ISSN 1598-0170 (Print)
ISSN 2287-1136 (Online)
http://www.jksii.or.kr

계산과학공학 분야를 위한 웹 기반 시뮬레이션 소프트웨어 관리 시스템 구축 및 서비스☆

Construction and Service of a Web-based Simulation software management system for the Computational Science and Engineering

전 인 호[1] 권 예 진[1] 마 진[1] 이 식[1] 조 금 원[1] 서 정 현[1*]
Inho Jeon Yejin Kwon Jin Ma Sik Lee Kum Won Cho Jerry Seo

요 약

오픈 사이언스는 연구 결과의 공유뿐 아니라 연구 과정을 공개하는 방향으로 발전하고 있다. 우리는 계산과학공학 분야의 오픈 사이언스 활성화를 위해 EDISON 플랫폼을 개발하고 있다. EDISON 플랫폼은 계산과학공학 연구자들이 개발한 시뮬레이션의 온라인 서비스를 제공할 뿐만 아니라 소스코드, 데이터, 관련 연구 출판물에 대해서도 공유할 수 있는 환경을 제공해준다. EDISON 플랫폼에 성공적인 서비스를 위해서는 시뮬레이션 소프트웨어의 효율적인 관리 시스템이 필요하다. 본 논문은 계산과학공학 연구자들이 개발한 시뮬레이션 소프트웨어를 EDISON 플랫폼에 제공하기 위한 등록 관리 시스템을 제안하였다. 제안된 시스템을 통해 개발자는 관리자의 개입 없이 시뮬레이션 소프트웨어를 EDISON 플랫폼에 등록할 수 있으며, 웹 기반의 시뮬레이션 제공 환경을 효과적으로 구축할 수 있다.

☞ 주제어 : 계산과학공학, 웹 기반 시뮬레이션, 시뮬레이션 소프트웨어, 오픈 사이언스

ABSTRACT

Open Science is evolving not only to share research results, but also to open the research process. We are developing the EDISON platform for the spread of open science in computational science and engineering. The EDISON platform provides online simulation services developed by computational science and engineering researchers. It also provides an environment for sharing source code, data, and related research publications. An effective simulation software registration management system is required for successful service on the EDISON platform. In this paper, we proposes a simulation software management system to provide online simulation service through EDISON platform. The proposed system allows the developer to register the simulation software on the EDISON platform without administrator intervention and effectively build a web-based simulation environment.

☞ keyword : Computational Science and Engineering, Web-based Simulation, Simulation software, Open Science

1. 서 론

정보의 독점적인 소유보다는 공유와 교환을 통해 사용 가치를 높이는 게 중요해진 시대에서 오픈 사이언스는 과학계의 중요한 키워드로 자리 잡았다[1]. 1942년 Merton은 연구자가 자신의 연구 과정 및 결과를 공유하고, 이를 과학계 커뮤니티에서 후속 연구를 가능하게 하는 지식생산의 선순환 체계를 구축하는 것이 중요하다고 여겼으며, 이를 오픈 사이언스라는 과학계의 지식 생산 규범으로 정의하였다[2]. 2000년 이후 OECD를 중심으로 기존의 이론적으로만 논의 되어온 오픈 사이언스의 개념을 정책 의제로 논의하기 시작하였으며, 2015년 대전에서 개최된 OECD 세계 과학기술 장관 정상 회의에서 오픈 사이언스가 핵심 의제 중 하나로 선정되어 논의되었다. 현재 논의되고 있는 오픈 사이언스는 공공 자금으로 수행된 논문 및 데이터 등의 연구 성과를 디지털 포맷으로 공개하고, 관련 커뮤니티 이용자의 접근성을 높여 사회적 편익을 높이는 데 목적이 있다. 최근에는 연구 결과인 출판물과 데이터를 공유하는 범위를 넘어 연구 과정에서 생산되는 자료, 분석 소프트웨어, 연구 인프라를 공유하는 움직임으로 확

1 Computational Science & Engineering Center, Korea Institute of Science and Technology Information (KISTI), 305-806, Daejeon, 34141, Republic of Korea
* Corresponding author (jerry@kisti.re.kr)
[Received 12 July 2017, Reviewed 28 July 2017, Accepted 8 August 2017]
☆ 본 논문은 2016년도 정부(미래창조과학부)의 재원으로 한국연구재단 첨단사이언스·교육허브개발사업의 지원을 받아 수행된 연구임(No. NRF-2011-0020576).

http://dx.doi.org/10.7472/jksii.2017.18.4.99

대되고 있다[1,3].

오픈 사이언스는 개방과 공유의 대상을 Open Access (연구 결과 출판물에 대한 저작권과 라이센스가 없이 자유로운 이용), Open Data (연구 데이터의 공유), Open Source (활용 프로그램 코드의 공개 및 배포), Open Methodology (연구에 활용된 방법론 공개), Open Educational Resources (연구 교육 자료에 대한 공유), Open Peer Review (논문 리뷰 결과 공개를 통한 투명성 확보)로 나누어 정의된다[4]. 오픈 사이언스의 활성화를 위해 국가적 차원에서 제도화하려는 정책적인 움직임이 중요하다. 그뿐만 아니라 기술적으로는 공유 대상에 적합한 온라인 플랫폼이 필요하며, 이를 통해 인터넷에서 손쉽게 공유되고 많은 사용자가 쉽게 접근할 수 있는 환경이 구축되어야 한다[5].

대표적인 Open Access 플랫폼으로는 MIT와 HP가 공동 개발한 Open Access Self-Archiving System인 DSpace가 있다[6]. DSpace는 전 세계 연구소와 대학에서 연구 생산물의 수집 및 공유를 목적으로 개발되어 전 세계적으로 1700여 개의 저장소에 활용되고 있다. 국내에서도 DSpace 기반의 국가 단위의 대규모 프로젝트인 OAK(Open Access Korea) 사업을 추진하고 있으며, 한국형 오픈 저장소를 구축하여 2017년 5월 현재 34개 기관의 58만여 건의 콘텐츠를 제공하고 있다[7]. Open Data의 대표적인 온라인 플랫폼은 대용량 과학데이터의 공유 및 분석 환경을 제공하는 오픈 사이언스 데이터 클라우드(OSDC, Open Science Data Cloud)가 있으며[8], Open Source를 공유하기 위한 대표적인 온라인 플랫폼은 Github이 있다[9].

계산과학공학은 자연과학과 공학 분야의 다양한 문제를 수치모델링, 시뮬레이션, 시각화 과정을 통해 예측과 분석을 수행한다. 계산과학공학 분야에서도 오픈 사이언스 정책에 발맞추어 연구 출판물, 데이터, 시뮬레이션 소프트웨어, 소스 코드 등 계산과학 연구를 통해 생성된 다양한 결과물을 공유하고 있다. 시뮬레이션 소프트웨어의 경우 자체적으로 공유할 수 있는 사이트를 구축하거나 Github 등의 오픈소스 저장소를 이용해 소스코드를 공유하고 있다. 전산열유체 분야의 OpenFOAM[10], 나노물리 분야의 SIESTA[11], 계산화학 분야의 nwChem[12]등 분야별 다양한 Open Source가 인터넷을 통해 공유되고 있다.

하지만 이러한 시뮬레이션 소프트웨어들은 리눅스나 유닉스 환경에서 동작해 관련 실험 연구자와 학생들에게 활용하기 어려움이 존재한다. 또한 병렬처리를 위한 고성능 컴퓨팅과 대용량 데이터 처리 환경을 요구해 일반 PC에서는 실행하기 어렵다. 이러한 특징으로 인해 소프트웨어가 공개되더라도 사용할 수 있는 사용자의 범위는 제한적일 수밖에 없다.

KISTI에서는 웹을 통해 계산과학공학 분야의 소프트웨어에 대한 접근성을 높이고, 관련 연구 커뮤니티 활성화를 위해 2011년부터 EDISON (EDucation-research Integration through Simulation on the Net) 사업을 진행하고 있다[13]. EDISON 사업에서는 계산과학공학 분야의 오픈 사이언스 활성화를 위하여 웹 기반 시뮬레이션 서비스와 소스코드, 데이터, 관련 연구 출판물에 대해서도 공유할 수 있는 온라인 환경을 제공하고 있다[14,15].

본 논문에서는 연구자들이 개발한 시뮬레이션 소프트웨어를 EDISON 플랫폼에 등록하고 관리할 수 있는 서비스를 구축하였다. 제안된 시스템을 통해 계산과학공학 연구자들은 자신이 개발한 시뮬레이션 소프트웨어를 EDISON 플랫폼에 등록할 수 있다. EDISON 플랫폼에 등록된 시뮬레이션 소프트웨어는 KISTI에서 제공하는 컴퓨팅 자원을 활용할 수 있으며 개인 컴퓨터로는 수행하기 어려운 규모의 연구도 가능하다. 또한, 인터넷 접속이 가능한 곳이라면 어디서든지 시뮬레이션을 수행하고 결과를 확인할 수 있다.

2. 관련 연구

2.1 웹 기반 시뮬레이션 소프트웨어 등록관리 사례

웹 기반 시뮬레이션을 제공하는 대표적인 해외사례로는 NanoHub[15]가 있다. NanoHub에서는 연구자들이 손쉽게 GUI 구성할 수 있는 Rappture (Rapid Application Infrastructure) 오픈소스 툴킷을 제공하고 있다[16]. 이 툴킷은 FORTRAN, C++, PYTHON, MATLAB 등 다양한 언어로 NanoHub의 GUI를 연동할 수 있는 API를 제공해준다. 연구자는 API를 이용해 시뮬레이션 소프트웨어의 입출력 방식을 쉽게 구현할 수 있다. 또한 xml 형태로 시뮬레이션 제목과 설명 그리고 실행 명령어를 설정할 수 있으며, 웹 기반 UI 생성 및 결과 데이터 가시화(2차원 그래프, 분자구조 시각화) 방법을 설정할 수 있다.

NanoHub에 자신의 시뮬레이션 소프트웨어를 등록하기 위해서는 다음과 같은 절차가 필요하다. 자신이 등록하고자 하는 소프트웨어의 정보를 입력하고 등록 요청을 한다. 사이트 관리자는 요청된 정보를 바탕으로 관리자는 승인 여부를 결정한다. 이후 개발관리 웹페이지와 SVN 그리고 웹 기반 가상 리눅스 개발 환경 제공한다. 연구자는 제공된 개발 환경에서 컴파일과 테스트 과정을 수행한다. 개발이 완료된 소스 파일을 SVN에 업로드 하고 웹 페이지를 통해

(표 1) 설계 요구사항
(Table 1) Design requirements

요구사항	설명
범용성	C++, FORTRAN, Python등 다양한 프로그램 언어로 작성된 시뮬레이션 코드를 등록 관리 할 수 있어야 한다.
확장성	등록된 시뮬레이션 소프트웨어는 다른 소프트웨어와 연동할 수 있어야 한다.
편의성	등록 관리를 위해 학습해야하는 기술적 내용을 최소화 하며, 등록에 필요한 소스코드 수정을 최소화 하도록 설계 한다.
개방성	연구자가 원하는 다양한 형태로 시뮬레이션 소프트웨어를 공개할 수 있어야 하며, 오픈소스 저장소와 연동 가능해야 한다.
자동화	시뮬레이션 소프트웨어는 등록하는 과정에서 관리자의 개입이 최소화 되어야 한다.

(표 2) 시뮬레이션 구성 요소
(Table 2) Simulation components

요소	설명
해석기 (Solver)	과학/기술 분야의 문제를 해결하기 위해 개발한 리눅스 실행 파일이나 스크립트 파일로 입출력 포트를 가지고 있다.
입출력포트 (Input/Output Port)	해석기의 입력 파일과 출력 파일의 형태를 정의해주는 요소로써 1개의 데이터 타입을 가진다.
데이터타입 (Data Type)	사이언스 앱에서 생성되는 데이터의 형태를 구분하는 요소로써 1개 이상의 편집기와 분석기를 가지고 있다.
편잡기 (Editor)	웹 GUI를 통해 사용자의 입력을 받아 해석기의 입력 데이터를 만들어주는 요소.
분석기 (Analyzer)	해석기를 통해 생성된 결과 데이터를 웹 상에서 분석 작업을 할 수 있는 요소.

등록 요청을 하며, 관리자는 이를 테스트하고 문제가 없는 경우 서비스 승인을 한다. 큰 특징으로는 Rappture라는 등록 관리 플랫폼을 통해 안정화 되고 체계적인 개발 환경을 제공하고 있다. 하지만 개발 환경과 서비스 환경 모두 리눅스 기반의 GUI를 원격 접속 형태로 제공하고 있어, 등록 화면과 실행 화면에 끊김 현상이 발생한다.

2.2 EDISON 서비스 소개

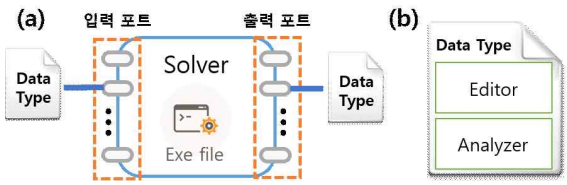
EDISON 서비스는 교수, 연구자, 학생이 웹을 통하여 시뮬레이션 소프트웨어와 콘텐츠를 자유롭게 등록하고 이를 활용할 수 있는 환경 구축을 목표로 하고 있다. EDISON 서비스는 웹 포털 구성 및 계산 자원 관리, 사이언스 앱 관리 등의 기능을 제공하는 EDISON 플랫폼으로 구성된다[13]. EDISON 플랫폼에 등록된 시뮬레이션 소프트웨어를 사이언스 앱이라 정의하였다. EDISON 플랫폼은 사이언스 앱 서비스를 위한 메타정보관리 시스템인 사이언스 앱스토어 (Science Appstore) 프레임워크와 사용자 인증 및 파일 입/출력 서비스, 컴퓨팅자원 및 작업 관리 기능을 제공하고 있다[13]. 또한 EDISON 웹 포털은 일반 사용자, 개발자, 튜터, 학생 등의 사용자로 분류하여 시뮬레이션 선택, 모니터링, 결과 웹 가시화 및 수업 활용에 필요한 가상실험실 및 관련 콘텐츠를 제공하고 있다. 또한 여러 개의 시뮬레이션 소프트웨어의 작업 순서를 정하고 순차적 또는 반복적으로 실행할 수 있는 사이언스 워크플로우 환경을 제공한다. 2017년 6월 현재 전산열유체, 나노물리, 계산화학, 구조동역학, 전산설계, 전산의학 등 6개 분야 서비스를 하고 있다[13].

3. 등록 관리 시스템 설계

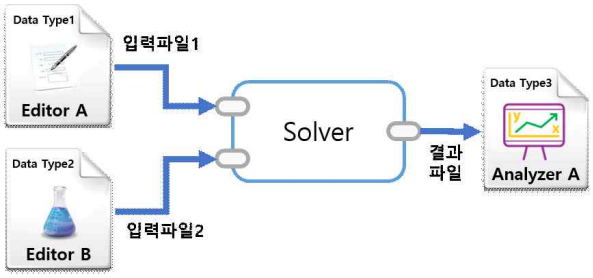
EDISON에 사이언스 앱 등록 관리 시스템의 목적은 계산과학공학 연구자들이 손쉽게 등록/관리를 할 수 있는 시스템을 제공하는 것이다. 이를 위해 등록 관리 시스템의 요구사항은 표 1과 같다.

3.1 시뮬레이션 구성 요소 설계

EDISON에서 사용자가 특정 문제를 해석하기 위한 웹 기반 시뮬레이션 소프트웨어를 사이언스 앱이라 정의하였다. 단일 시뮬레이션을 실행하는 경우와 사이언스 앱을 순차적으로 실행시키기 위한 워크플로우에서 사용자가 등록한 앱을 활용할 수 있도록 구성 요소를 5가지로 나누어 정의하였다. 사이언스 앱은 웹을 통해 입력 데이터를 처리하는 편집기, 입력된 데이터를 통해 문제를 해석하는 해석기, 해석된 결과 데이터를 웹상에서 분석하는 분석기로 나누어진다. 해석기는 입출력 형태를 정의하기 위한 입출력 포트를 가지고 있으며, 입출력 포트의 데이터 형태를 지정하는 데이터 타입을 정할 수 있다.

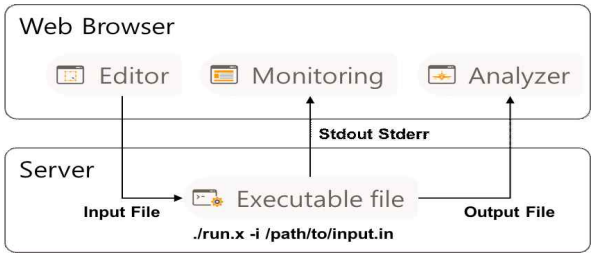


(그림 1) 시뮬레이션 구성요소 (a)해석기 (b)데이터 타입
(Figure 1) Simulation components (a)Solver (b)Data type



(그림 2) 사이언스 앱 실행 시나리오
(Figure 2) An execution scenario of the Science App

(그림 3) 워크플로우 실행 시나리오
(Figure 3) An execution scenario of the Workflow



(그림 4) 해석기 실행 시나리오
(Figure 4) An execution scenario of the solver

그림 1은 해석기와 데이터 타입의 구조를 도식화하였다. 해석기는 여러 개의 입출력 포트를 가지고 있으며, 각각의 입출력 포트는 1개의 데이터 타입을 가지도록 설계하였다. 데이터 타입의 경우 1개 이상의 편집기와 분석기를 가지며, 데이터 타입과 입출력 포트는 일대다 관계를 가진다. 사이언스 앱 개발자는 입출력 포트 등록 시 기존에 등록되어 있는 데이터 타입을 사용할 수 있다. 그림 2는 사이언스 앱을 실행하는 경우로 1개의 해석기가 2개의 입력 포트와 1개의 출력 포트를 갖는 경우를 도식화하였다. 2개의 입력 포트에서는 각 포트는 데이터 타입이 설정되어 있고, 데이터 타입이 가지고 있는 편집기를 통해 입력 파일을 생성한다. 출력 포트의 경우에도 포트는 데이터 타입이 설정되어 있고, 데이터 타입이 가지고 있는 분석기를 통해 결과 파일을 확인할 수 있다. 그림 3는 워크플로우를 이용하여 2개의 해석기를 연동하여 실행하는 경우를 도식화하였다. 해석기 A의 출력 포트의 데이터 타입과 해석기 B의 입력 포트의 데이터 타입이 같은 경우 이를 연결하여 한 번에 실행할 수 있는 기능을 제공한다.

3.2 해석기 요구 사항

해석기는 식(1)과 같이 리눅스 명령어의 형식을 따르는 컴파일된 실행 파일이나 스크립트 파일을 해석기로 사용 가능하다. 1개 이상의 옵션과 인자 값을 가져야 하며, 인자 값은 문자열 또는 파일 경로를 가진다. 옵션과 인자 값을 이용해 실행에 필요한 입력 데이터를 전달하게 된다.

$ ./Commend [-options] [arguments] ... (1)

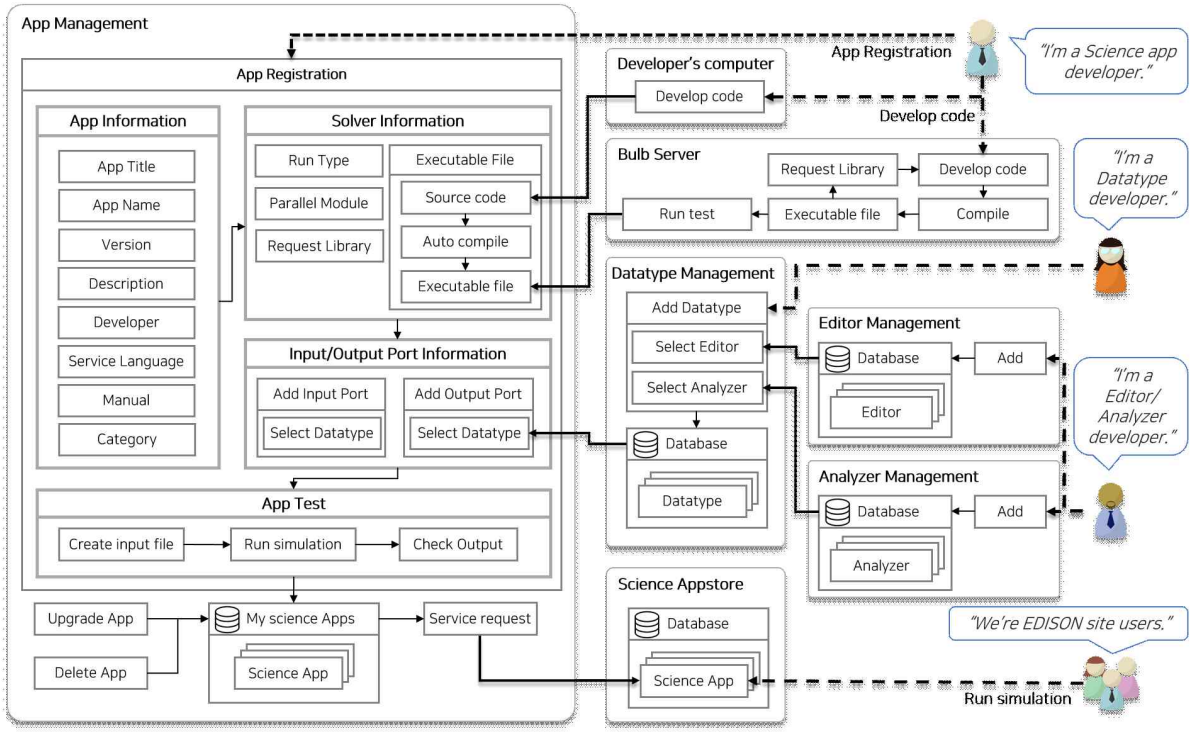
실행 중에 생성되는 표준 출력(stdout), 표준 에러(stderr)를 웹 모니터링 페이지를 통해 제공하여 사용자에게 필요한 정보를 알려준다. 실행 결과에 대해서는 파일 형태로 출력하게 되며, 데이터 타입별로 분류하여 출력 포트로 설정한다. 그림 4는 해석기가 실행되는 절차를 웹 브라우저와 서버로 나누어 도식화하였다. 웹 브라우저에서 편집기를 통해 시뮬레이션 실행에 필요한 데이터를 생성한다. 생성된 파일은 서버로 전송되고 해석기를 통해 시뮬레이션을 수행하게 된다. 중간 결과는 웹 모니터링을 통해 확인할 수 있다. 시뮬레이션 수행이 완료되면 결과 파일을 웹 브라우저에 전송하고 분석기를 통해 결과 데이터를 확인할 수 있다.

3.3 사이언스 앱 등록 관리 시스템 설계

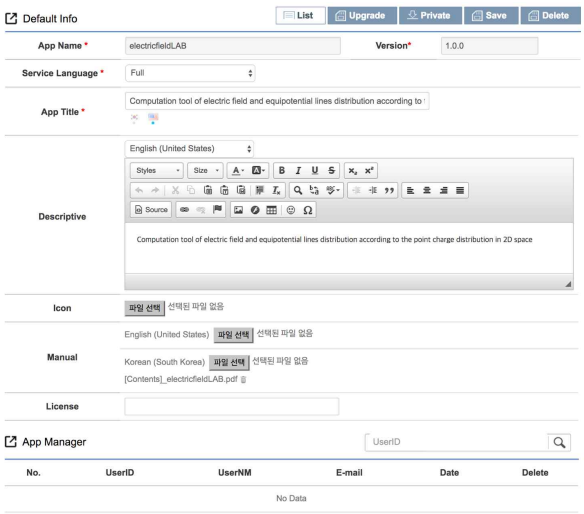
그림 5는 본 논문에서 제안하는 사이언스 앱 등록 관리 시스템의 구조를 도식화하였다. 앱, 데이터 타입, 편집기, 분석기로 나누어 관리할 수 있도록 설계하였다.

앱 관리에서는 새로운 앱을 등록 하거나 기존에 있는 앱을 관리할 수 있다. 새로운 앱을 등록하기 위해 앱에 기본적인 정보 입력 단계와 해석기 정보 입력 단계, 입출력 포트 정보 입력 단계, 앱 테스트 단계로 나누어 설계하였다. 앱 정보 입력 단계에서는 앱 제목, 앱 설명 등 앱 소개에 필요한 정보를 입력하는 단계이다. 해석기 정보 입력 단계의 경우 실행 파일의 동작 방식 설정 및 실행 파일을 업로드 하는 단계로써, EDISON에서 제공하는 개발자 전용 서버에서 컴파일된 실행 파일을 업로드 하거나 소스코드를 업로드할 수 있다. 소스코드를 업로드 하는 경우 자동으로 컴파일 과정을 거치게 되며, 개발자는 컴파일 과정에서 생성되는 에러와 결과를 확인할 수 있다.

입출력 포트 정보 입력 단계에서는 입출력 포트를 정의하고, 포트마다 데이터 타입을 지정한다. 데이터 타입



(그림 5) 시뮬레이션 소프트웨어 관리 시스템 구조
(Figure 5) The architecture of simulation software management system



(그림 6) 사이언스 앱 정보 관리
(Figure 6) Science App Information management

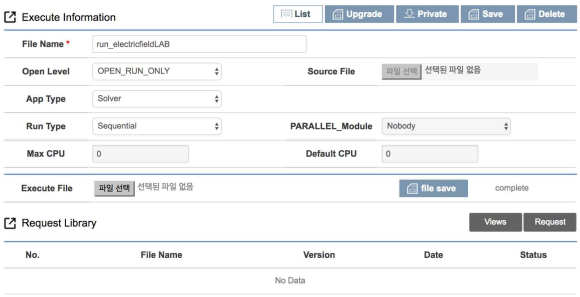
은 기존에 있는 데이터 타입을 선택하거나 새롭게 생성할 수 있으며, 생성 시 편집기와 분석기를 지정할 수 있다. 편집기와 분석기도 등록 관리 기능을 제공하여 다분야의 사이언스 앱을 등록할 수 있도록 하였다. 앱 테스트 단계에서는 앞서 입력된 정보들을 바탕으로 앱을 동작시킨다. 테스트 과정이 끝난 앱에 대해서는 서비스 요청을 할 수 있도록 하였다. 요청한 앱은 사이트 관리자의 승인 과정을 공개가 되며, 사이트 사용자들은 사이언스 앱스토어에서 해당 앱을 사용할 수 있다.

4. 등록 관리 시스템 구현

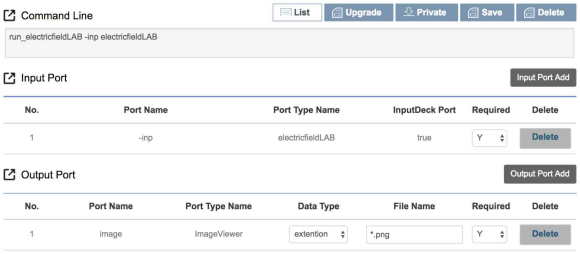
4.1 사이언스 앱 등록 관리

4.1.1 사이언스 앱 정보 관리

사이언스 앱 정보 관리 단계에서는 앱 이름, 서비스 언어, 앱 제목, 앱 버전, 설명, 개발자, 라이센스, 매뉴얼, 카테고리, 아이콘, 앱 관리자 등의 정보를 입력할 수 있다. EDISON 플랫폼은 다국어 서비스를 지원하고 있다. 앱 등록 과정에서도 서비스 언어를 설정할 수 있으며, 현재는 한국어와 영어를 지원하고 있다. 앱마다 고유한 이름을 입력받도록 설계하였으며 버전을 입력받도록 하여 버전별로 등록 관리를 할 수 있도록 하였다. 설명의 경우 위지위그(WYSIWYG) 에디터를 제공하여 자유도가 높은 설명 화



(그림 7) 해석기 관리
(Figure 7) Solver management

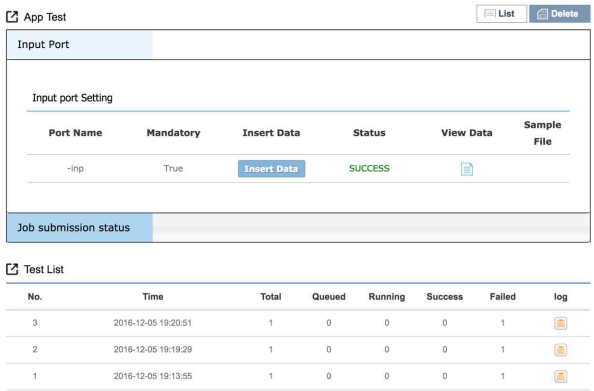


(그림 8) 입출력 포트 관리
(Figure 8) Input/Output port management

면을 구성할 수 있도록 하였다. 서비스 중인 앱의 경우, 서비스를 중지하거나, 앱의 버전을 업그레이드할 수 있다. 그림 6은 사이언스 앱의 정보 관리를 구현한 화면이다.

4.1.2 해석기 정보 등록

그림 7은 해석기 정보를 관리하는 화면이다. 실행환경 정보 단계에서는 공개 범위 설정, 소스코드와 실행 파일 업로드, 실행 파일명, 실행 방식 설정을 정할 수 있다. 공개 범위 설정으로 소스코드 공개 여부를 결정할 수 있다. 이 과정에서 개발자는 자신이 개발한 해석기를 업로드하고, 실행 방법에 대하여 정의하여야 한다. 개발자는 EDISON에서 제공하는 개발 서버나 개인 PC에서 코드 개발을 할 수 있다. 코드 개발이 완료되면 실행 정보 입력 단계에서 컴파일된 실행 파일 또는 소스 코드를 업로드할 수 있다. 소스 코드를 업로드 하는 경우에는 자동으로 컴파일 과정을 거쳐 실행 파일을 생성하게 된다. 현재 Makefile을 통해 컴파일하는 기능을 제공하고 있으며, 프로그래밍 언어별로 예제 코드와 튜토리얼을 제공하고 있다. Github에 등록된 오픈 소스의 경우에도 별도의 업로드 과정 없이 Github 주소만으로 업로드가 되도록 하였다. 실행 파일이 등록된 이후 실행 방법에 대해서 정의를 해주어야 한다. MPICH, OpenMP, OpenMPI 등의 병렬처리 방식을 선택할 수 있으



(그림 9) 사이언스 앱 테스트
(Figure 9) Science App test

며, 프로세서 수의 범위를 지정할 수 있다.

4.1.3 입출력 포트 정보 등록

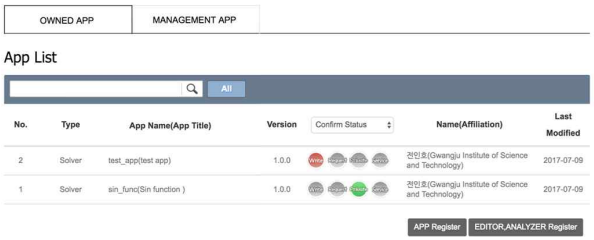
그림 8은 입출력 포트 정보를 관리하는 화면이다. 입력 포트를 추가 메뉴를 통해 포트에 맞는 데이터 타입을 선택할 수 있으며, 실행에 필요한 실행 옵션을 지정하고, 샘플 파일을 업로드할 수 있다. 지정한 실행 옵션은 커멘드 라인 메뉴를 통해 확인할 수 있으며, 자신이 올린 해석기의 실행 명령어와 같은지 확인할 수 있다. 출력 포트의 경우에도 추가 메뉴를 통해 생성할 수 있다. 출력 포트 역시 포트에 맞는 데이터 타입을 지정할 수 있다.

4.1.4 앱 테스트

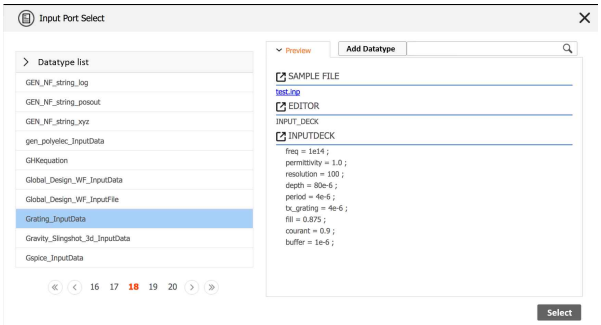
개발자는 입력한 실행 환경 정보와 입출력 포트 정보를 바탕으로 그림 9과 같이 앱 테스트를 진행할 수 있다. 앱 테스트의 성공 실패 여부를 확인할 수 있으며, 실행하면서 생성되는 표준 출력/에러 정보를 확인할 수 있다. 앱 테스트 과정에서 실행한 작업이 에러 없이 완료되면 사이트 관리자에게 등록 요청을 할 수 있다. 이후 관리자의 승인과정을 거쳐 앱 등록이 완료된다.

4.1.5 앱 관리

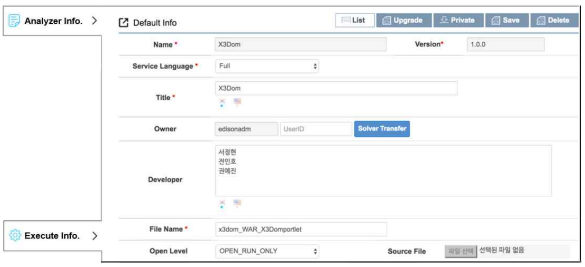
개발자는 앱 관리 화면을 통해 새로운 앱을 생성하거나 자신이 가지고 있는 앱을 관리할 수 있다. 그림 10는 앱 등록관리 화면이다. 자신이 소유하고 있는 앱과 관리자로 등록된 앱을 관리할 수 있으며, 각 앱의 서비스 상태를 확인할 수 있다. 앱 서비스 상태는 작성 중, 서비스 요청, 비공개, 공개로 나누어지며, 앱뿐만 아니라 편집기와 분석기도 등록 관리할 수 있다.



(그림 10) 사이언스 앱 관리
(Figure 10) Science App management



(그림 11) 데이터 타입 관리
(Figure 11) Data type management



(그림 12) 분석기 관리
(Figure 12) Analyzer management

(표 3) 사이언스 앱 관리 시스템 서비스 현황
(Table 3) Service status of Science App management system

분야	서비스기간	개발자	서비스 앱	사용자
CFD	6년	19명	99종	10,656명
NANO	5년	30명	114종	13,048명
CHEM	5년	42명	101종	20,296명
CSD	3년	17명	49종	1,794명
Design	3년	16종	28종	1,399명
CMED	1년	9명	27종	649명
Total	6년	133명	418종	47,842명

4.2 데이터 타입 등록 관리

입출력 포트를 설정하기 위해 데이터 타입을 그림 11은 데이터 타입을 조회하는 화면이다. 키워드를 통해 데이터 타입을 검색할 수 있으며, 데이터 타입의 샘플 파일, 편집기와 분석기 정보를 확인할 수 있다. 원하는 데이터 타입이 없는 경우 생성 메뉴를 통해 새로운 데이터 타입을 만들 수 있다.

4.3 편집기 분석기 등록 관리

시뮬레이션 구성 요소인 편집기와 분석기도 개발자가 등록할 수 있도록 하였다. 그림 12은 분석기를 등록하는 화면이다. 분석기 이름과 버전, 그리고 서비스 언어와 설명을 추가할 수 있으며, Liferay 포틀릿으로 개발된 웹 애플리케이션을 등록할 수 있도록 하였다. 편집기와 분석기 역시 공개 범위를 지정할 수 있으며, 소스코드까지 공개할 수 있다. 등록이 완료된 편집기와 분석기는 관리자의 승인 과정을 통해 등록이 완료되며, 완료된 편집기와 분석기는 데이터 타입 생성 시 추가할 수 있다.

5. 서비스 현황

본 논문에서 제안된 사이언스 앱 등록 관리 시스템은 EDISON 6개 분야 개발자들이 활용하고 있다. 2017년 7월 현재 133명의 사이언스 앱 개발자가 본 시스템을 사용하고 있으며, 418종의 사이언스 앱이 서비스되고 있다. 이에 대한 통계는 표 3에 정리하였다. 데이터 타입의 경우에는 현재까지 1109개가 생성되어 있으며, 편집기는 4종, 분석기는 13종이 제공되고 있다[17]. 전산열유체(CFD) 분야는 Fortran 기반의 사이언스 앱이 주로 서비스되고 있으며, 연산량이 많은 앱에 대해서는 MPI 기반의 서비스를 제공하여, 사용자의 해석 대기 시간을 줄여주었다. 편집기와 분석기의 경우 웹상에서 바로 활용하는 형태가 아닌 PC에 설치하여 사용하는 형태로 제공하고 있다. 나노물리(NANO) 분야에서는 C++와 Python 기반의 사이언스 앱이 주로 서비스되고 있으며, 대다수의 앱이 웹상에서 편집과 분석을 할 수 있도록 제공되고 있다. 계산화학(CHEM) 분야에서는 Fortran으로 개발된 사이언스 앱과 오픈 소스로 제공되는 소프트웨어를 EDISON 시스템에 맞게 등록하여 서비스하고 있다. JSmol, Protein Viewer등의 분석기를 활용하는 앱이 다수를 이루고 있다. 구조동역학(CSD) 분야는 Fortran 언어 가반의 사이언스 앱이 주로 개발되고 있으

며, 편집기와 분석기가 통합된 형태의 PC에 설치하여 활용하는 형태로 제공하고 있다. 전산설계(Design) 분야에서는 C언어와 Python언어 기반의 사이언스 앱이 개발되고 있으며, 워크플로우를 활용하여 등록된 앱에 대한 최적화 해석을 수행할 수 있는 앱 또한 제공하고 있다. 전산의학(CMED) 분야에서는 R언어 기반의 사이언스 앱이 서비스되고 있으며, 일부 앱에서는 자체적으로 개발한 분석기를 등록하여 심장에 대한 3차원 구조를 분석할 수 있다.

6. 결론 및 향후 연구과제

본 논문에서는 계산과학공학 분야의 시뮬레이션 소프트웨어를 온라인에서 제공하기 위한 등록 관리 시스템을 제안하였다. 시뮬레이션 구성 요소를 해석기, 입출력 포트, 데이터 타입, 편집기, 분석기로 나누어 등록할 수 있도록 하였다. 이를 통해 계산과학공학 연구자는 웹 프로그래밍 지식이 없어도 등록된 편집기와 분석기를 사용하여 자신의 시뮬레이션 소프트웨어를 온라인에 등록할 수 있다. 등록 관리 시스템에서는 각각의 구성 요소들에 대해 관리 체계를 구축하였으며, 요소 간의 연관 관계를 정의하였다. 해석기의 경우 C, Fortran, Python, R등 다양한 언어로 작성할 수 있도록 하여 시스템의 범용성을 확보하였다. 또한 연구자가 등록 과정에서 관리자의 개입 없이 등록의 전 과정을 수행할 수 있도록 하였다.

오픈 사이언스 정책의 활성화를 위해 연구 출판물만을 공개하는 것이 아닌 연구 과정에서 생산 다양한 결과물을 공유하는 것이 중요하다. 기술적으로 공유 대상에 적합한 온라인 플랫폼이 필요하며, 이를 통해 많은 사용자가 쉽게 접근할 수 있는 환경이 구축이 필수적이다. EDISON 플랫폼은 계산과학공학 분야의 시뮬레이션 수행 환경을 온라인을 통해 제공할 수 있으며, 소스코드, 데이터, 관련 연구 출판물에 대해서도 공유할 수 있는 환경을 제공해 준다. 이를 통해 계산과학공학 분야의 대표적인 오픈 사이언스 온라인 플랫폼으로 발전할 수 있을 것으로 생각되며, 본 논문에서 제안한 시뮬레이션 소프트웨어 등록 관리 시스템이 큰 역할을 할 것으로 기대된다.

참고문헌(Reference)

[1] Shin Eunjung, An Hyungjun and Jung Wonkyo, "Challenges in Expanding Access to Research Outputs and Moving toward Open Science", STEPI Policy Research Report, STEPI, Dec. 2016.

[2] Merton, Robert K. The sociology of science: Theoretical and empirical investigations. University of Chicago press, 1973.

[3] OECD Daejeon Ministerial Meeting, Korea - OECD.org, http://www.oecd.org/science/sci-tech/sti-ministerial-2015.htm (accessed July 2017).

[4] Was ist Open Science?, http://openscienceasap.org /open-science (accessed July 2017).

[5] Crouzier, Thomas. "Science Ecosystem 2.0: how will change occur." Acta biomaterialia 20 (2015): 51-59.

[6] DSpace, http://www.dspace.org (accessed July 2017).

[7] Open Access Korea, http://oak.go.kr (accessed July 2017)

[8] OSDC, Open Science Data Cloud, http://www.open sciencedatacloud.org (accessed July 2017)

[9] Github, https://github.com (accessed July 2017)

[10] OpenFOAM, The open source CFD toolbox, http://www.openfoam.com (accessed July 2017)

[11] SIESTA, https://departments.icmab.es/leem/siesta (accessed July 2017)

[12] nwChem, http://www.nwchem-sw.org (accessed July 2017)

[13] EDISON, http://www.edison.re.kr (accessed July 2017)

[13] Y.-K. Suh, et. al., "EDISON: A Web-Based HPC Simulation Execution Framework for Large-Scale Scientific Computing Software," in Proceedings of the ACM/IEEE CCGrid'16, May 2016, pp. 608-612. https://doi.org/10.1109/CCGrid.2016.31

[14] Inho Jeon et. al., "Development and Application of Smart-Learning Technology in Science and Engineering Fields," KIPS Review, Vol. 23, no. 1, 2016, pp. 16-22.

[15] NanoHub, https://nanohub.org (accessed July 2017)

[16] McLennan, Michael. "Introducing the Rappture Toolkit.", 2009.

[17] K. W. Cho et. al., "The 6th Annual Report of the EDISON Project," June 2017.

◐ 저 자 소 개 ◑

전 인 호 (Inho Jeon)
2009년 광운대학교 전자공학과 졸업(학사)
2017년 광운대학교 전자공학과 졸업(박사)
2013년~현재 한국과학기술정보연구원(KISTI) 융합연구플랫폼개발실 선임연구원
관심분야 :스마트러닝, 오픈 사이언스, 웹포털 프레임워크
이메일 : inojeon@kisti.re.kr

권 예 진 (Yejin Kwon)
2007년 단국대학교 컴퓨터과학과 졸업(학사)
2014년 단국대학교 대학원 전자계산학과 졸업(석사)
2016년~현재 한국과학기술정보연구원(KISTI) 융합연구플랫폼개발실 연구원
관심분야 : 소프트웨어 공학, 소프트웨어 테스팅, 신뢰성 분석
E-mail : yejinkwon@kisti.re.kr

마 진 (Jin Ma)
2010년 광운대학교 컴퓨터소프트웨어학과 졸업(학사)
2012년 광운대학교 대학원 컴퓨터과학과 졸업(석사)
2012년~2015년 (주)비스텔 선임연구원
2015년~현재 한국과학기술정보연구원(KISTI) 융합연구플랫폼개발실 연구원
관심분야 : 데이터 통합, 빅 데이터, 분석시스템, 분산컴퓨팅, 정보검색
E-mail : majin@kisti.re.kr

이 식 (Sik Lee)
1989년 서울대학교 화학과 졸업(학사)
1993년 포항공과대학교 화학과 졸업(석사)
1996년 포항공과대학교 화학과 졸업(박사)
2000년~현재 한국과학기술정보연구원 (KISTI) 융합연구플랫폼개발실 책임연구원 (실장)
관심분야 : 계산과학, 바이오 인포매틱스, 오픈 사이언스, 이공계 교육·연구 융합
E-mail : siklee@kisti.re.kr

◐ 저 자 소 개 ◑

조 금 원 (Kum Won Cho)
1993년 인하대학교 항공우주공학과 졸업(학사)
1995년 KAIST 항공우주공학과 졸업(석사)
2000년 KAIST 항공우주공학과 졸업(박사)
2000년~현재 한국과학기술정보연구원 (KISTI) 계산과학공학센터 책임연구원 (센터장)
관심분야 : 계산과학, 항공우주, 유체해석, 이공계 교육·연구 융합
E-mail : ckw@kisti.re.kr

서 정 현 (Jung-Hyun Jerry Seo)
1987년 한양대학교 수학과 졸업(학사)
2016년 연세대학교 대학원 졸업(박사)
1987년~현재 한국과학기술정보연구원(KISTI) 융합연구플랫폼개발실 선임연구원
관심분야 : 웹서비스, 웹포털 프레임워크, 정보검색
E-mail : jerry@kisti.re.kr