

R&D 계산과학을 위한 HPC 클라우드 브로커

박준영, 정기문, 조혜영, 손아영

한국과학기술정보연구원

{jypark, kmjeong, chohy, ayson}@kisti.re.kr

A HPC Cloud Broker System for R&D Computational Science

Junyoung Park, Kimoon Jeong, Hyeyoung Cho, Ayoung Son
Korea Institute of Science and Technology Information

요약

4차 산업혁명과 함께 HPC(High Performance Computing) 환경이 보편화되면서 다양한 연구분야와 서비스에서 고성능컴퓨팅 수요가 증가하고 있다. 고성능 컴퓨팅 수요가 증가함에 따라 컴퓨팅 구성에 대한 복잡도 또한 증가하고 있다. 최근 클라우드 환경이 여러 분야에 적용되면서 R&D 연구자들을 위해 시뮬레이션 및 모델링, 가상 실험 등의 환경을 쉽게 제공하는 HPC 클라우드에 대한 새로운 수요와 서비스 요구사항들이 생겨나고 있으며 여러 과학 분야에 HPC 환경을 보다 쉽게 제공하기 위해 중개자가 필요해졌다. 따라서 본 논문에서는 HPC 클라우드 서비스를 설명하고 계산과학 연구자들이 필요한 HPC 클라우드 서비스 요구사항들을 분석하였으며, 이를 기반으로 HPC 클라우드 기반의 연구환경을 쉽게 개발할 수 있는 HPC 클라우드 브로커 고려사항 및 구조도를 제안한다.

1. 서론

1.1 HPC 클라우드 수요

4차 산업혁명으로 인한 HPC 컴퓨팅 활용의 보편화되면서 CPU 및 병렬프로그래밍 기술의 발전과 함께 거대 컴퓨팅 연산을 통해 분석 및 결과를 도출하는 연구 분야가 증가하고 있으며 Bigdata, AI 등 4차 산업혁명의 근간이 되는 기술들 발전함에 따라 GPU 및 HPC를 활용한 연구·개발이 증가하여 기존 ICT 기반의 연구 환경에서도 HPC 수요가 증가하고 있다.

과학기술 R&D 계산과학 연구 수요 증가에 따라 연구자의 수준별·분야별 다양화가 심화되고 있으며, 이들의 요구사항을 만족할 수 있는 컴퓨팅 환경 필요하다. 또한 전통적인 계산과학 연구자뿐만 아니라 ICT 기반의 AI 연구자 및 응용 개발자 등이 증가함에 따라 다양한 수요 증가하고 있으며 기존의 병렬 처리 기반의 컴퓨팅 환경만을 제공하는 초고성능컴퓨터만으로는 다양 계산과학 분야의 요구사항 해결하기 어렵다.

컴퓨팅 자원의 효율적 운영 및 사용자 편의성 강

화를 위한 클라우드 서비스가 폭발적으로 증가하고 있으나 초고성능컴퓨팅(HPC) 기반의 클라우드 서비스는 차츰 확산하는 추세이며 웹서비스 중심의 ICT 기반의 클라우드 서비스는 민간 사업자를 중심으로 서비스 영역이 넓어지고 있으나 HPC 기반의 클라우드 서비스를 제공하는 민간 기업은 소수에 불과하다. 또한 HPC 클라우드를 활용하여 서버 관리의 어려움을 해소함에 따라 제품이나 서비스 개발기간을 단축하여 기술경쟁력을 강화하는 선진기업의 사례가 늘어나고 있다.

따라서, R&D 효율화를 위하여 계산과학의 클라우드 전환 및 관련 기술개발에 대한 필요성이 부각되고 있으며 연구자들 또한 클라우드 서비스 활용하여 하드웨어, 운영체제, 플랫폼, 응용 SW 등을 컴퓨팅 자원을 직접 구축 및 관리할 필요없이 손쉽게 활용할 수 있는 컴퓨팅 환경에 주목하고 있다. 추가적으로 기존의 필요한 하드웨어, 소프트웨어 등을 연구 도메인별, 사용자별 맞춤 컴퓨팅 서비스를 제공할 수 있어 효율적이고 경제적인 컴퓨팅 환경구축이 가능할 것으로 기대하고 있다.

하지만 아직 HPC 및 계산과학 SW를 지원하는

클라우드 서비스가 부족하며 On-promise 클라우드 환경에서 제공해주고 있는 소수의 HPC 클라우드 서비스만 있다.

1.2 HPC 클라우드 사용자 주요 특징

HPC 작업을 이용하는 사용자들은 대상이 다양하고 범위가 넓기 때문에 본 논문에서 아래 표와 같이 HPC 클라우드 사용자를 특정하고 이를 구분 및 특징을 정의하였다.

구분	주요 특징
전문 계산 과학 연구 자	<ul style="list-style-type: none"> o R&D SW 활용 능력 및 프로그램 코딩에 익숙함 o HPC 클러스터 기반의 병렬처리 계산환경에 익숙함 o 연구자 특화된 SW 보유 및 이를 활용할 수 있는 컴퓨팅 환경 요구 o 거대 계산 데이터 보유 및 이를 저장·분석할 컴퓨팅 환경 요구
일반 계산 과학 연구 자	<ul style="list-style-type: none"> o 텍스트 기반의 Console 환경 및 프로그램 코딩에 익숙하지 않음 o R&D SW 활용에 있어서 GUI 환경에 익숙함 o GUI 기반의 분석 및 데이터 관리할 수 있는 컴퓨팅 환경 요구 o 알려진 R&D SW를 손쉽게 활용할 수 있는 환경 요구
ICT 기반 AI 중심 연구 자	<ul style="list-style-type: none"> o 프로그램 코딩 SW 인터페이스 및 프로그래밍 코딩에 익숙함 o 고성능 GPU가 장착된 서버에서 실행하는 컴퓨팅 환경에 익숙함 o AI 관련 SW 등을 손쉽게 설치·활용할 수 있는 컴퓨팅 환경 요구 o GPU 및 대용량 데이터를 쉽게 활용할 수 있는 컴퓨팅 환경 요구
응용 연구 자	<ul style="list-style-type: none"> o R&D 활용 및 AI 모델을 활용한 응용 프로그램 개발에 익숙함 o 손쉽게 활용할 수 있는 R&D SW 및 AI 모델 및 SW 등을 요구함 o CPU, GPU 등의 다양한 컴퓨팅 환경 및 대용량 데이터 처리할 수 있는 환경 요구함

본 논문에서는 위와 같이 4가지 유형의 사용자들을 대상으로 R&D 계산과학 분야에서 쉽고 간편한 HPC 클라우드 서비스를 제공받을 수 있는 HPC 클라우드 브로커를 제안한다. 본 논문의 구성은 2장에서 HPC 및 클라우드 브로커에 대한 관련 연구에 대해서 기술하고 3장에서는 HPC 클라우드 브로커의 고려사항들을 분석하며 이를 기반으로 4장에서 HPC 클라우드 브로커에 대한 구조 및 역할을 설명한다. 마지막으로 5장에서는 결론을 제시한다.

2. 관련 연구

2.1 HPC(High Performance Computing)

기존의 HPC는 복잡한 문제의 해결을 위한 대용량 정보의 고속처리 인프라로서, 다양한 영역에서 증가 중인 고성능 컴퓨팅 수요에 대응하기 위해 다양한 영역별 사용자의 니즈를 반영한 환경 구축 및 서비스 강화가 필요하다. 이러한 HPC의 주요 특징으로는 병렬 분산 처리 시스템을 기반으로 고속연산 능력과 복잡한 데이터 처리, 대용량 스토리지 연동을 기반으로 모델링, 시뮬레이션, 랜더링 등의 작업들을 수행한다[1].

2.2 HPC 클라우드 클러스터

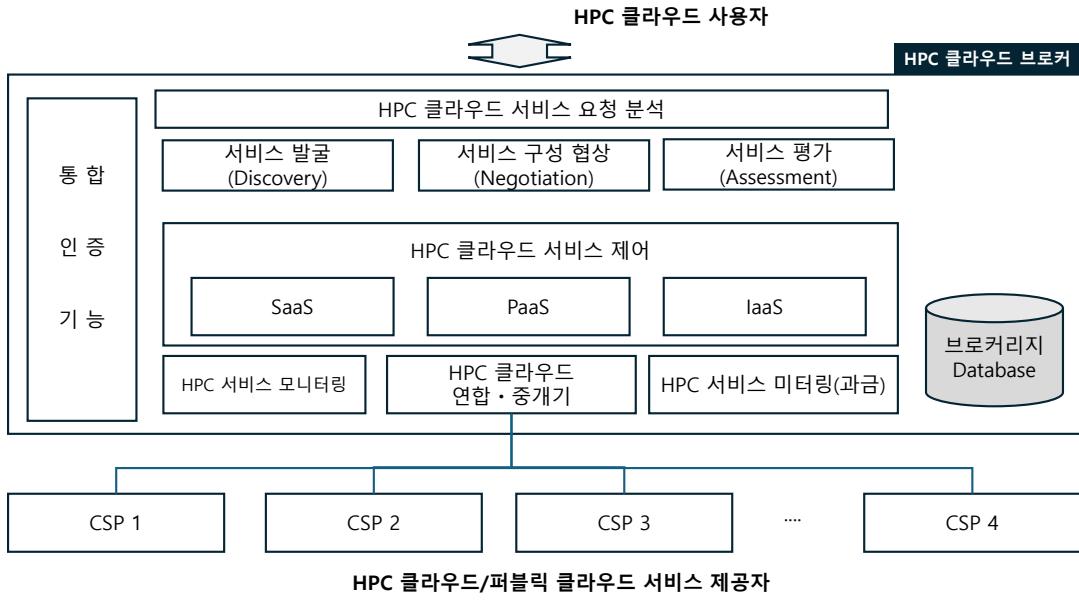
기존의 HPC 클러스터 시스템은 베어메탈서버 (Bare Metal Server)에서 Slurm, PBS와 같은 스케줄러를 기반으로 병렬처리 HPC 작업을 수행하였다. 하지만 자원의 효율성 및 활용도를 향상시키기 위해 클라우드 컴퓨팅과 같은 가상화 기술을 통해 컴퓨팅 자원 가상화와 HPC 클러스터 연구들이 진행되고 있다[2-4]. 또한 가상화 기술로 전가상화와 OS-level 컨테이너 기술이 주로 활용되고 있으며 KVM, Openstack, Docker, Kubernetes와 같은 가상화 소프트웨어들을 중심으로 HPC 클러스터들이 구축되고 있다[5-7].

2.3. HPC 클라우드의 한계점

HPC 클라우드는 거대문제를 연산하거나 많은 환경변수와 요인들을 기반으로 시뮬레이션 등을 지원하기 위한 컴퓨팅 서비스이다. 하지만 고속연산 및 고속 데이터 I/O, 대용량 스토리지 등의 고급의 컴퓨팅 구축 능력과 운영능력이 필요하기 때문에 계산과학 연구자 또는 HPC 응용 연구자들이 컴퓨팅 인프라 구축하기에는 많은 어려운이 존재한다.

같은 맥락으로 클라우드 제공자들은 HPC SW 및 연구환경 구축에 많은 경험이 부족하고 또한 HPC 작업을 위한 필요 SW 정보들이 부족하기 때문에 HPC 작업 수행을 위해서는 많은 전문가들의 협업 및 협조가 필요하다.

이러한 문제로 복잡하고 다수 요인이 존재하는 시뮬레이션이나 모델링 등을 테스트하기 위해서는 많은 전문 인력과 인프라, 시간이 소요되기 때문에 연구자들이 원하는 연구환경을 쉽게 구축하고 고가의 컴퓨팅 자원을 경제적으로 활용할 수 있으며 HPC 또는 HTC(High Throughput Computing) 작업을



(그림 1) HPC 클라우드 브로커 시스템 구조도

지원할 수 있는 HPC 클라우드 브로커가 필요한 실정이다.

3. HPC 클라우드 브로커 고려사항

HPC 클라우드 브로커를 고려하기 위해서는 클라우드 서비스 평가 지표에서 HPC 작업에 대한 특징을 반영하여 다음과 같은 5가지 요인을 기반으로 고려할 수 있다.

- **사용성**: HPC 클라우드 사용자는 계산과학 연구자와 같이 특정 분야의 전문가들이기 때문에 연구자들이 직관적인 UI(User Interface)를 통해 원하는 연구 환경 정보를 입력하면 브로커가 적절한 HPC 클라우드 클러스터를 추천하거나 조합해서 사용자에게 제공할 수 있어야 한다.

- **상호운용성**: HPC 작업들은 고속 연산 장치, 고속 네트워크, 분산 프로세싱 등 고도의 장비와 기술들이 필요하기 때문에 다양한 제공자들의 서비스를 조합하여 사용하는 경우가 많기 때문에 각 서비스간 상호운용성을 고려하여 HPC 클라우드 클러스터 조합이 및 추천이 필요하다.

- **안정성**: HPC 클라우드 사용자들은 거대 문제를 해결하기 위해서 대규모의 연산을 수행하거나 Workflow 형태의 연속적이거나 반복적인 작업을 수행하는 경우가 많다. 따라서 이러한 작업들이 중단되거나 지연되지 않아야 하며 중단되거나 지연되더라도 빠르게 복구가능 해야한다.

- **보안성**: HPC 클라우드 사용자들은 전문분야에 새로운 기술개발 및 실험들을 수행하기 때문에 데이터 및 실험 결과에 대한 유출이 매우 민감하다. HPC 클라우드 사용 및 HPC 작업을 수행 시에 격리된 환경을 제공하고 철저한 접근 제어가 수행되어야 한다.

- **경제성**: HPC 작업은 대규모의 연산을 수행하기 때문에 고속연산장치 또는 대량 연산장치의 병렬 처리 등으로 많은 컴퓨팅 자원이 필요하다. 따라서 HPC 클라우드 브로커는 동일한 성능에 저렴한 HPC 클라우드 제공자의 서비스를 이용할 수 있게 도와줄 필요가 있다.

HPC 클라우드 브로커는 위와 같은 5가지 요인을 기반으로 사용자에게 최적인 HPC 클라우드 서비스를 제공해야 하며 사용자도 동일한 요인으로 HPC 클라우드 서비스들을 평가할 수 있다.

4. HPC 클라우드 브로커 구조

HPC 클라우드 브로커는 사용자와 클라우드 서비스 제공자(CSP, Cloud Service Provider) 간의 중개 역할을 수행한다. 또한 HPC 작업들을 Batch Job 형태의 작업을 수행하거나 Workflow 형태의 연속적 또는 반복적인 작업을 수행하기 때문에 기존의 인스턴스 기반의 클라우드 서비스와는 서비스 형태가 다를 수 있다. 그러므로 사용자의 정확한 서비스 요청

에 적절한 서비스 대응이 필요할 수 있는 HPC 클라우드 서비스 요청 분석을 수행하고 사용자의 요청에 충분히 대응할 수 있도록 CSP 및 HPC 클라우드 서비스 발굴을 주기적으로 수행해야 한다. 또한 사용자가 적절한 서비스를 이용할 수 있거나 조절할 수 있도록 서비스 구성 협상 기능을 제공해야 한다. 추가적으로 사용자가 브로커링 서비스를 이용에 대한 서비스 평가 또는 피드백을 통해 사용자 경험을 개선할 수 있다.

CSP와의 상호운용을 위해서 HPC 클라우드 연합 및 중개기를 통해 HPC 클라우드 및 퍼블릭 클라우드 서비스 제공자에서 제공하는 서비스들을 사용자 서비스를 이용할 수 있도록 조합(Aggregation) 및 서비스 중개를 제공해야 하며 중개 서비스에 대한 모니터링 및 미터링을 제공하여 사용자가 사용하는 서비스에 대한 자원 및 과금에 대한 정보를 확인할 수 있어야 한다.

또한 HPC 클라우드 서비스 제어에서 SaaS, PaaS, IaaS를 제공할 수 있는 대쉬보드 기반의 서비스 중개 화면 또는 제어할 수 있는 화면 등을 제공해야 하며 마지막으로 사용자의 통합 인증 및 클라우드 서비스 중개시 필요한 VPN 등을 기능들도 제공해야 한다.

이러한 브로커링 서비스에 대한 정보들을 Log 정보를 브로커 저장소에 저장하여 사용자가 CSP 사용을 끊더라도 브로커링 서비스를 이용했던 정보들을 제공해야 한다.

5. 결 론

본 논문에서는 특정 연구자들이 HPC 클라우드 서비스를 보다 쉽게 사용할 수 있는 HPC 클라우드 브로커 구조에 대해서 제안하였습니다. R&D 또는 계산과학 분야에서의 HPC 작업들을 기본의 컴퓨팅과는 다르게 Batch Job, Workflow, 스케줄러기반의 병렬처리 등 다양한 작업들이 있기 때문에 사용자 요구사항을 정확히 파악하고 적절한 HPC 클라우드 컴퓨팅 환경을 제공해야 하기 때문에 기존의 클라우드 서비스 브로커와는 다른 구조가 되어야 한다.

이렇게 과학 연구자들은 필요한 컴퓨팅 환경을 HPC 클라우드 브로커에게 요청하여 쉽고 정확하며 경제적인 연구 환경을 제공받을 수 있을 것이다. 또한, 클라우드 서비스 제공자도 더욱 다양한 서비스 개발과 연구자들의 피드백을 통해 추가적인 서비스 개발이 가능하여 HPC 클라우드 브로커의 서비스

정확도 및 품질이 향상될 것으로 예상됩니다.

향후 연구에서는 다양한 연구분야와 작업 형태를 인지하여 HPC 클라우드 브로커의 환경 구성 알고리즘과 최적의 HPC 서비스 조합(Aggregation)을 위한 서비스 조합 메카니즘에 대해 연구할 것이다.

ACKNOWLEDGMENTS

본 논문은 한국과학기술정보연구원(KISTI)의 기본 사업으로 수행된 연구입니다.(과제번호: K-23-L02-C06)

참고문헌

- [1] 손성수, 박정애, 이경용, "HPC 환경에서 클라우드 컴퓨팅 서비스 제공을 위한 최신 기술 동향" 정보과학회지, 2019.10
- [2] E. Deelman, D. Gannon, M. Shields, and I. Taylor, "Workflows and e-science: An overview of workflow system features and capabilities". Future Generation Computer Systems, Vol.25, No.5, pp.528–540, 2009.
- [3] Y. Gil, "Examining the challenges of scientific workflows", IEEE Computer, Vol.40, No.12, pp.24–32, Dec. 2007.
- [4] Schlagkamp, "Understanding user behavior: from HPC to HTC", Procedia Computer Science 80(2016): 2241–2245
- [5] N. Regola and J.-C. Ducom, "Recommendations for virtualization technologies in high performance computing," Proc. of IEEE Second International Conference on Cloud Computing Technology and Science (CloudCom), pp. 409–416, Nov. 2010
- [6] S. Soltesz, H. Potzl, M. E. Fiuczynski, A. Bavier, and L. Peterson, "Container-based operating system virtualization: A scalable, high-performance alternative to hypervisors," SIGOPS Oper. Syst. Rev., Vol. 41, No. 3, pp. 275–287, Mar. 2007
- [7] M. Xavier, M. Neves, F. Rossi, T. Ferreto, T. Lange, and C. De Rose, "Performance evaluation of container-based virtualization for high performance computing environments," Proc. of 21st Euromicro International Conference on Parallel, Distributed and Network-Based Processing (PDP), 2013, pp. 233–240, Feb. 2013.