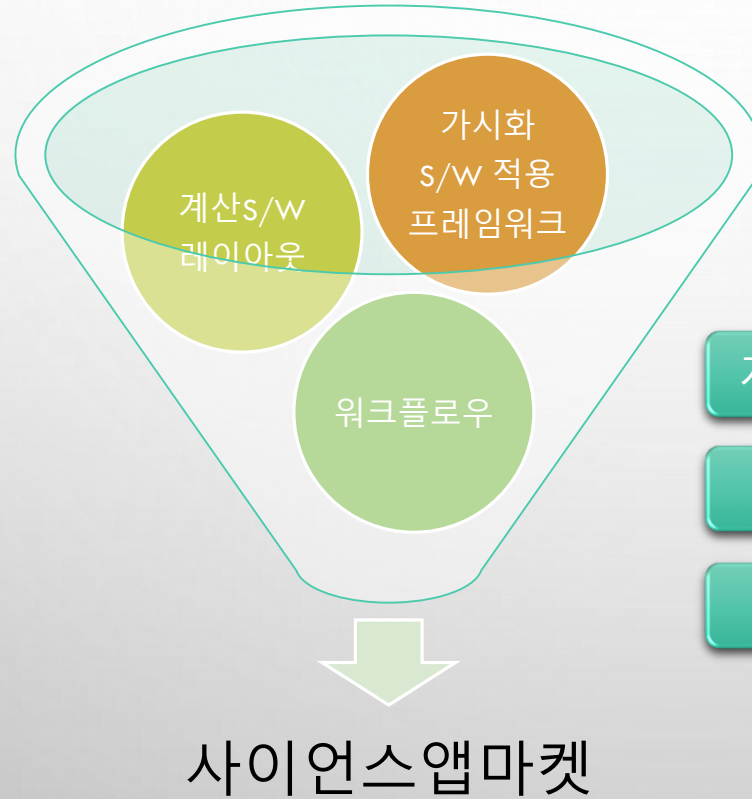
불확실성 - 기존 사용자의 웹 UI 전환



불확실성 - 웹 UI의 효용성



핵심 기술



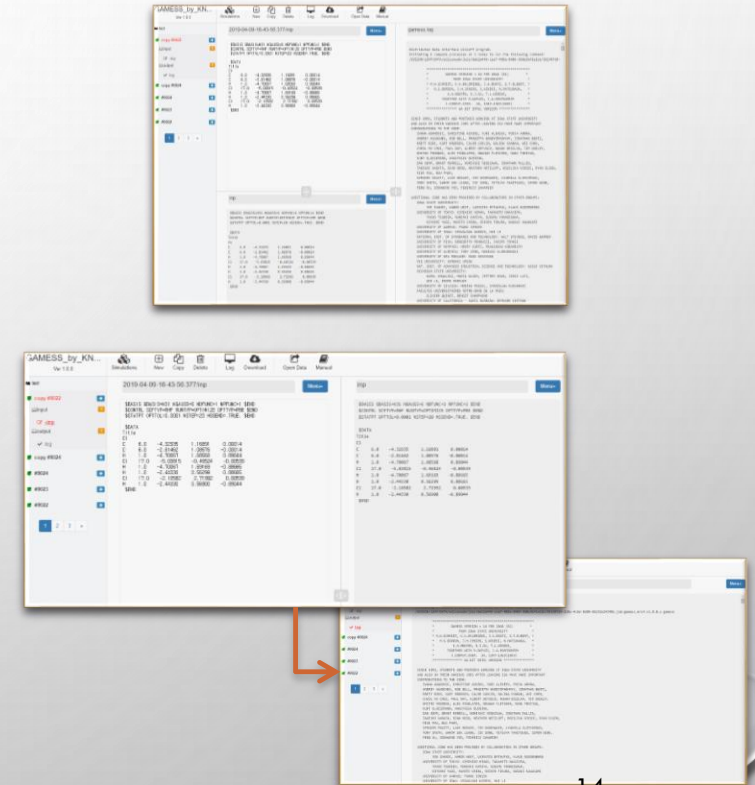
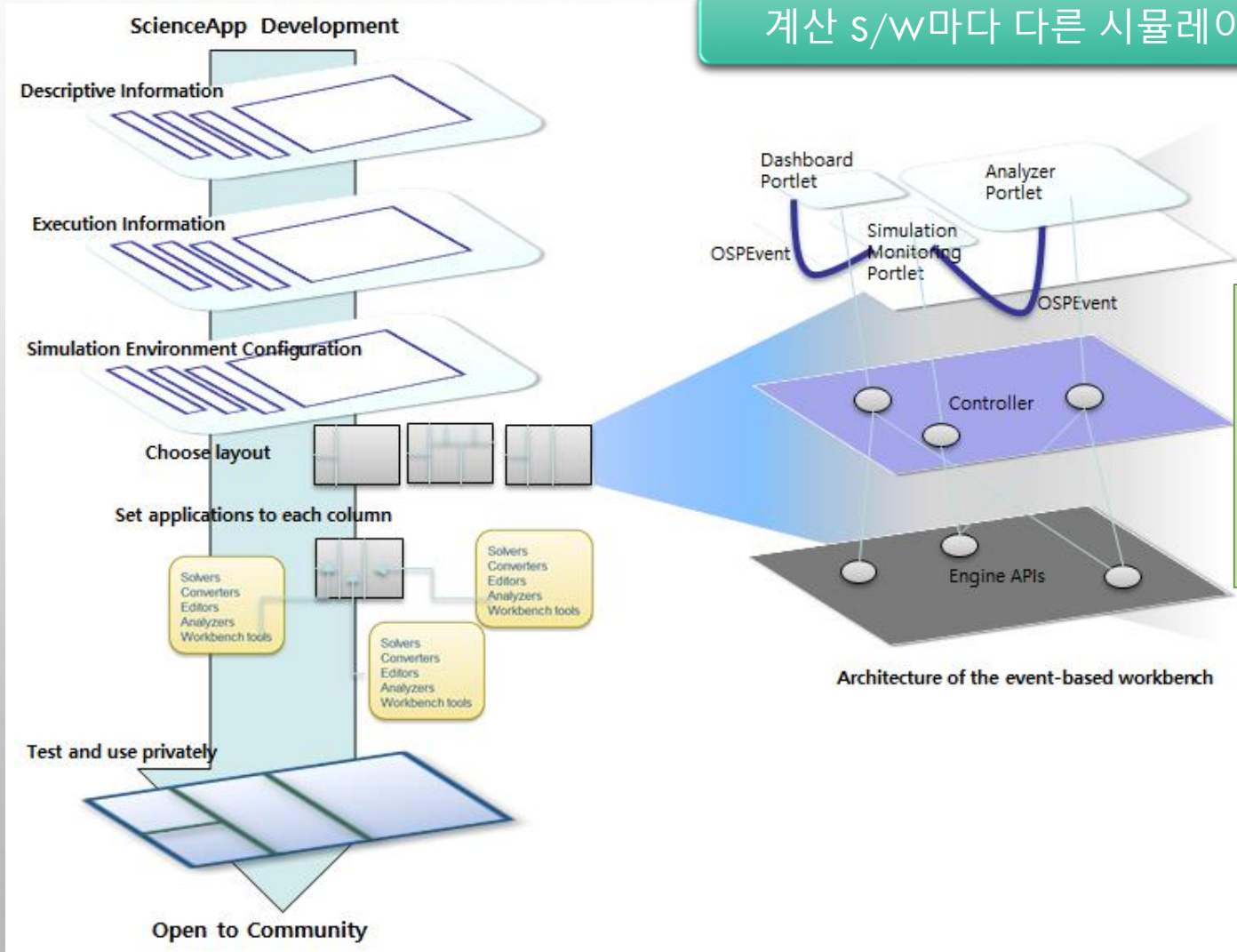
개인 및 소규모 그룹 연구개발 공간

소규모 모듈의 활용 활성화

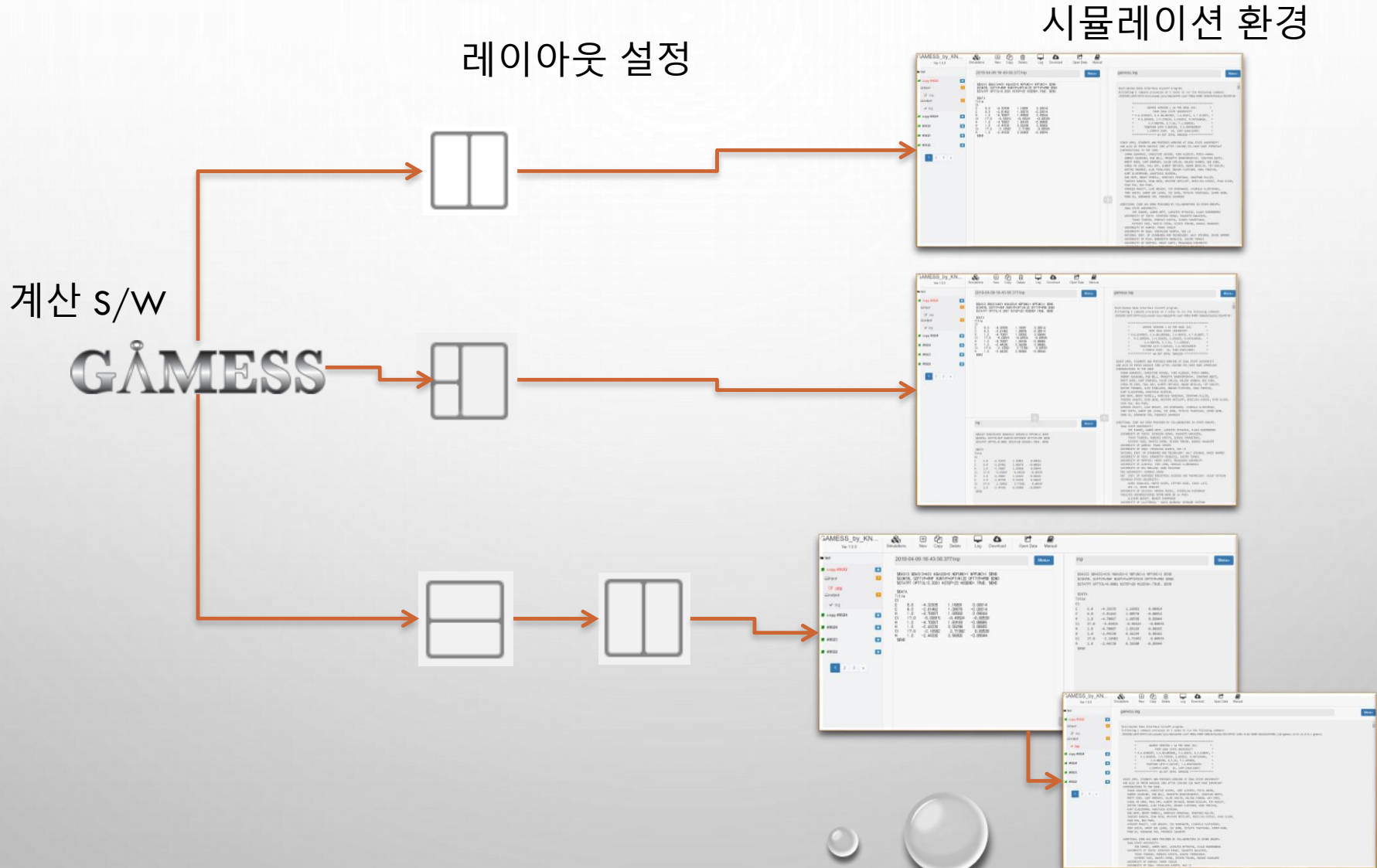
타 연구 결과의 재현 및 비교 수월

계산 S/W마다 시뮬레이션 환경 설정(1)

계산 s/w마다 다른 시뮬레이션 환경을 어떻게 구현할 수 있을까?

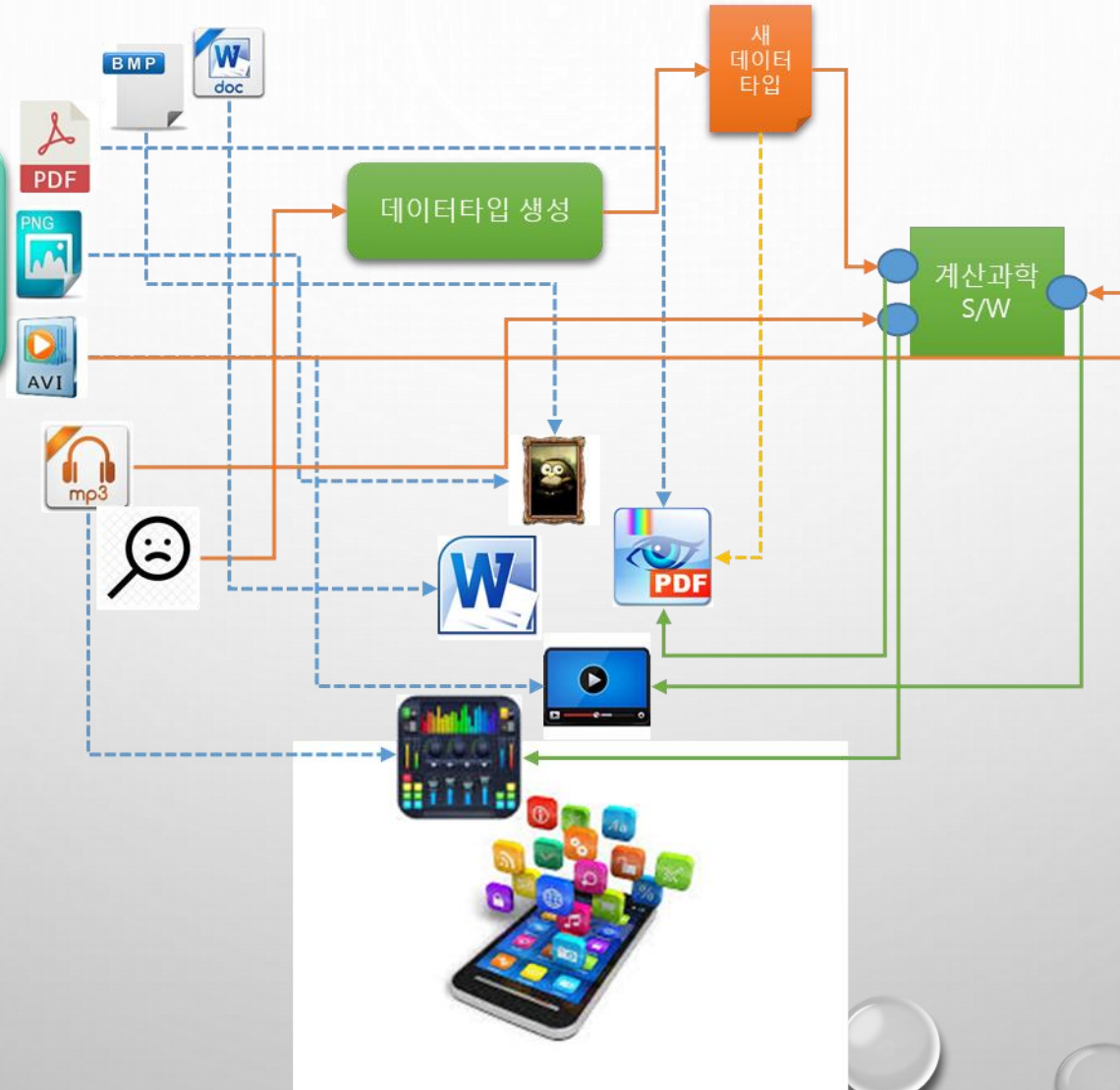


계산 S/W마다 시뮬레이션 환경 설정(2)



가시화 S/W 연동 프레임워크

계산 s/w에 어떻게 가시화
s/w를 별도의 과정이나 프로그래밍
없이 사용할 수 있을까?



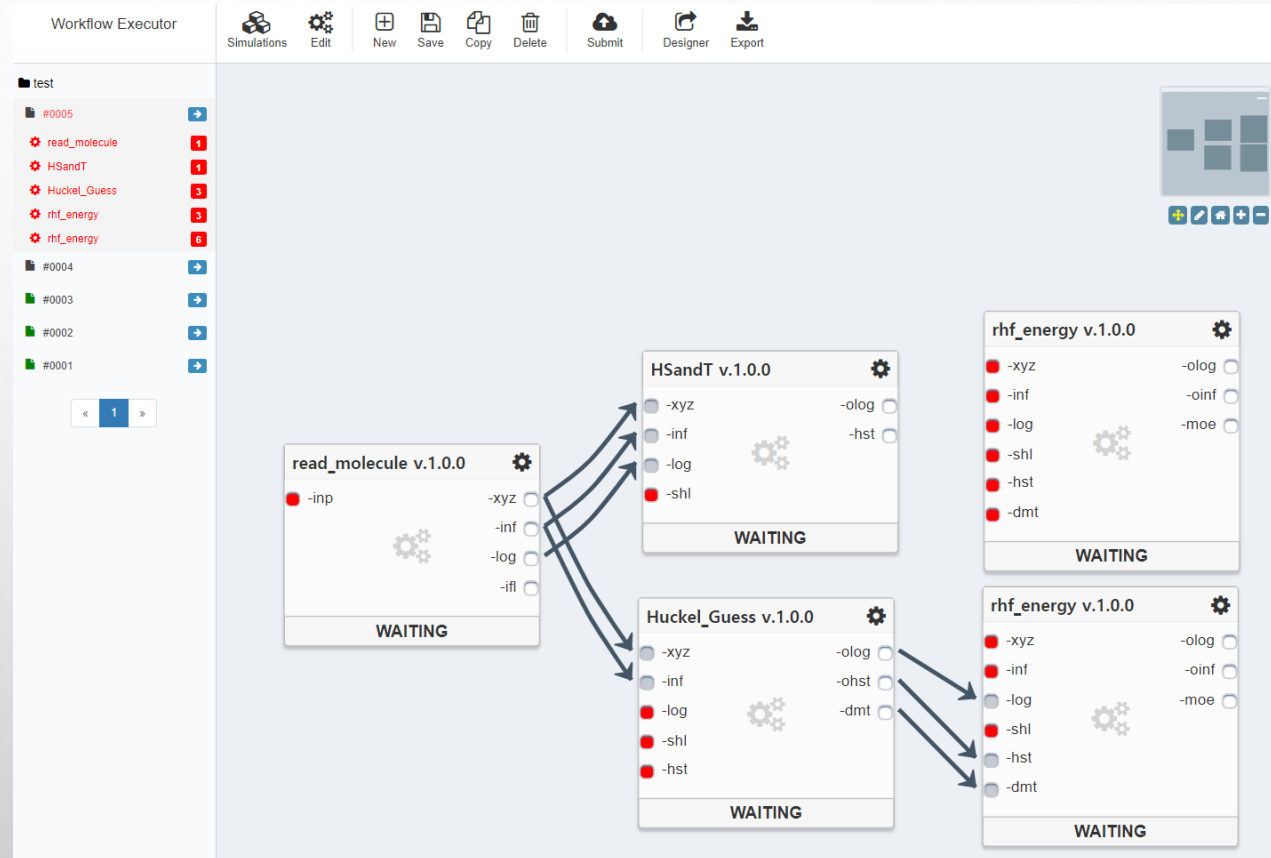
워크플로우

- ❖ 이기종 클러스터 연동
- ❖ 디자이너와 엑스큐터
- ❖ 앱으로 등록 가능
- ❖ 공개된 워크플로우 복사 사용

중간결과 확인

워크플로우 확장

계산 s/w 모듈 적용



MQCP, 양자화학 어플리케이션

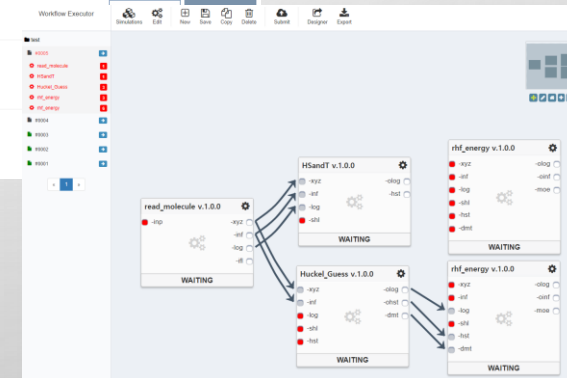
- ❖ 현재까지 38 종의 모듈과 워크플로우 생성 및 등록
- ❖ 전 세계 양자물리학자 100여명으로 구성된 커뮤니티 즉시 구성 가능

MRSF-TDDFT

- 효율과 성능을 동시에 만족시키는 새로운 방법론
- 빛 에너지 활용 등의 연구에 핵심 방법론
< JCP, 149, 104101 (2018) >

ScienceApp (38 Found) Latest

- Plotting_time_vs_energy_MRSF
Plotting time versus energy in several state for MRSF during dynamics
version : 1.0.0 / Owner : qkrdnwss
- GAMESS_GEOM_OPTZCART
GAMESS_GEOM_OPTZCART
version : 1.0.0 / Owner : horbatenko
- newtonx_gameoss_input_generator
Newton-X_GAMESS_Input_Generator
version : 1.0.0 / Owner : windstar527
- MRSF-TDDFT**
Mixed-Reference Spin-Flip TDDFT (MRSF-TDDFT)
version : 1.0.0 / Owner : seunghoonlee89
- MRSF_Input_Gen
Generating MRSF-TDDFT input file
version : 1.0.0 / Owner : seunghoonlee89
- GAMESS_KMOL
GAMESS with KMOL inputs
version : 1.0.0 / Owner : chchoi
- GAMESS_GAMESS
GAMESS_Input_Generator
Generating GAMESS input file
version : 1.0.0 / Owner : chchoi
- HF_631GD
Molecular Energy with HF/6-31G(d)
version : 1.0.0 / Owner : chchoi
- E_B3LYP_631G_631GD
Energy Calculations with B3LYP/6-31G and B3LYP/6-31G(d)
version : 1.0.0 / Owner : chchoi
- E_HF_B3LYP_631GD
Molecular Energy Calculation with HF as well as B3LYP with 6-31G(d)
version : 1.0.0 / Owner : chchoi



OPENFOAM, CFD 어플리케이션

- ❖ 이기종 클러스터 연동 프로토타입
- ❖ 2019년 일부 모듈만 적재
- ❖ 2020년 대부분의 모듈 적재

The screenshot displays the EDISON OpenFoam web interface. At the top, there is a navigation bar with 'Home', '사이언스앱스토어', '시뮬레이션', and 'My Assets'. The user is logged in as 'EDISON'. The main content area features a 3D visualization of a mountain range with a river and a search bar. Below the visualization, the text reads 'EDISON OpenFoam' and 'OpenFoam Modular Simulate Your Idea With Web-based OpenFoam And Workflows'. At the bottom, there is a table listing various application modules.

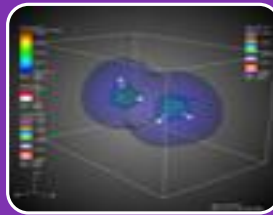
순번	앱제목(앱이름)	버전	앱 타입	기관명	아이디	일자	매뉴얼	실행
12	blockMesh_v2 Hexahedral mesh generator	6.0.0	Solver	기타	truepray	2019-09-04	Manual	Run
11	pimpleFoam PIMPLE based transient incompressible viscosity solver	6.0.0	Solver	기타	truepray	2019-08-29	Manual	Run
10	decomposePar Decompe domain for parallel computing	6.1.0	Solver	기타	truepray	2019-08-16	Manual	Run
9	openFoam_boundary Make default field files for openFOAM	6.0.0	Converter	기타	truepray	2019-08-19	Manual	
8	openFoam_turb Make turbulence dictionary and field files for openFOAM	6.0.0	Converter	기타	truepray	2019-08-19	Manual	

결론



계산과학 인재 양성 가속화

- 실습과 이론 강의가 연계된 콘텐츠 작성 및 활용
- 계산과학 강의를 위한 준비 과정에 대한 부담이 대폭 감소
- 어느 환경에서도 접근이 가능한 강의 및 실험환경



가시화 s/w 개발 및 활용 가속화

- 가시화 s/w를 쉽게 앱마켓에 등록하여 공개 및 판매
- 계산과학 s/w 개발자들이 앱마켓에 등록된 가시화 s/w 연동
- 앱마켓에 등록된 다양한 가시화 s/w를 활용한 시각적 이해



계산과학 s/w 개발 가속화

- 단편적 알고리즘 s/w도 앱마켓에 등록하여 공개 및 판매
- 앱마켓에 공개된 다른 앱들을 활용하여 국소적인 연구
- 소규모 및 개인 연구자들의 계산과학 연구 참여



커뮤니티 기반의 계산과학 연구 가속화

- 연구 결과를 공유하여 전문가로부터의 검증이 쉽게 가능
- 다른 연구자의 결과를 바탕으로 한 창의적 연구가 가능
- 연구 결과를 활용한 강의, 공개 및 수익 활동이 쉽게 가능

감사합니다

<https://www.edison.re.kr>

<https://www.edison.re.kr/web/openfoam>

<https://mqcp.edison.re.kr>