

KISTI 계산과학 연구 및 지원 프로그램

2016.10.26

한국과학기술정보연구원

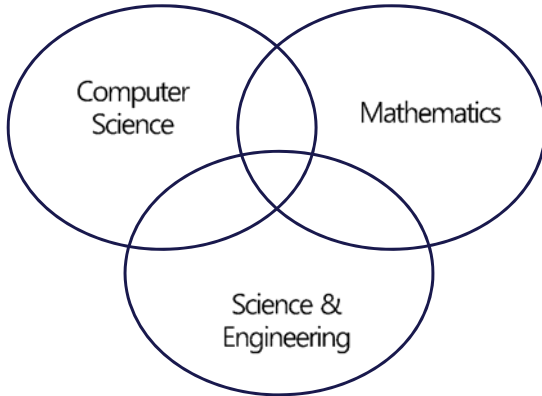
조 금 원(ckw@kisti.re.kr, 042-869-0550)

목차

- 1 **계산과학 동향**
- 2 **KISTI 계산과학 연구 및 지원**
- 3 **계산과학 활성화 방안**
- 4 **향후 계획**

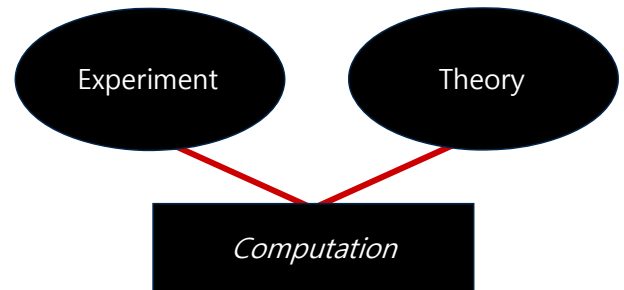
1.1 계산과학 소개

- Computational science seeks to gain an understanding of science through the use of mathematical models on supercomputers



- Team Science
- 융합학문(Multi-disciplinary)
- 1980년대 본격 등장

- 세 가지 연구방법론: 실험, 이론, 계산 (상호 보완적 관계)



- 실험적 방법의 어려움(고비용, 고위험, 장시간) 대체/보완
- 복잡한 과학적/사회적 현상의 즉시 분석(예: 감염병 등)
- Analysis – Prediction

3

1.2 해외 계산과학 동향(교육, 연구 → 산업)



RIKEN Advanced Institute for Computational Science



분자 반응 분석 시뮬레이션 개발 (CHARMM)

산업

제조업 혁신의 Key = 계산과학(Modeling & Simulation)

- 슈퍼컴퓨팅 기반 계산과학 기술 = “게임의 룰을 바꿀 수 있는 증명된 기술” (미국 CoC)

- 경험/시행착오방식의 제품 개발 → 데이터 기반의 과학적 제품 개발



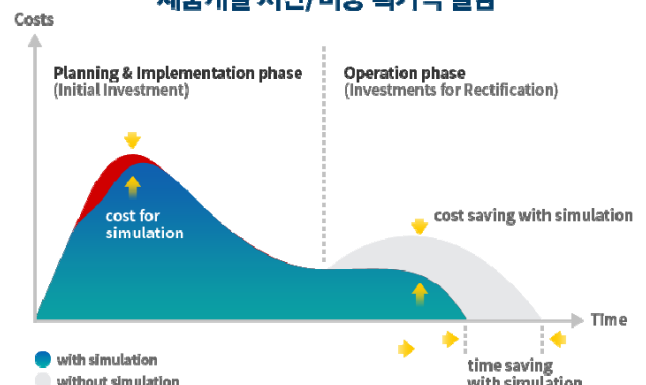
* CoC: 백악관 경쟁력 위원회

“모든 사업분야에서 기업의 크기에 상관없이 슈퍼컴 기반 계산과학은 기업 경쟁과 생존에 필수 불가결 (CoC '08)”

“슈퍼컴 기반 계산과학이 산업 전반의 활용이 어렵게 된다면 미국 주요산업들은 더 큰 위기의 직면할 뿐만 아니라 미국의 산업혁신 생산성 경쟁력 향상 등의 획기적 비약의 기회를 놓쳐 버릴 것 (IDC '08)”

- 주요 선진국은 ICT 기반 제조 혁신을 위한 핵심 수단으로 계산과학(M&S)을 활용하여 제조업 혁신 도모

“제품개발 시간/비용 획기적 절감”



4

1.3 국내 계산과학공학 동향(1)

1 사용자 양분화: 슈퍼컴퓨터 사용그룹, 일반 서버 사용그룹

- Top 1 → Top 500: 6~8년, Top 500 → 서버: 10년 소요

* Euler 방정식: 90년 24hr → 15년 1hr 이내

2 실험/실제 현상과 유사한 복잡한 계산결과 및 신뢰성 요구

- 실제와 유사한 계산 수행으로 현장에서 필요한 결과 요구

* 실험적 방법보다 빠른 결과 도출 기대(최대 1~2주 이내 결과 산출)

3 계산과학 데이터 축적, 재사용, 분석/예측에 활용 요구

- 동일한 계산 지양, 계산데이터 DB 구축, e-Learning 교재 활용

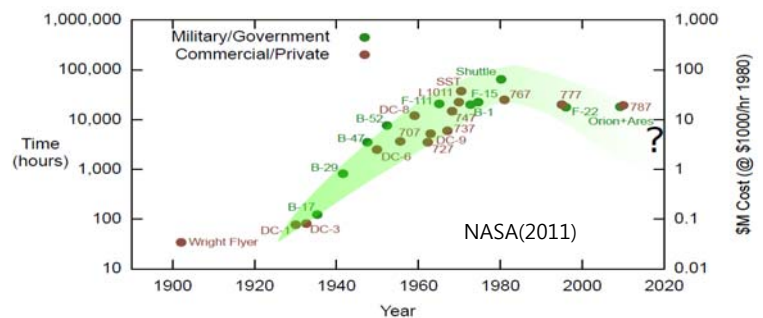
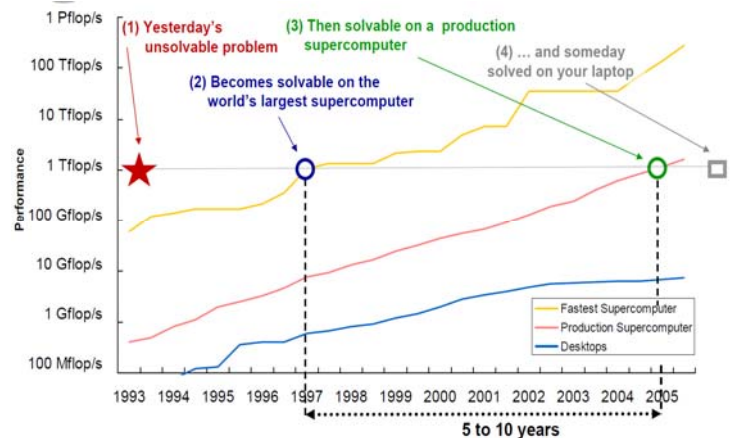
* 미국: NCSA NDS(2014), NSF MGI(2014), 유럽: NoMAD 등

4 계산과학이 무엇인지 잘 모름 → 편리한 사용자 환경

- 플랫폼으로 다양한 SW, 데이터 확보하여 사용

* 기존의 연구방법 활용 및 계산과학 적용 미비, R&D 효율화 필요

출연기관, 설문조사(2015)



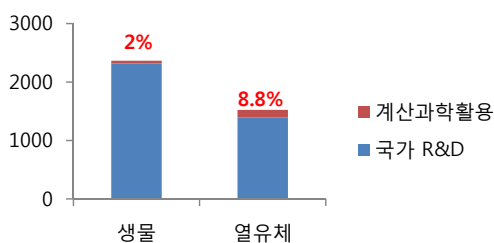
Current wind tunnel costs \$3,000 - \$10,000/hour.

5

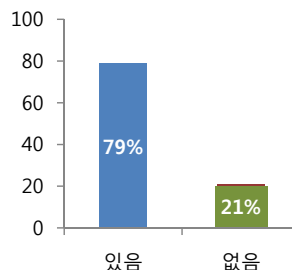
1.3 국내 계산과학공학 동향(2) (출연연)

R&D 생산성 향상 국가 체계 미비하며, 소규모 · 산발적 연구개발 과제 수행

계산과학 활용이 가능한 국가 연구개발과제 조사결과(최근 5년), 활용현황은 극히 저조

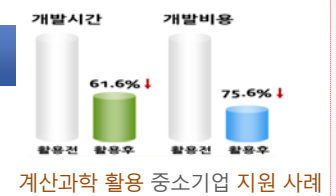


계산과학 활용 의향은 79% 있으나, 64% 잘 몰라서 활용하지 못함



성공사례

계산과학 기술, 전문가, 자원 활용교육 지원으로 개발 시간 61% 단축, 개발 비용 75.6% 절감



(국내) 소재 산업 혁신

- 반복실험에 의존해 장기간이 소요되는 문제 해결
- '웹 기반 계산재료과학 플랫폼' 과 '소재 빅데이터 구축' 을 통해 소재 개발기간 50% 단축 (제 27차 국가과학기술자문회의, 2015.10)

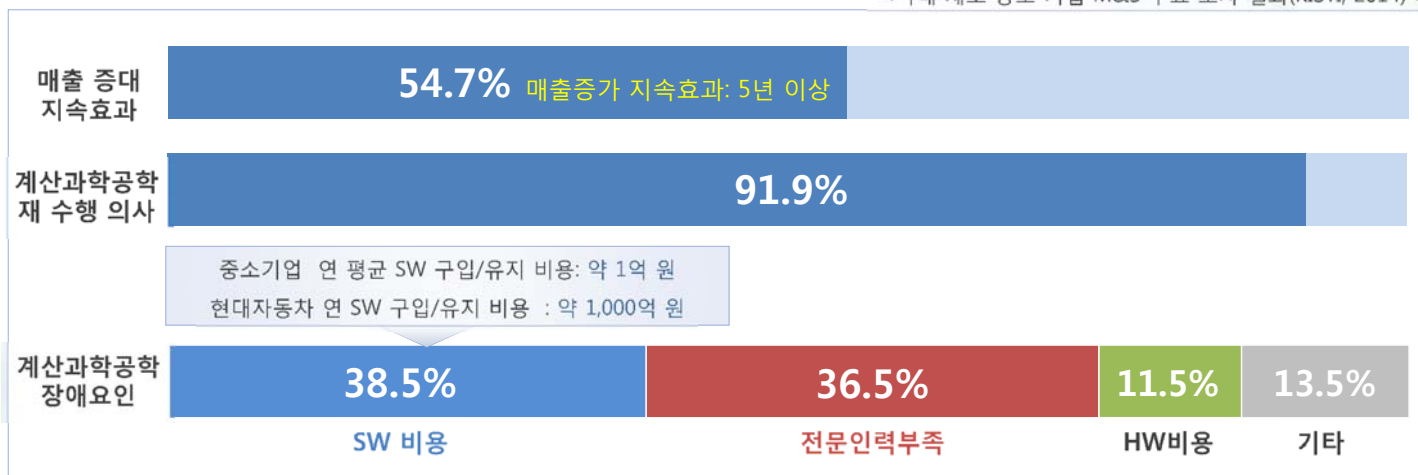


고위험·고비용 실험적 연구 ⇒ 계산과학공학 활용을 통해 개발 기간 단축 및 비용 절감 필요

6

1.3 국내 계산과학공학 동향(3) (중소기업)

<국내 제조 중소기업 M&S 수요 조사 결과(KISTI, 2014) >



고품질 저비용 의 쉽고 편리한

“ 계산과학공학 SW 실용화를 통한 국내 제조기업에 보급이 시급”

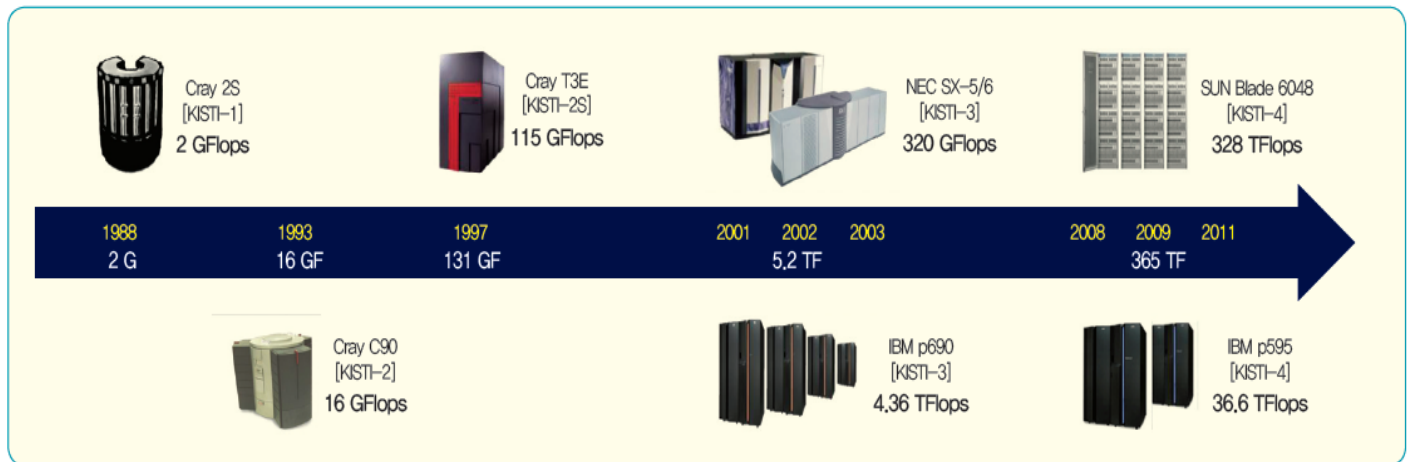
목차

- 1 계산과학 동향
- 2 KISTI 계산과학 연구 및 지원(인프라)
- 3 계산과학 활성화 방안
- 4 향후 계획

2.1 국가 슈퍼컴퓨팅 인프라(1)

KISTI 슈퍼컴퓨터





- 1호기(1988~1993): 과학적 기상 예보 시작 및 국산 자동차 설계 및 제작, 원자력의 안정성 분석
- 2호기(1993~2001): 2000년부터 '전략적 자원 할당제도'(현 응용연구지원프로그램)를 통해 일반 연구자 대상 슈퍼컴퓨터 활용 과제 공모
- 3호기(2002~2007): 전략과제, 거대도전과제지원, 산업체지원 등으로 활용
- 4호기(2008~현재): 핵심과학자, 창의도전연구, 거대문제, 산업체, 공공국가 현안 등 지원으로 확대



9

2.1 국가 슈퍼컴퓨팅 인프라(2)

● 슈퍼컴퓨터

	IBM GAIA		ORACLE TACHYON	
	1차	2차	1차	2차(주력시스템)
아키텍처	SMP		클러스터	
프로세서	IBM POWER5+	IBM POWER6	AMD Opteron	Intel Xeon
시스템				
CPU 수(개)	640 (64/노드)	1,536 (64/노드)	3,072 (16/노드)	3,200 (8/노드)
메모리(TB)	2.6	9.2	6.0	76.8
스토리지(TB)	63	336	207	1,061
이론성능(TF)	5.888	30.7	28.2	300
	36.6		328.2	
노드수(랙수)	10(10)	24(24)	192(4)	3,200(34)
도입일자	2007. 9	2009. 6	2008. 1	2009. 9
퇴역일자	2015.12.31	2015.12.31	2016.4.30(예정)	2017. 9.30(예정)
운영기간	8년 4개월	6년 7개월	8년 4개월(예정)	8년(예정)

10

2.1 국가 슈퍼컴퓨팅 인프라(3)

● SW

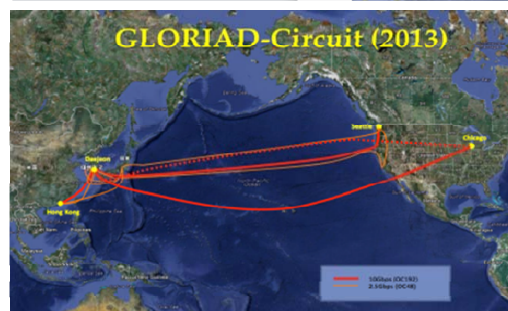
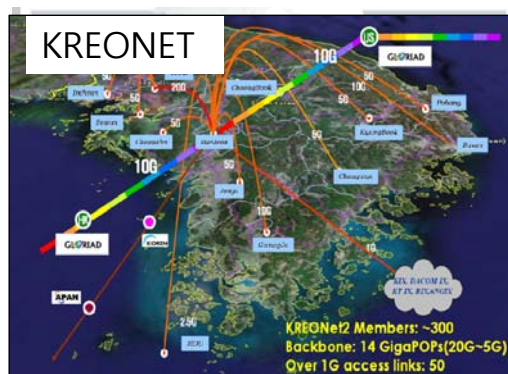
구분	항목
컴파일러	. PGI, Intel Compiler, gcc
프로파일러	. Intel Vtune
디버거	. TotalView 8.8.0
MPI 라이브러리	. MVAPICH, OpenMPI
수학 라이브러리	. FFTW2, LAPACK, Scalapack, Petsc
기타 라이브러리	. HDF4, HDF5, NCARG, NetCDF4
응용 소프트웨어	. gromacs, lammps, namd . ncview, octopus, root-6, siesta

분야	SW 종류	Version
구조해석	ABAQUS	6.13-1
	MSC ONE (NASTRAN)	20141
	LS-DYNA	V971-R612 V971-R711
	Ansys	V13, V14, V15
열유체	CFX	V13, V14, V15
	FLUENT	V13, V14, V15
화학/생명	Gaussian	03/2009
	AMBER	10.0
	Q-Chem	3.2.0.3
	SuperCHARMM	C35B1

11

2.1 국가 슈퍼컴퓨팅 인프라(4)

● 과학기술연구망, 가시화, 대용량 저장장치



● 과학적 가시화 장비

❖ GPU cluster

- Made its debut in February, 2008
- 109 x QuadroFX5800 → 199 GPUs with Fermi architecture (2011)
- 200+ TFLOPS (SPPF, R_{peak}), 100+ TFLOPS (DPFP, R_{peak})



❖ Wall screen / Tiled display

- Wall screen : 2 channel stereo display with 4 x SONY 4k projectors
- IS-900 wireless head tracker & wand
- 6 channel, projection based tiled display



● Global experiment Science Data hub Center



Daejeon (KR) – Seattle (US) : 15Gbps, Daejeon (KR)-Chicago (US) : 10G,
Daejeon (KR) – Hong Kong (CN) : 15 Gbps

12

목차

- 1 계산과학 동향
- 2 KISTI 계산과학 연구 및 지원(연구지원)
- 3 계산과학 활성화 방안
- 4 향후 계획

2.2 슈퍼컴퓨팅 인프라 서비스(1)

슈퍼컴퓨팅 인프라 서비스



가동률 99.234%!!!



기술지원 4,013건
최적화/병렬화 지원 16건
HPC/HTC/MTC/클라우드 지원



장애편 2,332건
예방정비 81건
침해시도 8,063건

PLSI



노드 4,027개
시스템 SW 44종
응용 SW 11종

스토리지



디스크 8,511개

5종 27대
보안 SW 7종



보안 · 네트워크

기반시설



9종 73대

슈퍼컴&서버

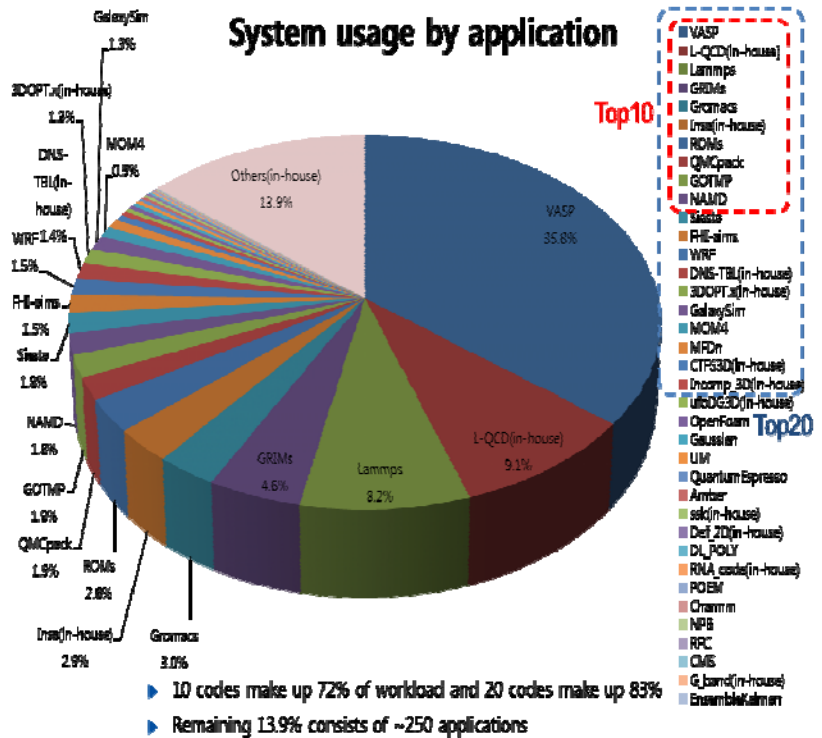
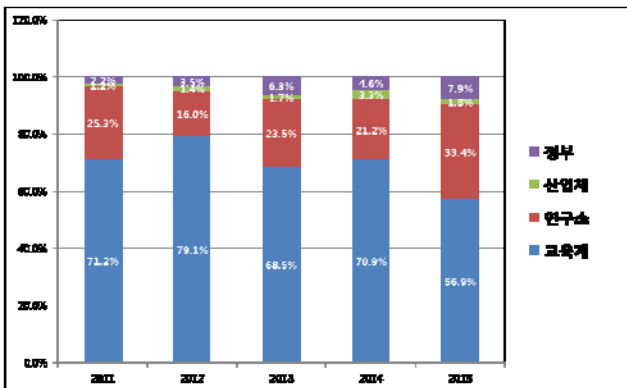
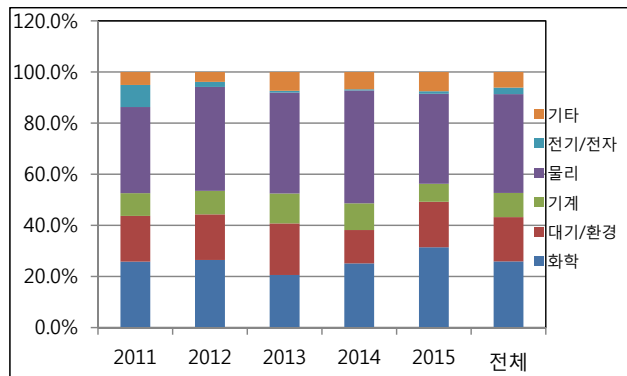


ID수 7,777개
PLSI사용자수 212명



SCI
논문유발
189건

2.2 슈퍼컴퓨팅인프라 서비스(2)



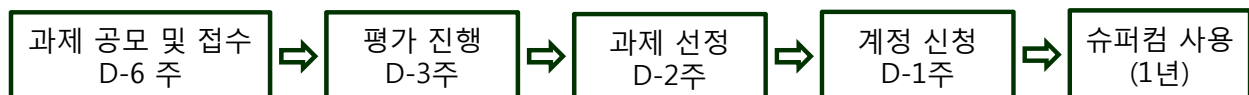
- 전국 182개 기관에서 사용
- NST 산하 소관기관 10% 미만

15

2.3 계산과학 지원 프로그램(1)

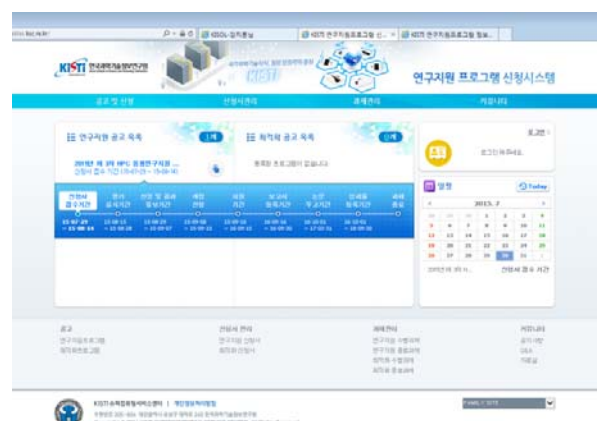
▶ 개요

- 국내계산과학 분야의 연구자들에 대해 2000년부터 슈퍼컴퓨팅 자원을 무상으로 제공
- 자원제공 - 사용지원 - 응용소프트웨어 지원 - In-house 코드 최적화/병렬화지원 - 성과관리 까지 연구 수행에 필요한 슈퍼컴퓨터 활용을 A부터 Z까지 지원
- 연구주제와 문제규모에 따라 200,000~10,000,000 CPU 시간 제공
- 연 4회 과제공모 진행, 신청서 접수 후 peer-review를 통해 자원제공여부 및 자원량을 확정



▶ 안내 및 신청

- 연간계획 (연초) 및 프로그램 차수별 공모 안내
 - 슈퍼컴본부홈페이지 (<http://www.nisn.re.kr>)
 - 슈퍼컴헬프데스크 (<https://helpdesk.ksc.re.kr>)
- 과제 신청 및 관리
 - 응용연구지원프로그램 신청시스템 (<https://enables.ksc.re.kr>)
 - 연구 과제 신청, 평가 결과 확인, 연구성과 입력 및 조회 등 과제 관련 전주기 서비스 제공
 - 과제 평가는 평가시스템 (<https://eval.ksc.re.kr>)을 통해 peer-review 형태로 별도로 이루어짐
- 문의
 - proposals@ksc.re.kr enables@ksc.re.kr



16

2.3 계산과학 지원 프로그램(2)

구분	내용
신규연구분야 (Start-up research)	· KISTI 슈퍼컴퓨팅자원을 처음 이용하는 연구자 · 슈퍼컴퓨팅을 연구에 활용하고자 하는 연구자를 대상으로 함
창의연구분야 (Creative research)	· 창의적인 아이디어 또는 거대과학 문제를 가진 국내 연구자 · 세계 수준의 연구 성과를 창출하고자 하는 연구자를 대상으로 함
도전연구분야 (Grand-challenge research)	· 연구의 수준뿐만 아니라 자원 사용에 있어 세계적 수준의 거대 문제 · 대형 자원을 필요로 하는 연구자를 대상으로 함
국가현안분야 (National agenda)	· 정부부처 또는 연구지원기관에서 지원하는 사업 · 국가현안해결 등 국가/사회적 요구를 위해 전략적으로 선정된 과제를 대상으로 함
특화지원분야 (Specialized support)	· 기술지원, 교육지원, 산업체 지원, 지역커뮤니티 육성 등 미션에 맞는 특화된 서비스

신청대상	· 세계적인 수준의 거대 문제 해결을 위한 대형 자원을 필요로 하는 연구
신청방법	· KISTI 연구지원 프로그램 신청 시스템을 통해 신청
신청조건	· 우수한 수준의 논문을 발표하거나 산업적으로 활용 가능한 결과물을 제시해야 함(년 4회)
선정방법	· 분야별 내·외부 전문가 3인에 의한 서면 평가와 발표 평가를 통해 선정.
지원자원	· Tachyon2: 최대 10,000,000 시간 (500구좌)
연구성과	· 국내외 SCI(E)급 학술지에 최소 1편 이상 논문게재(2편 이상 권장)
사용료	· 무료
지원기간	· 최대 1년, 전용노드사용은 3개월 단위로 사용률을 평가하여 조정

17

2.3 계산과학 지원 프로그램(3) (최적화, 병렬화) (1/2)

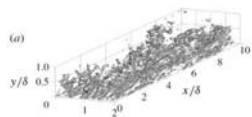
1. 세계 최대 규모 난류 유동 해석을 위한 병렬화 기술 적용 (6,144코어)

내용

난류 유동 해석을 위한 DNS 시뮬레이션 코드에 계층적 병렬화 기술 개발 및 적용

우수성

2단계의 계층적 병렬화를 통해 6,144코어까지 병렬확장성 확보 (세계 최대 규모) [난류 유동 해석 결과]



연구성과

연구팀과 공동으로 SCI 저널 논문 게재
- Physics of Fluids, IF 상위 20%

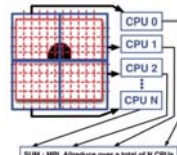
2. 세계최고 수준의 나노 디바이스 모델링 툴 개발 (5,120 코어)

내용

실증적 밀접결합 방법론을 통한 반도체 특성 계산 소프트웨어 개발 및 병렬 성능 최적화

우수성

3차원 영역분할 기반의 5,120코어 병렬 확장성 확보 (나노전자 분야의 세계적 수준)



[병렬화 개념도]

연구성과

SCI(E) 저널 논문 3편 게재
- Nano Letters (IF 상위 3%), J. Comp. Electronics 등

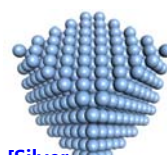
3. DFT 기반 양자화학 소프트웨어 국산화 및 고성능화 (4,608코어)

내용

범용 DFT 기반 양자화학 소프트웨어 개발 및 성능 최적화

우수성

4,608코어 병렬확장성을 가지는 코드 개발 (기존 1,024코어 대비 3.08배 성능 향상)



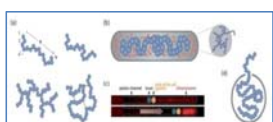
[Silver Nanoparticle]

연구성과

연구팀과 공동으로 SCI 저널 논문 제출
- Journal of Chemical Theory and Computation

4. 계산 생물물리 연구

단백질 접힘 현상 연구 (KISTI 정영균 박사)



5. 전산열유체 연구

3차원 천이 해석모델 3차원 천이 예측 능력 향상 (KISTI 사정환 박사)



6. 계산 반도체 연구

차세대 반도체 연구 (TCAD) (KSITI 류훈 박사)



18

2.3 계산과학 지원 프로그램(3) (최적화, 병렬화) (2/2)

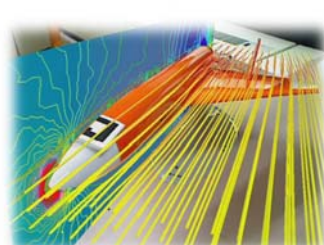
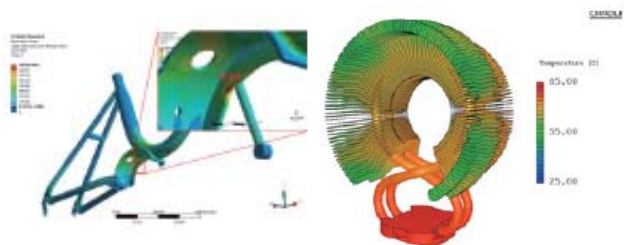
No	사용자	분야	지원내용	연구효율화 (시간단축)	사용 슈퍼컴 CPU수
1	성형진 (KAIST)	기계공학	세계최대 규모의 난류 직접수치모사 병렬화 지원	50%	6144
2	김우연 (KAIST)	화학	양자화학코드 병렬화 및 계산가속기 이식 지원	67%	4608
3	최정일 (연세대)	기계공학	채널 난류 직접수치모사 병렬화 지원	83%	4096
4	이원중 (서울대)	물리과	입자물리 계산 최적화 지원	70%	4116
5	홍성유 (연세대)	대기과학	고해상도 기상모델의 병렬화 성능향상 지원	50%	4096
6	김경연 (한밭대)	기계공학	세계최초 폴리머 항력감소 유동의 열전달 직접수치모사 병렬화 지원	40%	4096

2015년 성과

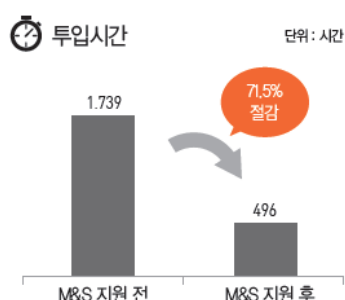
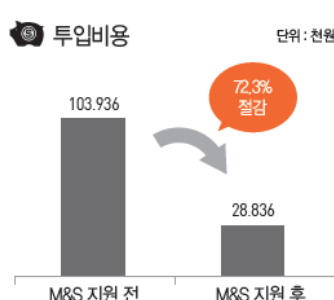
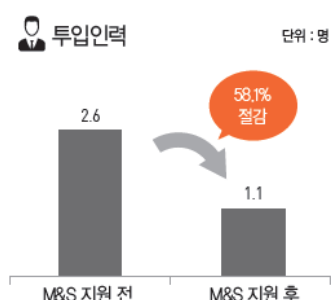
19

2.3 계산과학 지원 프로그램(4) (중소기업)

- 중소기업 제품개발에 슈퍼컴, 계산과학 및 HPC 기술, M&S 시스템, 교육 등을 종합 지원
- 2004년부터 2015년까지 422개 중소기업 지원 ('15년: 개발시간 /비용 71% 절감, NPS 100%)



* 순고객추천지수



목차

- 1 계산과학 동향
- 2 KISTI 계산과학 연구 및 지원(플랫폼개발)
- 3 계산과학 활성화 방안
- 4 향후 계획

2.4 개방형 계산과학 플랫폼 개요(1)

계산과학 분야 R&D

개방형 계산과학 플랫폼



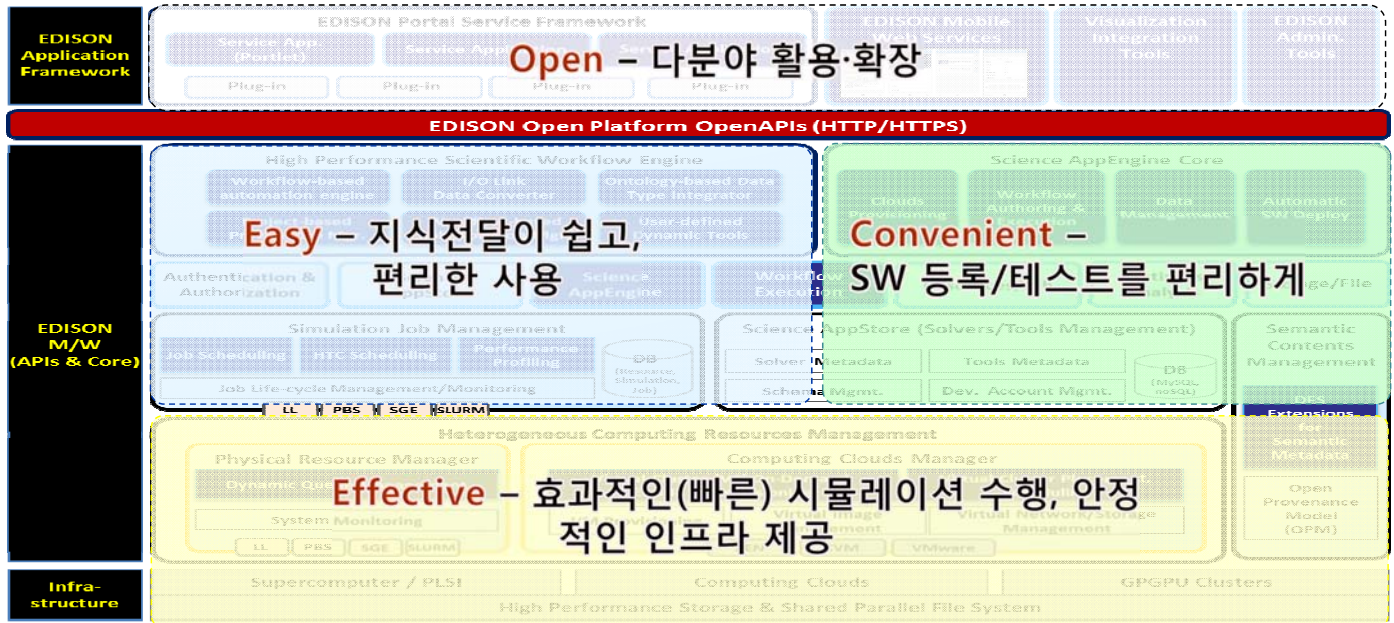
고비용 외산 SW 활용, 장소제약, 콘텐츠 공유·개선 불가능 소규모 산발적 중복연구



- 웹 기반 국산 SW 활용(무료)
- 전처리- 후처리까지 One-stop 시뮬레이션
- 다분야 융합연구

2.4 개방형 계산과학 플랫폼 개요(2)

- 계산과학을 이용하는 다양한 분야에서 사용자들이 연구 및 교육을 좀더 쉽고, 편하고, 효과적으로 할 수 있도록 지원하는 시스템 개발

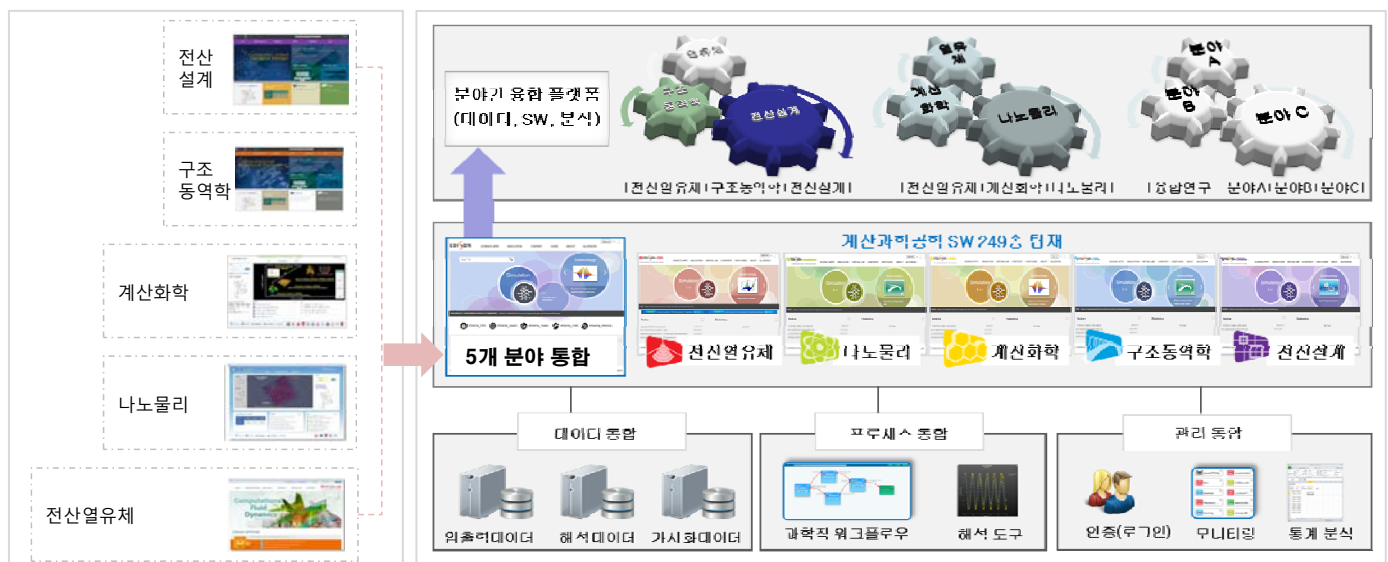


23

2.5 개방형 계산과학 플랫폼 기능(1)

계산 + 데이터 연계가능 플랫폼

- 사용자 요구기반 플랫폼 개발 및 활용
 - 계산·실험·데이터의 재 사용요구 증가 → 계산·실험 데이터베이스 구축 및 데이터 코디네이션 기술 개발
 - 계산과학 SW 및 전문응용분야 간 융합연구 요구 증대 → 계산과학 융합 워크플로우 기술 개발
 - 계산과학분야 시뮬레이션 3D 분석 및 결과 가시화 요구 → 3D 가시화 기술 개발



2011

2016

2020

24

2.5 개방형 계산과학 플랫폼 기능(2)

고정밀/고성능 특화 계산과학 프로그램 개발 및 제품화

- 사용자 요구사항 분석을 통한 고정밀/고성능 특화 프로그램 개발(In-A-BOX) 및 제품화
 - 전산열유체, 나노물리 등 중료 분야 우수 프로그램 중 고정밀/고성능 특화 프로그램 개발
 - 전문응용분야 우수 계산과학 프로그램 기술이전을 통한 제품화

전산열유체 분야 계산과학 프로그램(예시)



가상경계기법 기반 난류 유동해석 SW 이용한 열교환 내부 핀 설계

프로펠러 단독 성능 해석 SW를 이용한 다양한 선박 프로펠러 설계

3D 분석·가시화(통합환경)



데이터 생성, 작업 관리, 계산 제어, 모니터링, 가시화

제품화(예시)



EDISON 계산과학 플랫폼













[전산열유체]
[나노물리]
[계산화학]
[구조동역학]
[전산설계]

25

2.5 개방형 계산과학 플랫폼 기능(3)

시뮬레이션 기반 융합 콘텐츠 개발 및 배포

- HTML5를 이용한 시뮬레이션 체화 기술 개발
 - Everywhere Web 기반 시뮬레이션 체화 환경 개발
 - 시뮬레이션 분석 결과 3D 가시화 기술 적용
- 시뮬레이션 기반 온라인 융합 콘텐츠 개발 및 KOCW, K-Mook 등 공유체계 마련
 - 양방향 시뮬레이션 교육 콘텐츠 개발(Text + 시뮬레이션 + 멀티미디어 콘텐츠)
 - KOCW, K-MOOK 등 온라인 교육 콘텐츠 공유 체계 마련



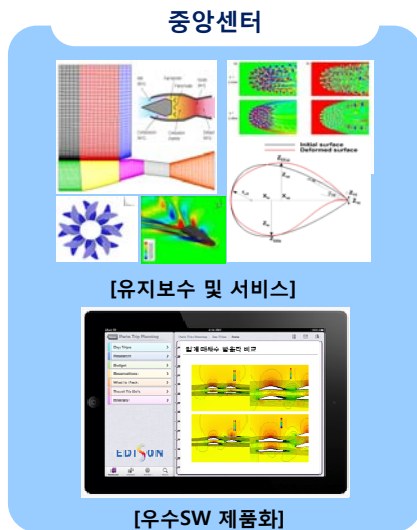
[시뮬레이션 기반 온라인 융합 콘텐츠 예시 = 물리이론 + 계산과학공 SW 연동을 통한 결과 3D 가시화]

26

2.5 개방형 계산과학 플랫폼 서비스(4)

4 계산과학 프로그램 유지보수 및 제품화, 배포

- 계산과학 SW 94종 유지보수 및 8,478명 활용 서비스
- 기 개발된 우수 SW의 고정밀/고품질 특화 SW 개발 및 제품화
- 유관 학회와 연계를 통한 커뮤니티 활성화 및 성과 확산(경진대회 개최 등)



계산과학공학 플랫폼 배포

오픈소스마켓플레이스
(Liferay Market, GitHub 등)

OSM 플랫폼 배포판 v1.0

오픈소스 기반 포틀릿 패키지

사이언스 앱 등록·관리 도구

사용자 인증(보안) 도구

기본 포털 생성 도구

사이버인프라 연동

워크플로우 실행 도구

워크플로우
편집도구

워크플로우
관리도구

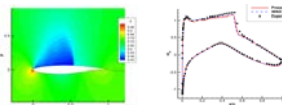
시뮬레이션 결과 가시화 도구

27

2.6 개방형 계산과학 플랫폼 서비스(1)

249종의 계산과학공학 SW를 개방형 계산과학 플랫폼에 탑재하여 서비스

압축성/비압축성 유동 해석을 위한
Euler/N-S SW



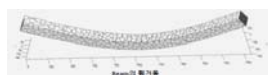
산화물 구조 DB로부터 차세대 반도체 재료로
적합한 신물질 재료 선별



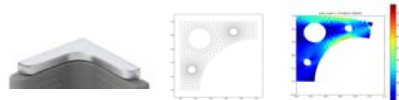
단백질 단위체 서열이나 구조로 부터
올리고머 구조 예측



토목 콘크리트구조물 설계 교육을위한 극한
하중 거동 시뮬레이션



다분야 최적 전산설계를 위한 전산
공학 설계

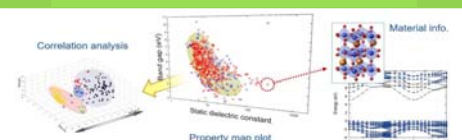


이공계 고등 교육에 활용



[43개대학, 785개 교과목, 32,298명 활용]

계산과학공학 분야 연구에 활용



[양자계산으로 신물질 재료 선별]
(NPG Asia Materials 게재, '15.06)

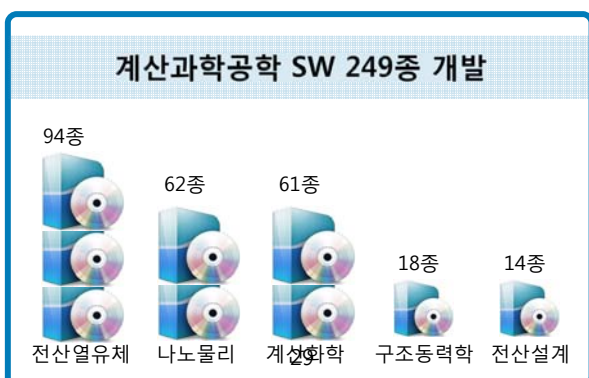
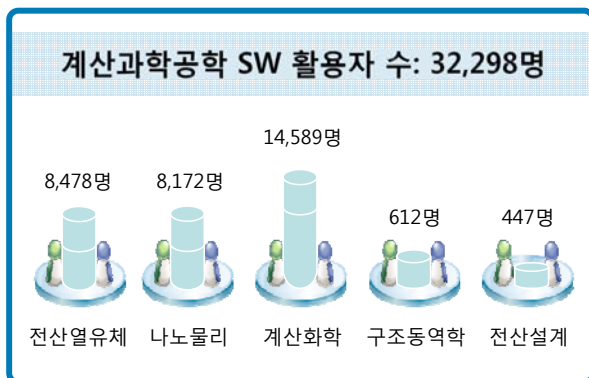
의료, 항공 등 산업계 활용



[기술이전을 통해 암진단, 치료제 개발]
(㈜테라젠이텍스, '15.02)

28

2.6 개방형 계산과학 플랫폼 서비스(2)



년간 180억원의 외산 SW 대체 효과

분야	외산 SW	EDISON SW	경제적 효과
전산열유체	FLUENT	유동해석	10,770백만원
나노물리	COMSOL 기본	반도체 광전자소자 특성해석	6,156백만원
계산화학	AMBER	분자동역학해석	1,190백만원

목차

- 1 계산과학 동향
- 2 KISTI 계산과학 연구 및 지원(가상연구실)
- 3 계산과학 활성화 방안
- 4 향후 계획

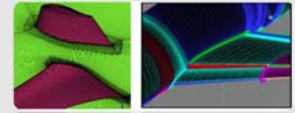
2.7 가상풍동(Virtual Wind Tunnel) 시스템

자동격자/CFD/가상현실 환경의 가시화를 위한 가상풍동 통합 시스템 구축

국방과학연구소
공동연구(방사청 과제)

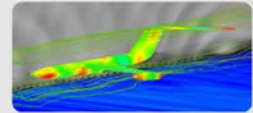
자동화 격자 생성
(자동화 율 70%)

- 자동격자 생성 기법 개발 : **자동화 율 70%**
- 정렬/비정렬/혼합격자 생성 및 최적화



저레이놀즈 유동, 극초음속
을 포함하는 다양한
유동장 해석 능력 확보

- 경계층/충류/박리현상 모델링 및 해석 코드 개발
- 저레이놀즈 수/극초음속 유동장 해석코드 개발
- LES/DES 해석 코드 개발
- 포텐셜 공력 해석 코드 개발
- 전산 해석 코드의 GPU 프로그래밍 : **DPFP 성능 30% 향상**



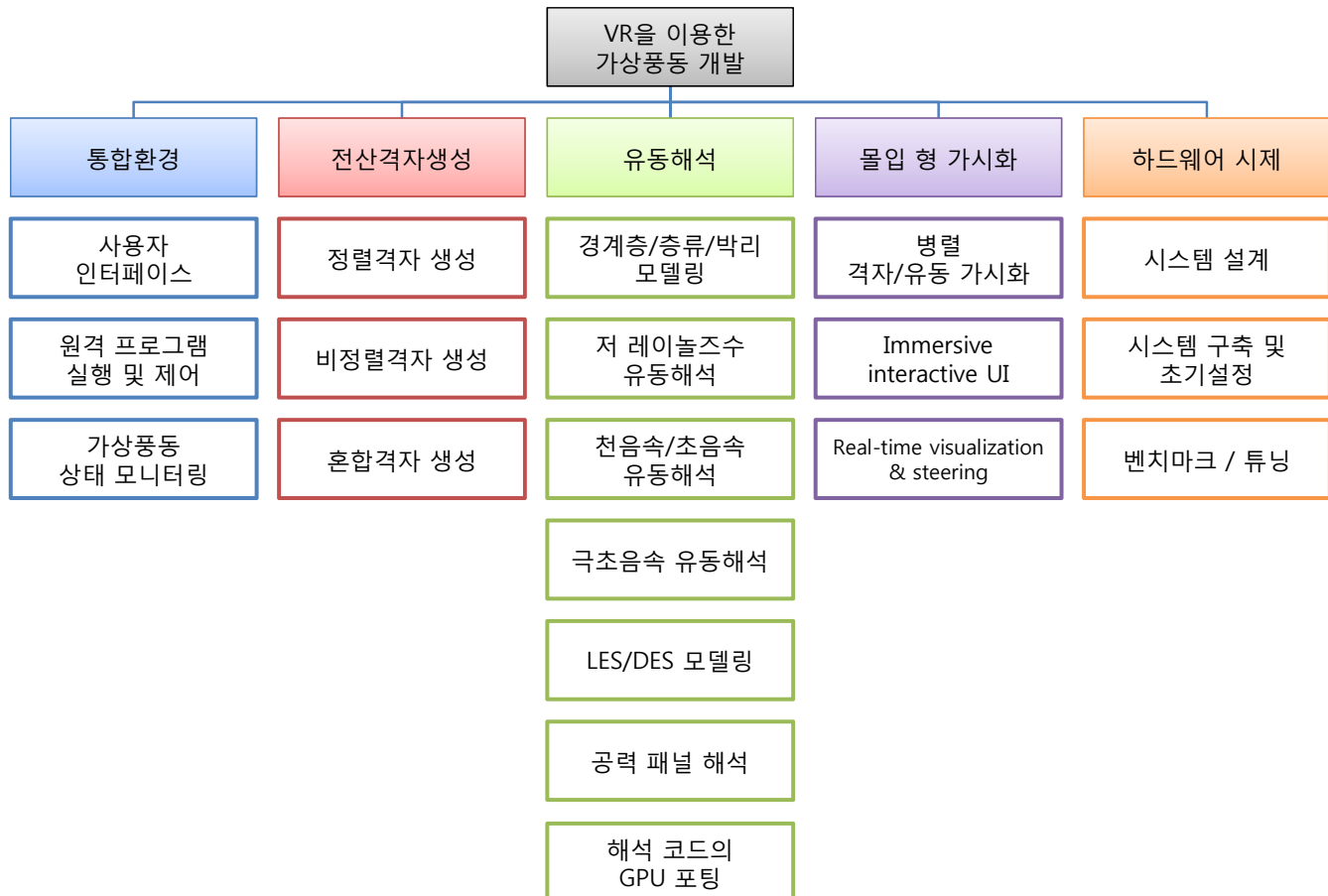
VR(가상현실) 이용
유동 가시화

- 병렬 격자/유동 가시화 프로그램 (**1억개 격자 가시화**)
- Real-time Visualization & Steering 시스템 개발
- Immersive Interactive UI 개발
- 가상 풍동 통합 환경 개발
- 가상 풍동 하드웨어 구성 및 시험평가(성능시험)



31

2.7 가상풍동 시스템 구성



32

2.8 가상풍동 시스템 보급



33

목차

- 1 계산과학 동향
- 2 KISTI 계산과학 연구 및 지원(선도연구)
- 3 계산과학 활성화 방안
- 4 향후 계획

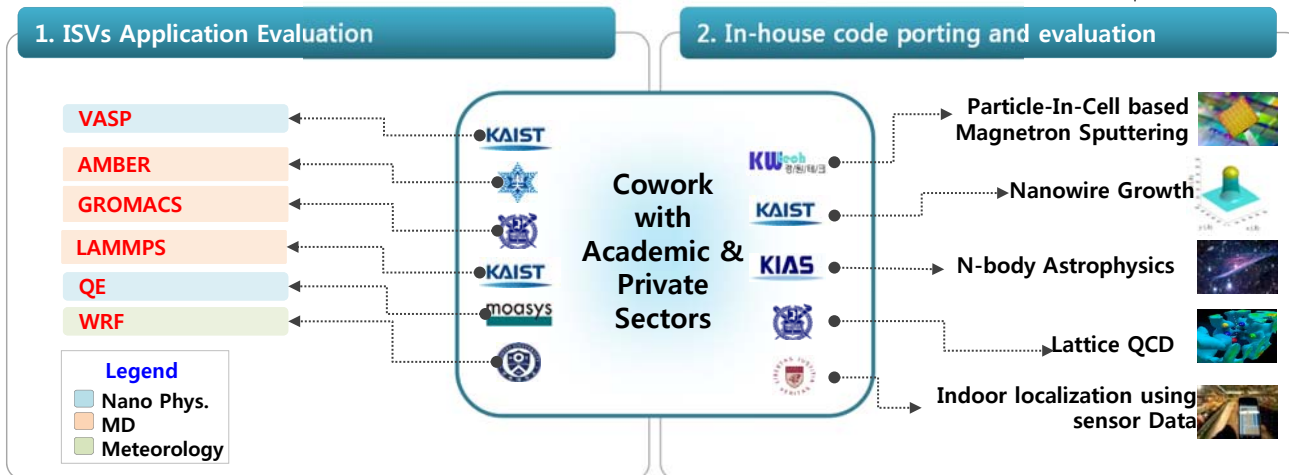
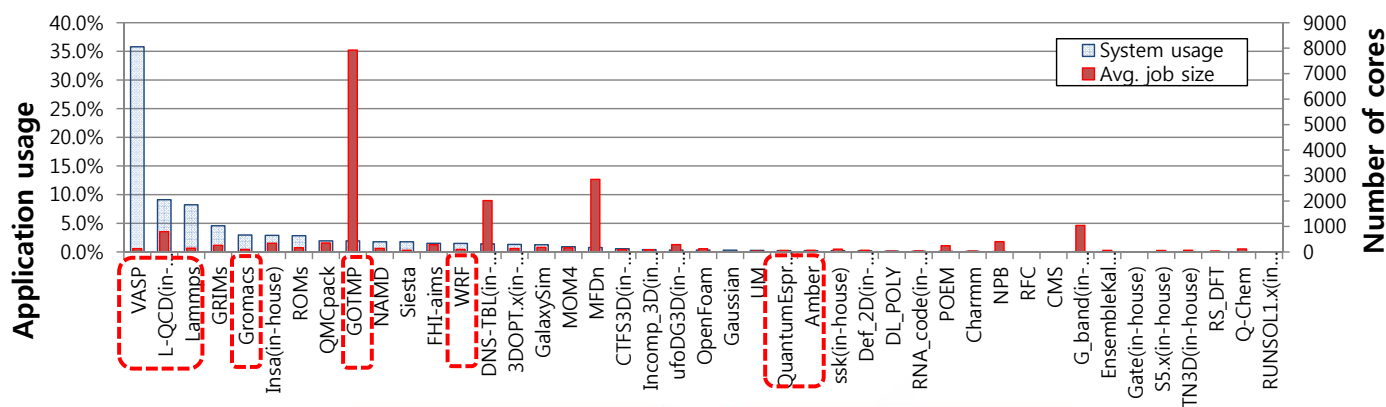
2.9 과학적 컴퓨팅(Scientific Computing) 연구

가속기 테스트베드 구축

Items		Details		
Vendor/system		IBM Nextscale nx360M4		
Nodes		30		
Processor		CPU	Coprocesor / Accelerator	
Model		Intel Xeon E5-2670 v2	Intel Xeon Phi 7120P	nVidia Tesla K40m
Clock speed (GHz)		2.5	1.238	
Processor info	Per socket	10	61	2,880
	Per node	20	61	2,880
	Total	600		
Peak perf. (GFlops)	Per node	400	1,208 (12 node), 2,416 (3 nodes)	1,430 (15 nodes)
	Total	12,000	21,744	21,450
			55,194	
CPU / Accelerator per node		2	1 (12 nodes), 2 (3 nodes)	1
Memory		DDR3 1,866MHz 128GB (16GB x 8ea)	GDDR5 5.5GHz 16GB	GDDR5 12GB
Internal storage		SSD 256GB x 1ea		
Interconnection		IB 4x FDR(56Gbps)		

35

2.10 ISV 및 in-house code 적용(1)

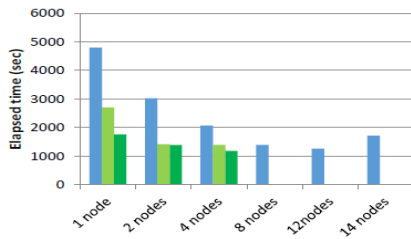


36

2.10 ISV 및 in-house code 적용(2)

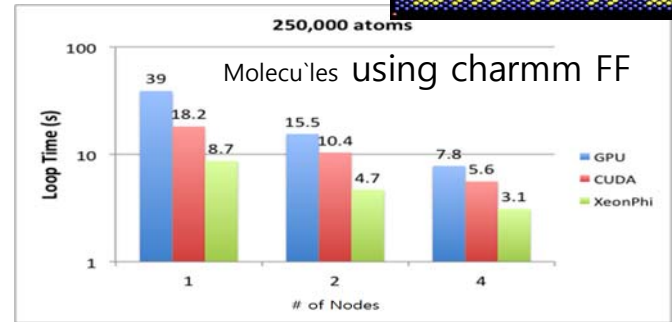


VASP Performance STO663 benchmark

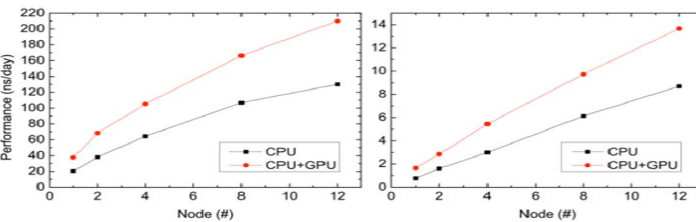
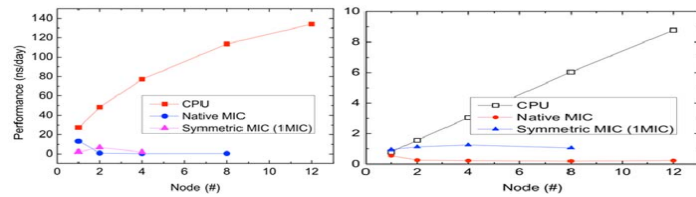


530 at`oms

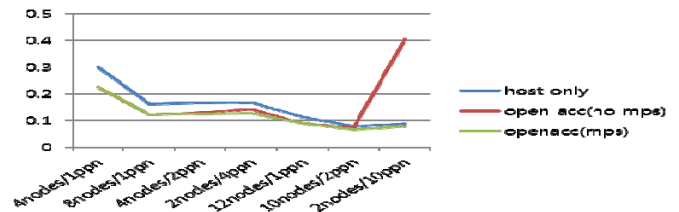
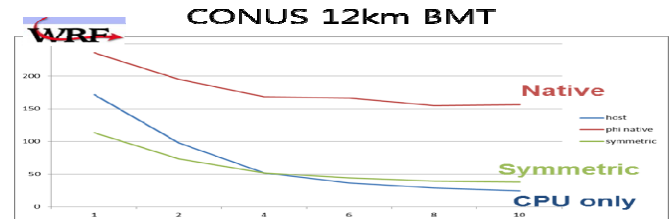
Lower is better



GROMACS



512k water molecules



37

목차

- 1 계산과학 동향
- 2 KISTI 계산과학 연구 및 지원(가상실험실)
- 3 계산과학 활성화 방안
- 4 향후 계획

3.1 출연(연) 계산과학 활용 활성화 추진 경과

- 2015. 6월 : 계산과학 활용 R&D 효율화 방안 마련 계획 수립 (국가과학기술연구회)
- '15. 7~11월 : 계산과학 융합 국가 R&D 동향분석 정책연구(KISTI)
- '15. 10~11월 : 출연(연) 대상 계산과학 활용 수요 조사/워크숍 개최
- '16월 1월: 계산과학 활용 국가 R&D 효율화 과제 착수(800백만원)
 - 공동연구기관: 화학(연), 에기(연), 원자력(연), 협력기관: 표준(연), 재료(연) 등
- '16. 3월 : 계산과학 활용 활성화 방안 마련 (국가과학기술연구회 / KISTI)
- '16. 4월 (미래부 차관 보고) 계산과학 소개 및 계산과학 활용 R&D 효율화 방안
- '16. 5월 : 출연(연) 대상 계산과학 활용 워크숍 개최 및 상시 협력 추진
 - 소재분야: KISTI-화학(연)-에기(연), 원자력 분야: KISTI-원자력
- '16. 4~10월 : 출연(연) 및 융합클러스터, 융합연구단 대상 수요 조사/설명회 개최

39

3.2 출연(연) 계산과학 활용 활성화 추진 계획

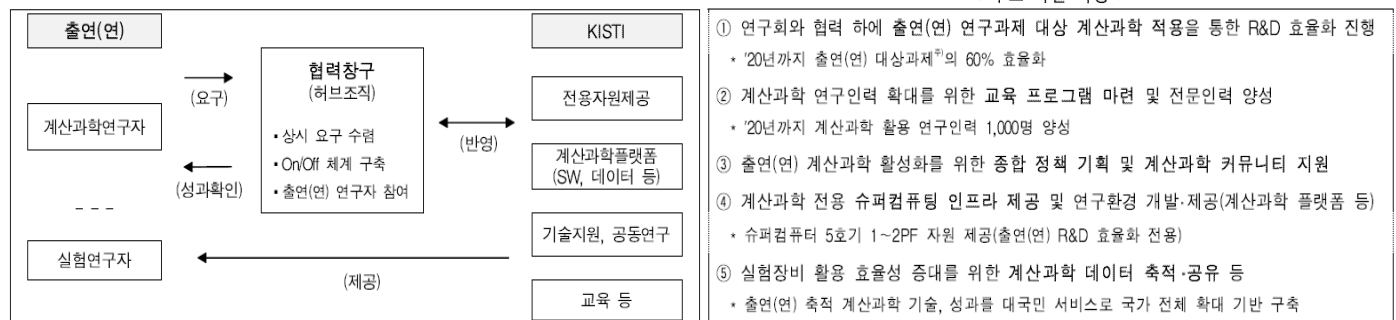
계산과학 육성을 통한 R&D 생산성 극대화

1. 인적, 물적 자원 확충을 통한 계산과학 활용 지원 역량 강화	슈퍼컴퓨팅 인프라 제공 및 기술 지원	4호기, 5호기 1~ 2PF 전용 자원
	계산과학 플랫폼 개발 및 보급	EDISON 플랫폼 활용, 개선
	계산과학 전문인력 육성	1% → 10%로 확대
2. 계산과학 효용성 및 신뢰성 검증을 통한 활용 확산 유도	계산과학 R&D 프로그램 운영	공동연구 추진
	실증용 가상실험실 개발	
3. 체계적인 계산과학 지원을 위한 허브조직 운영	계산과학 지원 허브조직 구성 운영	슈퍼컴퓨팅 융합연구센터 (인프라, 인력, 기술, 지원 등)

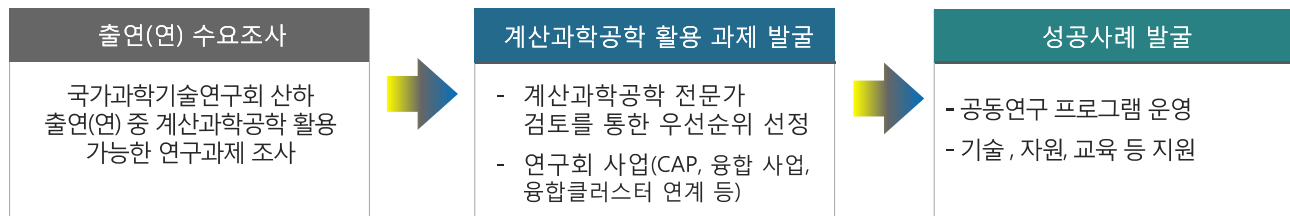
40

3.3 출연(연) 계산과학 활용 활성화 과제 발굴

매년 출연(연) R&D 효율화 과제 발굴(연구회 공동, 안)



매년 출연(연) R&D 효율화 과제 발굴(연구회 공동)



※ NST 산하 25개 출연(연) 중 계산과학 활용 가능 연구과제 수요 조사를 통해 35개 과제 공모(15년 10월,

41

3.4 출연(연) 계산과학 활용 공동연구(2016년)

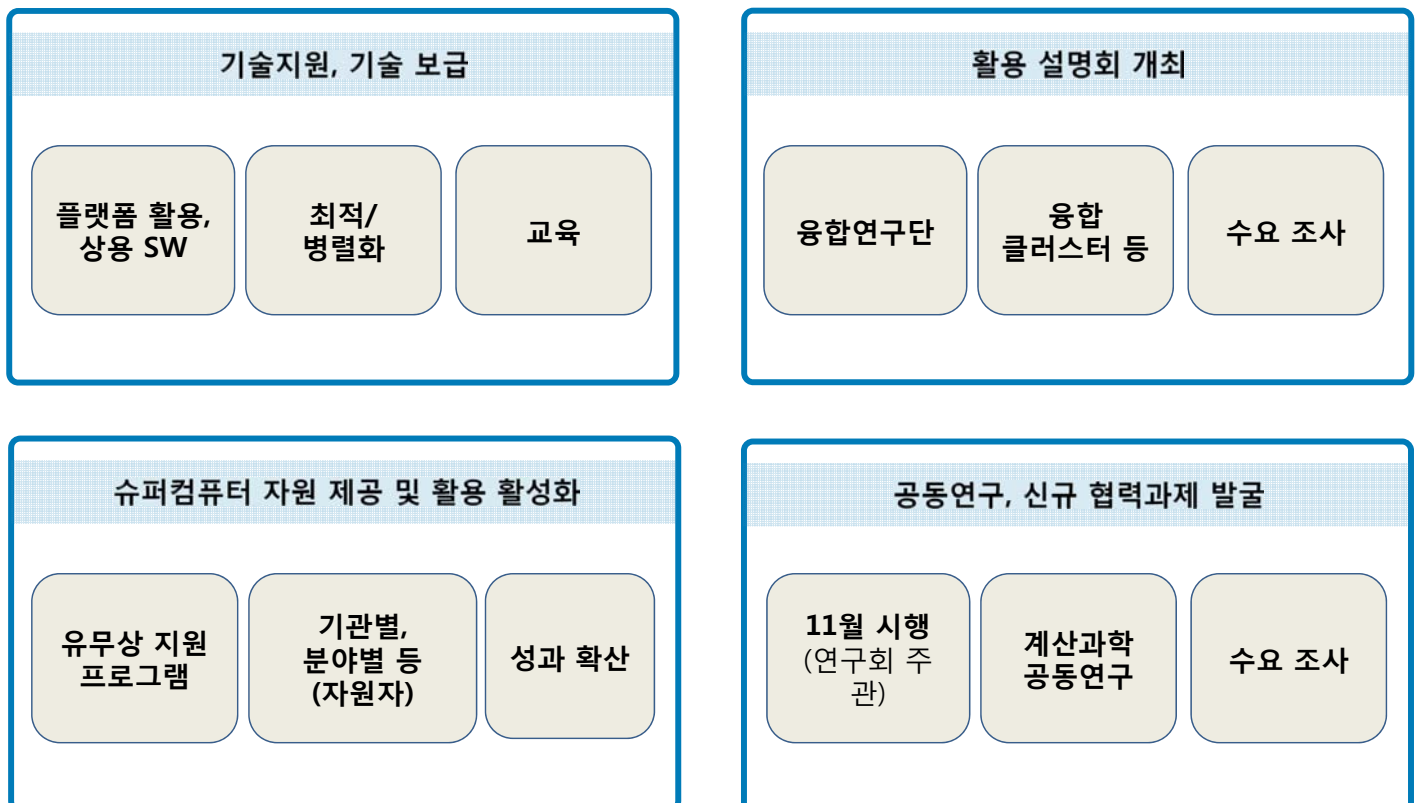


42

목차

- 1 계산과학 동향
- 2 KISTI 계산과학 연구 및 지원(가상실험실)
- 3 계산과학 활성화 방안
- 4 향후 계획

4.1 출연(연) 계산과학 활용 활성화 시행



감사합니다.