

## KISTI ISSUE BRIEF

ISSN 2635-5728

과학기술인프라, **데이터로 세상을 바꾸다** 

https://doi.org/10.22810/2022KIB046

2022, 08, 22,

제46호

# 초고성능컴퓨팅인프라 클라우드 서비스 구축을 위한 제언

오광진 · 정기문 · 조혜영 · 박준영 · 박경석

전통적인 계산과학 뿐만 아니라 최근 빅데이터나 인공지능 등 새로운 분야가 대두되면서 초고성능 컴퓨팅인프라의 컴퓨팅 환경에 대한 다양한 요구사항이 제기되고 있다. 기존의 레거시 환경에서는 사용자나 운영자의 다양한 요구사항을 충족시키기 어려워짐에 따라 좀 더 유연한 환경에 대한 필요성이 커지게 되었고 클라우드 기술은 그 대안으로서 많은 관심을 받게 되었다. 본고에서는 초고성능컴퓨팅의 관점에서 클라우드 기술과 서비스에 대한 동향을 파악하고 분석하여 향후 분산되어 있는 초고성능컴퓨팅 자원들을 통합하고 공동활용하는 방안을 모색해 보고자 한다.

## **CONTENTS**

- **1.** 배경
- 2. 클라우드 기술 동향
  - 가상머신 vs 컨테이너
  - MPI 가상화
  - IaaS/PaaS/SaaS/STaaS
  - 멀티/하이브리드/분산 클라우드
  - Cloud Federation
  - 상용 클라우드 플랫폼

- 3. 클라우드 서비스 동향
  - HPC 클라우드 서비스 제공자 동향
  - HPC 클라우드 서비스 동향
- 4. 결론 및 제언
  - 결론
  - 제언



## **1.** 배경

- 4차 산업혁명으로 인한 HPC 컴퓨팅 활용 및 클라우드 서비스 보편화
  - CPU 및 병렬프로그래밍 기술의 발전에 따라 계산이 필요한 모든 연구분야에서 거대 계산을 위한 컴퓨팅 요구가 증가함
  - Bigdata/AI 등 4차 산업혁명의 근간이 되는 기술이 발전함에 따라 GPU 및 HPC를 활용한 연구·개발이 증가함에 따라 기존 ICT 기반의 연구 환경에서도 HPC 컴퓨팅 수요가 증가함
  - 대용량 데이터를 수집·저장·처리하여 인공지능 기반 산업혁신을 위한 핵심 인프라로서 클라우드 서비스의 중요성 확대
  - HPC를 활용하는 계산과학 분야 및 AI, 빅데이텅 분야에서 컴퓨팅 인프라의 효율적 활용 및 사용자 편의성 향상을 위하여 클라우드 서비스 활용 증가하고 있음

## >> 다양한 계산과학을 수행하기 위한 초고성능컴퓨팅(HPC) 클라우드 기술 필요

• 전통적인 계산과학 연구자뿐만 아니라 ICT 기반의 AI 연구자 및 응용 개발자 등이 증가함에 따라 다양한수요 증가중

사용자 구분	주요 특징
전문 계산과학 연구자	<ul> <li>R&amp;D SW 활용 능력 및 프로그램 코딩에 익숙함</li> <li>HPC 클러스터 기반의 병렬처리 계산환경에 익숙함</li> <li>연구자 특화된 SW 보유 및 이를 활용할 수 있는 컴퓨팅 환경 요구</li> <li>거대 계산 데이터 보유 및 이를 저장·분석할 컴퓨팅 환경 요구</li> </ul>
일반 계산과학 연구자	<ul> <li>텍스트 기반의 Console 환경 및 프로그램 코딩에 익숙하지 않음</li> <li>R&amp;D SW 활용에 있어서 GUI 환경에 익숙함</li> <li>GUI 기반의 분석 및 데이터 관리할 수 있는 컴퓨팅 환경 요구</li> <li>알려진 R&amp;D SW를 손쉽게 활용할 수 있는 환경 요구</li> </ul>
ICT 기반 AI 중심 연구자	<ul> <li>프로그램 코딩 SW 인터페이스 및 프로그래밍 코딩에 익숙함</li> <li>고성능 GPU가 장착된 서버에서 실행하는 컴퓨팅 환경에 익숙함</li> <li>AI 관련 SW등을 손쉽게 설치·활용할 수 있는 컴퓨팅 환경 요구</li> <li>GPU 및 대용량 데이터를 쉽게 활용할 수 있는 컴퓨팅 환경 요구</li> </ul>
응용 연구자	<ul> <li>R&amp;D 활용 및 AI 모델을 활용한 응용 프로그램 개발에 익숙함</li> <li>손쉽게 활용할 수 있는 R&amp;D SW 및 AI 모델 및 SW 등을 요구함</li> <li>CPU, GPU 등의 다양한 컴퓨팅 환경 및 대용량 데이터 처리할 수 있는 환경 요구함</li> </ul>

계산과학 연구자들의 연구 수요에 대응할 수 있도록 HPC기반 클라우드 환경에서 병렬처리 컴퓨팅,
 GPU 컴퓨팅, 스토리지 컴퓨팅, 소프트웨어 개발 등을 수행할 수 있는 서비스 기술 개발이 요구됨

- 기존의 병렬처리 기반의 컴퓨팅 환경만을 제공하는 초고성능컴퓨터만으로는 다양한 계산과학 분야의
   요구사항 해결하기 어려움
- HPC 컴퓨팅 자원의 효율화를 위하여 통합·운영할 수 있는 기술 개발이 요구됨

### 국가 초고성능컴퓨팅 공동활용을 위한 클라우드 기술 필요

- 「국가초고성능컴퓨팅 혁신 전략」에 따라 국가센터 및 전문센터 컴퓨팅 자원을 통합·운영할 수 있는 플랫폼으로서 클라우드 기술 요구됨
- 분산되어 있는 초고성능컴퓨팅 자원들을 공동으로 활용할 수 있도록 통합하고 유휴자원을 최소화하여
   활용도를 제고할 수 있는 방안에 대한 필요성이 대두됨

## 2. 클라우드 기술 동향

### 가상머신 vs 컨테이너

- 가상화 방식에는 대표적으로 하이퍼바이저 기반 가상머신 방식과 컨테이너 기반 가상화 방식이 있음
  - 가상머신에서는 게스트 OS에 대한 제약이 없다는 장점이 있으나 컨테이너 가상화에 비해 느리고 프로세서가 하이퍼바이저를 지원해야 한다는 단점이 있음
  - 컨테이너는 루트 경로를 변경하는 방법으로 가상화하며 호스트 OS를 공유하기 때문에 상대적으로 속도가 빠르지만 호스트 OS와 다른 OS를 구동할 수 없다는 단점이 있음



<그림 1> 가상머신 vs 컨테이너

출처) https://www.fitcloud.co.kr/devops\_msa

- OpenStack (https://openstack.org)은 대표적인 가상머신 관리시스템으로 2010년 Rackspace
   Hosting과 NASA가 KVM 기반 가상화 서비스를 제공하기 위해 시작됨
  - laaS 관련 대표적인 솔루션이나 각종 문서와 개발 라이브러리가 Kubernetes 보다 적고 체계적이지 않음
- Kubernetes는 컨테이너 관리시스템으로서 Google에서 개발되어 2014년에 오픈 소스로 공개되었음
  - 컨테이너화된 각종 응용프로그램을 자동 배포하거나 모니터링하고 부하에 따라 컨테이너 개수를 자동으로 조절할 수 있고 장애 발생 시에는 자동 복구가 가능함. rolling 업데이트를 통해 서비스 중단 없이 응용프로그램 업데이트가 가능하며 주요기능 인터페이스만 제공함으로써 다른 오픈소스 및 상용제품으로 내부 컴포넌트를 구성할 수 있고 custom resource 기능도 제공하여 다양하게 확장 가능함
  - 하지만 네트워크, 볼륨, custom resource가 너무 다양(파편화)하여 익숙하지 않으면 초기 학습에 시간이 걸리고 유지보수에 부담이 됨
- Docker Swarm (https://docker.com/)는 2014년 Docker에 적용된 기능으로 여러 노드를 클러스터로 구성해서 컨테이너를 배포하기 쉽게 한 것임
  - Docker에 포함되어 있고 설정이 간단해서 기본원리가 비슷한 Kubernetes에 비해 설치와 운영이 간단하다는 장점이 있으나 GUI, auto scaling, 자동복구 등 기능이 상대적으로 부족하다는 단점이 있음

## MPI 가상화

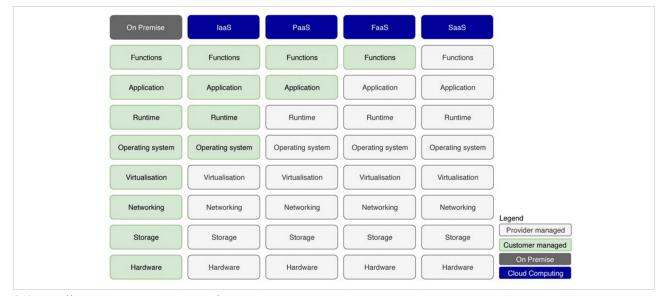
- Hydra는 Docker 컨테이너와 Docker Swarm을 활용하여 MPI를 가상화함
  - MPICH에 포함되어있는 프로세스 관리 프레임워크인 Hydra를 사용함
  - 향후 고려사항으로는 IB를 활용한 가상네트워크, slurm, sge, lsf 등 스케쥴러와의 연계, cloud foundry나 kubernetes와의 연계 등이 있음
- Scylla는 Apache Mesos와 Docker Swarm을 활용하여 MPI 작업을 컨테이너에 분산하고 실행하는 프레임워크임
  - 노드간 태스크를 분배할 수 있고 태스크를 독립적으로 격리할 수 있음
  - 컨테이너 실행도 가능하지만 컨테이너간 가상네트워크 통신을 지원하지 않음
- Distributed MPI cluster with Docker Swarm
  - MPI를 구성하기 위하여 Docker Swarm을 활용하는 형태로 Docker Swarm manager와 work로 구성되는 cluster를 구성하여 동작함
  - cluster가 통신할 수 있는 overlay network 형성 및 SSH 활용한 통신 지원

#### HPC on Kubernetes

- 가상머신으로 구성된 Cluster에 Kubernetes를 구성하고, TORQUE Worfklow로 관리되는 컨테이너 애플리케이션을 배포하여 실행함
- TORQUE는 Workload 관리를 수행하고 Kubernetes는 애플리케이션 컨테이너 Orchestration에 대한 관리를 수행
- 컨테이너 애플리케이션은 MPI만 아니라, command shell에서 실행되는 여러 애플리케이션을 대상으로 함
- 가상머신 클러스터의 Worker node에 Kubernetes 기반의 컨테이너가 배포되어 실행되며, 애플리케이션의 실행은 TORQUE가 담당

## IaaS/PaaS/SaaS/STaaS

- 사용자에게 제공되는 수준에 따라 IaaS (Infrastructure as a Service), PaaS (Platform as a Service),
   SaaS (Software as a Service), STaaS (Storage as a Service) 등 클라우드 서비스를 다양하게 구성할 수 있음
  - IaaS는 CPU, 메모리, 디스크, 네트워크를 가상화한 서비스로서 사용자는 운영체제부터 응용프로그램 까지 자유롭게 설치해서 사용할 수 있으며 AWS의 EC2 서비스가 대표적임
  - PaaS는 운영체제와 개발 환경이나 데이터베이스 엔진 등 실행 환경까지 구축하여 제공하는 서비스로서 사용자는 응용소프트웨어나 데이터를 추가로 설치해서 사용하며 웹호스팅 형태의 서비스가 대표적임
  - SaaS는 사용자가 바로 사용할 수 있게 제공하는 웹 서비스로서 별도 소프트웨어 설치 없이 웹 브라우저 상에서 바로 문서를 편집하고 각종 파일을 공유할 수 있으며 Google Docs와 웹용 Office 365가 대표적임
  - STaaS는 인터넷으로 저장 공간을 서비스해서 여러 형태의 단말기 또는 외부 서비스에서 데이터를 공유해서 사용할 수 있게 하는 서비스로서 Google Drive와 Dropbox가 대표적임



#### <그림 2> On-premise와 Serverless(IaaS, PaaS, FaaS, SaaS) 서비스 구성

출처) https://customers-love-solutions.com/?p=784

## 말티/하이브리드/분산 클라우드

- 멀티 클라우드(Multi-Cloud)는 한 개 이상의 개방형(Public) 또는 사설형(Private) 클라우드가 묶여 있는 클라우드 형태임
  - 자원을 좀 더 유연하게 확장할 수 있음. 현재 자원이 부족하면 새로운 클라우드를 붙이면 됨
  - 단일 클라우드 업체에 대한 의존성을 낮출 수 있음. 비용이나 기술적으로 어려움이 있으면 새로운 클라우드 서비스 업체를 추가하면 됨
  - 하나의 클라우드에 장애가 발생해도 다른 클라우드로 옮기면 되므로 장애 대응에도 효과적임
- 하이브리드 클라우드(Hybrid Cloud)는 서로 다른 클라우드가 묶여 있는 클라우드 형태임
  - 기존 운영하던 서비스의 서버 기능을 클라우드로 옮기지 않은 상태에서 새로 추가하는 클라우드 간에 연동이 필요할 때 구성하는 형태임
  - 아무리 클라우드가 좋아도 기존 것을 옮기는 데는 기술적 어려움과 비용이 발생함으로 이런 하이브리드 형태로 유지할 수 있음
- 분산 클라우드(Multicloud)는 둘 이상의 퍼블릭 IaaS, 퍼블릭 On-demand 관리와 보안 서비스, 프라이빗
   PaaS, 프라이빗 사용량 기반 회계 등 다수의 업체와 기술을 사용하는 형태임
  - 컴퓨팅 장비 위치, 운영체제, 네트워크 망, CPU 아키텍처와 관계없이 다양한 형태의 컴퓨팅 자원들을 꼭 하나인 것처럼 서로 연동하도록 하는 것임

- 주요 기술로는 실행 환경은 컨테이너(container)로 가상화해서 서로 맞추고, 네트워크는 서비스 메쉬 (service mesh)라는 기술로 서로 통신하게 함
- 인터 클라우드(Intercloud)는 "클라우드의 클라우드"란 뜻으로 퍼블릭-프라이빗-하이브리드 클라우드 간의 글로벌 상호 연결을 의미함
  - "서비스의 성능과 가용성과 같은 품질을 보장하기 위하여 실시간으로 다른 클라우드의 자원을 증설하고 워크로드를 이전하여 활용하는 기술"로 정의
  - Inter-Cloud는 Cloud Federation과 Multi-Cloud Service를 포함하고 있음. Federation은 중앙 집중형과 P2P형으로 나뉘며, Multi-Cloud는 서비스와 Library로 나뉨. Multi-Cloud는 사용자가 독립된 여러 클라우드를 활용하는 것으로 DR(Disaster Recovery) 등의 백업을 위한 용도로 활용. 반면에 Cloud Federation은 Cloud 간의 자원 공유 및 워크로드 이동을 지원하는 형태로 이전 Grid Computing의 개념을 발전시킨 형태임

#### Cloud Federation

- CometCloud는 Worker, Hadoop, Workflow 애플리케이션을 실행하기 위해 필요한 자원을 자동으로 산정하고 클라우드나 그리드 등 이기종 자원을 할당하여 배포하고 실행함
  - 다양하고 동적인 QoS 제공이 가능하고, 매우 동적인 리소스의 요구에 따른 리소스와 워크로드로 다양한 이기종 환경의 클라우드(아마존 EC2, MS Azure, GoGrid, etc.)의 연결을 지원함
  - 다음과 같은 목표를 가지고 연구됨
    - 클라우드와 그리드를 통합하는 연합 클라우드(federated cloud) 구축
    - 연합 클라우드들(federated clouds)에서 자율적인 리소스
    - 애플리케이션을 개발하고 연합 클라우드에 배포하기 위한 프로그래밍 추상화 제공
  - CometCloud는 Infrastructure, Service, Autonomics Layer, Programming layer autonomic, Application으로 구성됨
  - CometCloud는 Workflow를 활용하여 TASK를 정의하고 실행하며, Grid(Cluster), Cloud에 접근하여 리소스를 할당하고 애플리케이션을 배포함. 애플리케이션은 필요한 자원과 예상 실행시간을 산정하여 스케줄링하고 실행을 제어하고 모니터링함

- RESERVOIR는 엔터프라이즈급 요구 사항을 해결하기 위해 비즈니스 서비스 관리 및 Cloud Federation을
   지원하는 확장 가능한 모듈식 클라우드 아키텍처임
  - RESERVIOR 아키텍처는 서로 다른 추상화 수준에서 자동화하여 계층간의 문제를 명확하게 분리하도록 설계되었으며 서비스 구성요소는 다음과 같음
    - · Service Manager: 서비스 애플리케이션 용량을 조절, SLA 준수를 모니터링하고 수행
    - · VEEM(Virtual Execution Environment Manager): VEE 호스트 및 다른 사이트의 VEEM과 상호작용하여 Cloud Federation 활성화하고 Service Manager가 결정한 제약조건에 따라 VEE를 VEEH에 최적으로 배치
    - ・VEEH(Virtual Execution Environment Host): VEEM과 상호작용하여 VEE 및 해당 리소스의 기본제어 및 모니터링
    - · Layers of Interoperability: 계층 간의 수직 및 수평 상호운용성을 위해 표준 프로토콜과 인터페이스 사용
    - VMI(VEE Management Interface): 계층 또는 타 VEEM을 방해하지 않고 독립적인 리소스 최적화를 통해 Cloud Federation을 단순화
- SciCumulus는 Cloud 아키텍처의 특성을 고려하여 SWFMS를 보완하는 역할을 함수행하며 과학 Workflow의 병렬 실행을 SWFMS에서 아마존 EC2와 같은 클라우드 환경으로 배포, 제어 및 모니터링 하도록 설계된 경량 미들웨어임
  - MTC(Many Task Computing) 패러다임에 따라 클라우드에서 Workflow 실행을 자동화하는 미들웨어로 desktop, distribution, execution layer 3계층으로 구성됨
    - Desktop layer: WFMS를 사용하여 Workflow 실행을 시작
    - Distribution layer: 워크플로우를구성하는 작업을 인식하고 글로벌 스키마를 사용하여 클라우드에서 일정을 예약하여 클라우드활동의 실행을 관리
    - Execution layer: 실행할 애플리케이션, 실행 전략, 매개변수 값, 입력 데이터가 있는 컨테이너로 할당된 각 인스턴스 pair (Instance cloud activity)에 대해 애플리케이션을 구성하고 실행
- Dohko는 Cloud에서 리소스의 자동 구성 및 배포를 허용하여 자율적이고 목표 지향적인 클라우드
   시스템을 구축하여 사용자가 Cloud Federation 환경에서 애플리케이션을 실행할 수 있도록 지원함
  - Client, Core, Infrastructure의 세 가지 계층과 모니터링 교체 계층으로 구성되며, SOA 기반으로 Loosely Coupling 형태로 결합
    - Client Layer: 애플리케이션 설명자(user, requirements, clouds, applications, on-finish action으로 구성)를 입력으로 클라우드 노드에 작업을 제출하는 모듈

- Core Layer: 프로비저닝, 생성, 구성, 그룹 통신, 데이터 배포 관리, 애플리케이션 실행 모듈로 구성, 프로비저닝 모듈은 애플리케이션 설명자 수신 및 배포 설명자 생성 역할
- Infrastructure Layer: 계층적 P2P 오버레이와 클라우드 드라이버로 구성되며, 클라우드와 해당 노드를 연결하는 데 사용
- Monitoring Cross-Layer: 구성되지 않은 가상 머신 확인 -> 장애 노드감지 후 재시작-> 시스템의 최신 정보 유지용
- C-Ports는 도커 컨테이너의 배포와 실행을 스케줄링하고 자원이 부족한 경우 가용 자원을 탐색하고 선택하며 멀티-클라우드 자원에 접근하여 컨테이너를 배포하고 실행하며 모니터링함
  - 쿠버네티스를 활용할 수도 있지만 쿠버네티스 클러스터에 한정된다는 문제가 있어 CometCloud를 활용하여 Federation을 지원
  - 클라우드 버스팅을 통해 이용률이 80%가 넘으면 자동으로 여유가 있는 클러스터를 탐색하여 컨테이너를 추가로 배포하고 여러 클라우드에 걸쳐 실행하여 throughput을 최대화 함

### ₩ 상용 클라우드 플랫폼

- Red Hat사의 OpenShift는 대표적인 Kubernetes 기반 상용 플랫폼으로서 원래 컨테이너 기반 플랫폼으로 개발되었다가 Kubernetes의 인기가 많아지면서 Kubernetes의 기능도 모두 지원하게 되었음
  - 대부분은 오픈 소스로 공개되어 있어 별도 기술 지원만 없을 뿐 무료로 설치해서 사용할 수 있으나 HPC 노드 구성시 추가 비용이 발생할 수 있음
- Red Hat에서는 OpenStack Platform은 OpenStack 기반 상용 플랫폼으로서 기술 지원을 포함해서 판매하고 있으며, 비용이 노드 당 연간 4,000 ~ 5,000 달러이기 때문에 많은 노드를 사용하는 경우에는 큰 비용 발생함
  - OpenStack의 공식 오픈 소스 버전은 설치가 매우 복잡하나 오픈 소스로 배포되는 Red Hat의 PackStack은 설치가 간편함
- SpaceONE은 굿컨설팅그룹과 같은 그룹사인 메가존 클라우드에서 개발하였고, 2021년 오픈 소스로 공개됨
  - Amazon AWS, MS Azure, Google Cloud, Oracle Cloud, Alibaba Cloud를 지원하며, 한 화면에서 다양한 클라우드를 관리하도록 함
  - 관리 대상은 서버 인스턴스, 요금, 장애/성능 모니터링, 자동 스케줄링 등이 있음

- 주로 모니터링에 기능이 맞추어져 있어 인스턴스 생성과 소프트웨어 배포는 상대적으로 부족
- 멀티 클라우드 지원은 플러그인 방식으로 하고 있어, 모든 소스 코드를 분석하지 않고도 적은 노력으로 다른 클라우드를 지원할 수 있고 UI가 전체적으로 개발자뿐만 아니라 개인 사용자도 사용하기 쉽게 되어 있음
- 클라우드 바리스타는 공개형 클라우드에 시스템을 구축하려는 개발자들이 쓰는 소프트웨어로 AWS 등
   다수 퍼블릭 클라우드에 손쉽게 시스템을 배포하고 관리, 모니터링하는 목적으로 개발됨
  - 2019년 한국전자통신연구원(ETRI) 연구과제로 시작하였고, 오픈 소스로 여러 민간 개발 업체가 참여해서 개발 중이고, 2022년 공식 버전 오픈을 목표로 하고 있음
- 그 외 여러 가지 멀티 클라우드 관련 제품들이 있음
  - Snow-Embotics Commander: https://www.embotics.com/
  - Flexera (RightScale) Cloud Management Platform: https://www.flexera.com/
  - Micro Focus Hybrid Cloud Management: https://www.microfocus.com/
  - Morpheus: https://morpheusdata.com/
  - Scalr: https://www.scalr.com/
  - VMware CloudHealth: https://www.cloudhealthtech.com/
  - HyperGrid: https://cloudsphere.com/
  - BMC Cloud Lifecycle Management: https://www.bmc.com/

## 3. 클라우드 서비스 동향

### 》 HPC 클라우드 서비스 제공자 동향

- Rescale (http://rescale.com)
  - 서비스 개요
    - Rescale은 고성능 컴퓨팅 서비스 아키텍처, 보안 등이 포함된 풀 스택 자동화 솔루션인 Rescale 플랫폼을 제공하고 있으며 직접 데이터 센터를 보유하여 서비스를 제공하는 것이 아닌 주요 클라우드 서비스 제공업체와 온프라미스 데이터 선터에서 하이브리드 및 멀티 클라우드 운영을 가능하게 하는 HPC 클라우드 서비스를 지원하고 있음
    - 또한, 계산 과학과 공학 연구를 위한 IT 및 HPC 설비들을 항공우주, 자동차 산업, 제약산업, 유전체학, 반도체 산업 등과 같은 다양한 산업의 워크로드에 맞게 설계 및 구성하여 고성능 컴퓨팅 서비스를 제공함

#### - 서비스 종류

- HPC Software Application Containers: Singularity 및 Application Container에 대한 고성능다중 노드를 지원하며 고성능 네트워크킹을 통해 HPC 소프트웨어를 제공함으로써 멀티 클라우드, HPC 최적화, 컨테이너 워크플로우 통합 등의 이점들이 발생하는 솔루션을 제공함
- Multi-cloud Hybrid 솔루션: 기존 보유하고 있는 온프라미스 클라우드 환경에서 데이터 관리, 공유 시각화, 병렬처리를 위한 주요 스케줄러 솔루션 통합, 기업별 워크 플로우를 통한 맞춤형 엔터프 라이즈 통합 등을 제공하는 하이브리드 클라우드 솔루션을 제공함

#### - 서비스 특징

- 웹기반 사용자 인터페이스로 서비스 접근이 용이하며 아이콘 중심으로 작업설계를 할 수 있어 직관적인 서비스 이용이 가능함
- HPC 관련 소프트웨어 800개 이상의 상용 및 엔지니어링 소프트웨어를 제공하며 사용 가이드 문서와 예제들을 제공하기 때문에 쉽게 이용할 수 있음
- HPC 하이브리드 클라우드 솔루션을 통해 사용자가 사용 중인 HPC 응용프로그램과 데이터만 관리하여 HPC 컴퓨팅 클러스터 구성을 위한 Tool 또는 추가적인 환경 구성 등이 필요 없음
- 일부 상용 HPC 소프트웨어는 사용한 만큼만 지급하는 라이선스(On-Demand)를 제공하고 있어서, 라이선스 취득에 따른 비용과 부담이 적음

- 개인 사용자만의 특별한 컴퓨트 노드 클러스터 환경을 구성할 수 없으며 라이브러리 환경, 별도 소프트웨어 설치, 스토리지 접근 방법 등을 제공하지 않기 때문에 HPC 환경에 대한 Customization 이 불가능함
- Nimbix (https://atos.net/en/solutions/high-performance-computing-hpc/hpc-as-a-service)
  - 서비스 개요
    - Nimbix는 머신러닝, AI 및 HPC 어플리케이션을 위해 클라우드 컴퓨팅 서비스를 제공하고 있으며 JARIVCE로 구동되어 HPC, AI, 양자 등을 as-a-service로 제공하는 전용 클라우드 구축 및 관리로 수행함

#### - 서비스 종류

• Nimbix Cloud JARVICE로 구동되며 고성능 SaaS를 제공하여 에너지, 생명과학, 제조, 미디어 및 분석 어플리케이션 등을 위한 고속의 데이터 처리를 제공하여 사용한 만큼 지불하는 pay-per-use 서비스를 제공하고 있음

#### - 서비스 특징

- AI 및 양자, HPC 소프트웨어들을 제공하고, 일부는 라이선스 취득 없이 사용하도록 지원하고 있으며 관련 소프트웨어에 대한 demo 영상 및 사용 가이드 등을 제공하여 사용자 편의를 제공함
- Federated supercomputing-as-a-service를 제공하여 Console을 통해 퍼블릭 또는 프라이빗 HPC, AI 등의 모든 컴퓨팅 서비스를 이용할 수 있음
- HPC 서비스들에 대한 자세한 목록을 제공하지 않으며 AI 및 양자 컴퓨팅에 대한 소프트웨어가 다수로 내부 클라우드에 설치해서 사용하는 JARVICE XE라는 소프트웨어 제품을 별도로 판매하고 있음

### Amazon AWS HPC (https://aws.amazon.com/ko/hpc/)

- 서비스 개요
  - AWS에서는 HPC 서비스 라인업을 구축하여 대규모의 복잡한 시뮬레이션 및 딥러닝 워크로드를 AWS에서 실행할 수 있도록 서비스를 제공하고 있음

#### - 서비스 종류

- Elastic Fabric Adapter: 고 수준의 노드간 통신 기능을 포함하여 HPC 어플리케이션을 대규모로 제공함
- AWS ParallelCluster: 병렬처리 환경을 위한 빠른 클러스터를 구성할 수 있으며 전통 HPC 스케줄러인 Slurm, PBS를 이용해서 HPC 응용프로그램을 실행할 수 있음

- Amazon FSx for Lustre: 밀리초 이하의 지연 시간을 제공하는 고성능 파일 시스템을 통하여 대용량 데이터를 대규모 연산으로 빠르게 처리할 수 있음
- AWS Batch: 자체 커맨드 라인 툴이나 포탈 화면을 통해서 작업 컴퓨트 클러스터를 구성하고, 사용자가 만든 컨테이너 이미지를 실행할 수 있음
- AWS에서는 SageMaker라는 머신 러닝 소프트웨어를 제공하고 있으며TensorFlow, PyTorch, mxnet, Keras 등을 포함해서 사용할 수 있고, Jupyter Notebook을 통해서 다양하게 표현할 수 있게 하고 있음

#### - 서비스 특징

- 클러스터 크기를 사전에 정하지 않고, 사용하지 않는 자원을 최대한 끌어서 저렴한 요금으로 사용하는 옵션도 있는 것이 특징이며 Slurm 같은 전통적인 HPC 스케줄러 Tool을 그대로 이용할 수 있음
- 기본 컴퓨트 클러스터 구성부터 각각 명령어를 익혀야 하고, 다양한 사용법을 익혀야 하는 등 복잡하고 어려우며 웹 포탈 화면도 상당히 복잡하여 처음 사용하는 사용자는 추가 학습이 필요함
- Microsoft Azure (https://azure.microsoft.com/ko-kr/solutions/high-performance-computing/)
  - 서비스 개요 및 종류
    - AWS Batch와 유사한 Azure Batch를 툴과 포탈을 제공하며, CycleCloud라는 커맨드 라인 툴을 이용해서 클러스터를 만들어 Slurm 같은 전통적인 HPC 작업도 가능함
  - 서비스 특징
    - AWS와 동일하게 대규모의 데이터 센터를 통해 무한에 가까운 클러스터를 구성할 수 있으며 Azure의 다양한 어플리케이션을 함께 활용할 수 있음
    - Azure도 Azure ML이라는 머신러닝 서비스를 제공하고 있음
- Google Cloud Platform (https://cloud.google.com/solutions/hpc)
  - 서비스 개요
    - AWS, Azure와 비슷한 HPC 클라우드 서비스를 제공하지만, 상용 HPC 서비스를 제공하는 것이 아니라 HPC 사용 문의를 통해 사용자에게 HPC 컴퓨팅 환경을 제공하는 방식임
    - HPC 클라우드 서비스 사용을 위한 사용자 가이드 등이 제공하며 병렬처리를 위해 Slurm 및 HTCondor 등 워크로드 스케줄러를 제공하고 있음

- 네이버 Cloud (https://www.ncloud.com/product/compute/hpc)
  - 국내 HPC 클라우드 서비스를 위한 활동들이 진행되고 있으며 네이버의 데이터 센터와 Rescale의 HPC 솔루션을 기반으로 HPC Cloud 서비스를 준비하고 있음

### 》 HPC 클라우드 서비스 동향

- Tsuru (https://tsuru.io)
  - Docker 기반 PaaS(platform as a service) 시스템으로 개발 언어별로 바로 실행해서 웹 서비스를 해준다는 특징이 있음
  - 하드웨어 설정 없이 개발된 웹 서비스를 빠르고 쉽게 배포할 수 있음
  - HPC를 위한 프로그램 개발을 수행할 수 있지만 아직까지는 전문적인 HPC 작업 기능을 제공하지 않음
- Jupyter Lab, Jupyter Notebook (https://jupyter.org/)
  - 다양한 컴퓨터 언어들을 웹상에서 코딩 작성 및 실행하고 실행 결과를 확인할 수 있게 해주며 Jupyter Notebook 기능은 연구 보고서 문서를 작성하면서 관련 그래프, 표를 실시간으로 바뀌도록 로직 소스 코드를 문서에 직접 넣을 수 있게 지원함. 또한, HPC job 결과 보고에 활용할 수 있음
- R Studio Server, Shiny (https://www.rstudio.com)
  - R Studio Server는 통계와 빅데이터 분석에 자주 쓰이는 R 소프트웨어를 웹상에서 바로 쓸 수 있게 제공하며 R Studio 서비스 또한 HPC job 결과를 이용해서 추가적인 통계 처리에 활용할 수 있음
  - Shiny는 Jupyter Notebook처럼 문서를 작성하면서 관련 표나 그래프 첨부를 R 기능을 활용해서 실시간으로 변화량을 보여주며 다양한 입력 박스도 지원해서 R을 모르는 최종 사용자가 매개변수를 손쉽게 변경해 가면서 바뀐 결과를 바로 확인할 수 있어 HPC job 결과에 대한 시각화 툴로 활용할 수 있음
- Spark Web UI (https://spark.apache.org/docs/latest/web-ui.html)
  - Spark 실행 상황을 모니터링하는 웹 도구로 활용할 수 있으며 HPC job에서 빅데이터 분석에 활용되는 spark를 실행했다면, Spark Web UI를 이용해서 웹상에서 그 실행 상황을 자세히 확인하고 제어할 수 있음
- AiiDAlab (https://www.materialscloud.org/work/aiidalab)
  - 웹 인터페이스를 통해 작업을 제출하고, 상태 모니터링, 데이터 분석, 후처리 같은 워크플로를 실행하는 플랫폼임

- Jupyter 화면을 기반으로 워크플로우 엔진은 AiiDA를 사용하며 오픈 소스 자체 App Store가 있어서 분석, 계산, 모델링, 시뮬레이션 등 필요한 여러 앱을 설치할 수 있음
- 기본 컨테이너 방식으로 설치 및 구동됨

## Galaxy (https://usegalaxy.eu/)

- 웹 기반 데이터 분석 플랫폼으로, 데이터 업로드 후 여러 도구를 이용하여 데이터 분석/실행, 결과 데이터 시각화, 워크플로우를 설정할 수 있음
- 단순 텍스트 형식 변경부터, 생명과학 데이터 조작 등 여러 도구가 존재하며 결과 데이터를 사용하여 여러 종류로 시각화할 수 있음
- 캔버스를 사용하여 도구를 등록하고 워크플로우 구성하여 순차 실행 가능하며 워크플로우 재사용 및 공유를 할 수 있음

#### Amazon SageMaker

- 기계학습을 위한 데이터와 알고리즘, 프레임워크를 빠르게 연결하여 쉽게 ML 구축이 가능한 클라우드 서비스이며 3가지 모듈(구축, 학습 및 배포)로 구성되어 있음
  - 구축 모듈: 호스트된 환경을 제공하여 데이터를 처리하고 알고리즘을 실험하며 결과를 시각화함
  - 학습 모듈: 적은 비용으로 한 번의 클릭을 통해 대규모의 모델 학습 및 조정이 가능함
  - 배포 모듈: 관리형 환경을 제공하여 안전하고 짧은 지연 시간으로 유추 모델에 쉽게 호스트하여 테스트할 수 있음

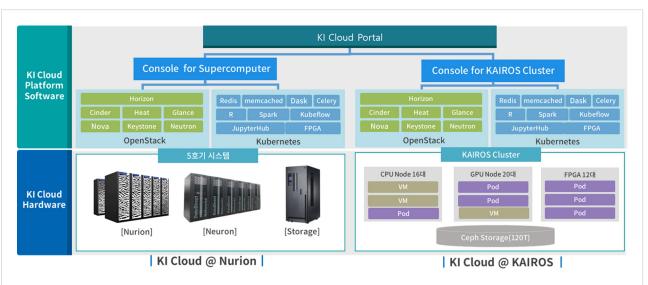
### Microsoft Azure Machine Learning 서비스

- 기술 수준과 관계없이 요구 사항을 충족하는 도구를 사용하여 기계학습 모델을 신속하게 빌드 및 배포하며 코드 없는 에디터를 사용하거나, 코드 중심 환경에는 기본 제공하는 Jupyter Notebook을 사용함
- 기계학습을 위한 DevOps인 MLOps는 모델 빌드에서 배포 및 관리에 이르는 기계 학습 수명 주기를 간소화하며 ML 파이프라인을 사용하여 반복 가능한 워크플로를 빌드하고, 풍부한 모델 레지스트리를 사용하여 자산을 추적함. 또한 고급 경고 및 기계 학습 자동화 기능을 사용하여 대규모의 프로덕션 워크플로우를 관리함
- 기계학습의 모델학습 및 추론을 위한 오픈소스 도구 및 프레임워크를 제공하며 PyTorch, TensorFlow 및 scikit-learn 같은 프레임워크나 상호 운용 가능한 개방형 ONNX 형식을 사용함

## 4. 결론 및 제언

## 결론

- 초고성능컴퓨팅(HPC)을 위한 클라우드 서비스 제공 현황
  - 기존 클라우드 서비스를 이용하여 병렬 분산처리를 위한 HPC 환경 구축은 가능
    - 다수의 컴퓨팅 자원 및 스토리지를 네트워크로 연결하여 병렬분산 처리를 수행할 수 있는 오픈소스 설치하여 구축
  - 상용 클라우드 업체는 대부분 병렬 분산처리 환경을 쉽게 구축하는데 초점
    - 상용 HPC 클라우드 서비스들은 자유도는 높지만, 사용 방법이 너무 복잡하고 어렵다는 것이 가장 큰 단점임
  - HPC에 특화된 병렬분산처리 중심의 클라우드 서비스 제공 업체(Rescale, Nimbix 등) 일부 존재
    - 사용자들이 손쉽게 HPC 소프트웨어를 사용할 수 있도록 제공하는 것이 장점
- HPC 클라우드 서비스 KI Cloud (KISTI Intelligent Cloud)
  - KISTI의 슈퍼컴퓨터 5호기 및 고성능서버 클러스터를 인프라로 활용할 수 있는 사용자 맞춤형 클라우드 서비스
  - 오픈소스인 Openstack 및 Kubernetes를 기반으로 가상머신 등의 IaaS 서비스와 프로그래밍, 데이터 분석 등을 위한 Jupyter notebook, Rstudio 등 어플리케이션 서비스 제공



<그림 3> KI 클라우드 서비스 및 HW 구성도

- KISTI의 클라우드 서비스는 다른 클라우드 서비스보다 HPC 기능에 집중해서 제공해야 하고, 최대한 다양한 사용자들이 손쉽게 사용할 수 있어야 함으로 Rescale, Nimbix가 목표에 가까워 보임

## 제언

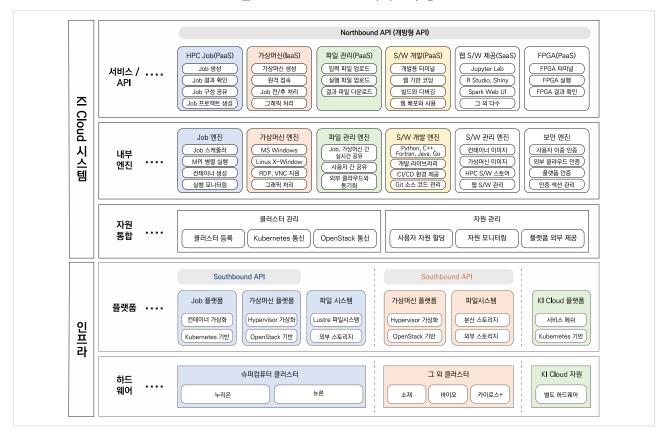
#### • KISTI의 HPC 클라우드 구축 방향

- 컴퓨팅 인프라 중심의 클라우드 서비스에서 계산과학 연구자를 위한 소프트웨어, 데이터 중심의 클라우드 서비스 제공
- 복잡한 코드 없이 데이터분석, 시뮬레이션 등 데이터 중심의 계산과학에 집중할 수 있는 컴퓨팅 연구환경 제공
- HPC 성능이 보장되도록 초고성능 인프라 장비(서버, 스토리지, 네트워크 등)를 클라우드 인프라로 활용할 수 있는 기술 개발

#### • 과학기술분야 계산과학을 수행할 수 있는 클라우드 플랫폼(안) 수립

- 다양한 계산과학 연구자들이 HPC 컴퓨팅 인프라를 효율적으로 활용할 수 있는 클라우드 플랫폼 제안
- HPC 컴퓨팅 인프라를 클라우드로 통합하기 위한 자원관리 및 가상 클러스터 관리 기능 등을 개발
- 계산과학 R&D 컴퓨팅 서비스 및 SW개발 플랫폼을 운영하기 위한 플랫폼 엔진 및 API 서비스 개발
- 계산과학을 쉽게 수행할 수 있는 R&D 컴퓨팅 서비스 제공
  - 가상 클러스터 기반의 MPI 병렬처리, 가상서버 운영, 소프트웨어 개발 플랫폼, 가상머신 이미지, 보안 인증, 데이터 관리 등을 위한 엔진 모듈 개발
- HPC Job에서 수행할 SW 개발 및 SaaS 어플리케이션 플랫폼 개발
  - SW 개발 플랫폼에서 개발된 SW의 HPC Job 플랫폼 연동 기능 개발
  - · 사용자가 이용할 수 있는 웹인터페이스 및 기능 등의 SW 개발 플랫폼 개발

#### <그림 4> KI Cloud R&D 서비스 구성도



## 참고문헌

- An Autonomic Computing Engine for Computational Science and Engineering Applications in Cloud Computing and Grid Environments (Moustafa Abdel Baky, Hyunjoo Kim, Ivan Rodero and Manish Parashar)
- A user-centered and autonomic multi-cloud architecture for high performance computing applications Alessandro Ferreira Leite)
- Container orchestration on HPC systems through Kubernetes (Naweiluo Zhou1, Yiannis Georgiou, Marcin Pospieszny, Li Zhong, Huan Zhou, Christoph Niethammer, Branislav Pejak, Oskar Marko and Dennis Hoppe)
- Distributed MPI Cluster with Docker Swarm Mode (Nikyle Nguyen, Angel Beltre, and Doina Bein)
- Docker Containers Across Multiple Clouds and Data Centers(Moustafa Abdel Baky, Javier Diaz-Montes and Manish Parashar)
- Integrating MPI with docker for HPC (Maximilien de Bayser, Renato Cerqueira) https://github.com/maxdebayser/mpich-docker-integration
- SciCumulus: A Lightweight Cloud Middleware to Explore Many Task Computing Paradigm in Scientific Workflows (Daniel de Oliveira, Eduardo Ogasawara, Fernanda Baião, Marta Mattoso)
- Scylla: A Mesos Framework for Container Based MPI Jobs (Pankaj Saha, Angel Beltre, and Madhusudhan Govindaraju)
- The RESERVOIR Model and Architecture for Open Federated Cloud Computing (B. Rochwerger, D. Breitgand, E. Levy, A. Galis, K. Nagin, I. Llorente, R. Montero, Y. Wolfsthal, E. Elmroth)



#### 저 자 오광진

KISTI 국가슈퍼컴퓨팅본부 슈퍼컴퓨팅기술개발센터 책임연구원

- T. 042-869-0593
- E. koh@kisti.re.kr

#### 정기문

KISTI 국가슈퍼컴퓨팅본부 슈퍼컴퓨팅기술개발센터 책임연구원

- T. 042-869-0555
- E. kmjeong@kisti.re.kr

#### 조 혜 영

KISTI 국가슈퍼컴퓨팅본부 슈퍼컴퓨팅기술개발센터 책임연구원

- T. 042-869-0712
- E. chohy@kisti.re.kr

#### 박 준 영

KISTI 국가슈퍼컴퓨팅본부 슈퍼컴퓨팅기술개발센터 선임기술원

- T. 042-869-0665
- E. jypark@kisti.re.kr

#### 박 경 석

KISTI 국가슈퍼컴퓨팅본부 슈퍼컴퓨팅기술개발센터 책임연구원

- T. 042-869-1716
- E. gspark@kisti.re.kr

## KISTI 제46호 ISSUE BRIEF

발 행 일 2022. 08. 22.

발 행 인 김재수

편집위원 조민수, 최희석, 이준, 정한민, 함재균,

이준영, 이상환, 곽영

발 행 처 34141 대전광역시 유성구 대학로 245

한국과학기술정보연구원 정책연구실

https://www.kisti.re.kr

I S S N 2635-5728

