

THE NEXT FRONTIER: HPC with AI and Quantum

KOREA SUPERCOMPUTING CONFERENCE 2025

KSC2025

2025년 9월 4일(목)~5일(금) | 코엑스 아셈볼룸 전관(2F)

ABSTRACT

주최 **KISTI** 한국과학기술정보연구원
Korea Institute of Science and Technology Information

주관 **국가슈퍼컴퓨팅본부**
National Supercomputing Center

KSF 한국과학기술정보연구원
Korea Supercomputing Foundation

KSCSE 한국계산과학공학회
Korean Society for Computational Science and Engineering

후원 **과학기술정보통신부**
Ministry of Science and ICT

THE NEXT FRONTIER: HPC with AI and Quantum

KOREA SUPERCOMPUTING CONFERENCE 2025

KSC2025

2025년 9월 4일(목)~5일(금) | 코엑스 아셈볼룸 전관(2F)

ABSTRACT

주최 KISTI 한국과학기술정보연구원
www.kisti.ac.kr

주관 국가슈퍼컴퓨팅본부

KSF 한국초고성능컴퓨팅포럼

KSCSE 한국계산과학공학회

후원 과학기술정보통신부
Ministry of Science and ICT

TABLE OF CONTENTS

Korea Supercomputing Conference 2025
THE NEXT FRONTIER: HPC with AI and Quantum

Greetings -----	04
Summery -----	05
Committee -----	06
Program	
[Thursday, September 04, 2025]	
- Workshop - Day 1	08
1. HPC+AI 인프라 기술 동향 및 국내 대형 시스템 소개 -----	09
2. AI + PHYSICS HYBRID COMPUTING -----	22
3. AI+HPC 데이터센터 네트워크 기술 -----	29
4. 고신뢰도모델 슈퍼컴퓨팅 가속화 기술 개발 -----	33
5. 기상·기후 분야 초고성능컴퓨팅 활용고도화 -----	42
- Conference	
1. 2025 한국계산과학공학회 추계학술대회 -----	53
[Friday, September 05, 2025]	
- Plenary	
- Keynote Speech	
- Workshop - Day 2	67
1. 양자컴퓨팅 활용 및 양자-HPC 하이브리드 컴퓨팅 기술 -----	68
2. 차세대 장치 기반 HPC/클라우드 기술 -----	75
3. 초고성능컴퓨팅과 AI 기반 제약·바이오 분야 연구개발 혁신 -----	83
4. 초저전력 반도체 슈퍼컴퓨팅 실시간 모사 기술 -----	91
5. 초고성능컴퓨팅 SW 생태계조성사업 성과 교류회 -----	100
- Community Forum	
1. KSCA 운영위원회 -----	105
- Tutorial	107
1. FUNDAMENTALS OF ACCELERATED COMPUTING WITH MODERN CUDA C++ -----	108
- Exhibition	109



안녕하십니까? 2025년 한국슈퍼컴퓨팅컨퍼런스(KSC2025) 조직위원장을 맡은
한국과학기술정보연구원(KISTI) 원장 이석입니다.

올해로 22회를 맞이한 KSC는 초고성능컴퓨팅(HPC)의 기술적·사회적 가치가 새롭게 재조명되는
시점에서 개최됩니다. 최근 AI·양자컴퓨팅과의 융합, 바이오 및 헬스케어 분야로의 응용 확대는
HPC를 더 이상 단순한 계산 자원이 아닌, 미래 기술 혁신을 실현하는 핵심 인프라로 만들고
있습니다.

이에 따라 KSC2025는 ‘The Next Frontier: HPC with AI and Quantum’을 주제로, AI,
Quantum, 시뮬레이션, 바이오 분야와의 접점에서 HPC가 나아가야 할 방향을 함께 고민하고자
합니다.

이번 행사는 10개의 워크숍, 2개의 커뮤니티 포럼, 한국계산과학공학회 추계학술대회 공동 개최,
그리고 다양한 HPC 기업의 전시부스까지, 풍부한 프로그램으로 구성되어 있습니다. 초거대 AI
모델 학습, 양자-HPC 하이브리드 기술, 질병 예측 및 정밀 분석을 위한 디지털바이오 응용, 반도체
모사, 기후 시뮬레이션 등 다양한 연구 현장의 고민과 기술적 통찰이 공유될 예정입니다.

KISTI는 앞으로도 국내 HPC 생태계의 중추 기관으로서 연구자, 산업계, 공공 부문이 고성능컴퓨팅
기반 융합 연구와 협력을 이어갈 수 있도록 최선을 다하겠습니다.

KSC2025가 AI·Quantum과 함께 진화하는 HPC의 미래를 함께 설계하고, 고성능컴퓨팅 생태계의
다음 도약을 위한 뜻깊은 계기가 되기를 기대합니다.

많은 관심과 참여를 부탁드립니다.

감사합니다.

2025년 한국슈퍼컴퓨팅컨퍼런스 조직위원장

한국과학기술정보연구원 원장 이석

행사 내용

Korea Supercomputing Conference is...

올해로 22회를 맞이하는 한국슈퍼컴퓨팅 컨퍼런스는 HPC 및 계산과학공학 관련 산·학·연·관 전문가 및 학생들이 참여하여 연구개발 성과발표 및 최신기술 교류가 이루어지는 국내 최대의 슈퍼컴퓨팅 관련 학술행사 및 전시회입니다.

더불어 KSC는 슈퍼컴퓨팅 활용·지원 및 계산과학연구, 슈퍼컴퓨팅 HW/SW 및 인프라 운영 기술, 슈퍼컴퓨터와 AI 및 양자컴퓨팅 융합기술 등 다양한 주제에 대한 발표와 튜토리얼 그리고 관련 기업전시 등을 제공하고 있습니다.

행사명

Korea Supercomputing Conference 2025

주 제

THE NEXT FRONTIER: HPC with AI and Quantum

기 간

September 04(Thu)~05(Fri), 2025

주 최



주 관



국가슈퍼컴퓨팅본부



한국초고성능컴퓨팅포럼



후 원



과학기술정보통신부
Ministry of Science and ICT

Organizing	위 원 장 : 이 식 원장 (KISTI) 곽호상 총장 (금오공과대학교) 위 원 : 박찬열 본부장 (KISTI)
Program	위 원 장 : 이창훈 교수 (연세대학교) 위 원 : 김종수 부회장 (천문연구원), 염민선 연구소장 (나무ICT), 최태영 교수 (이화여대), 홍태영 센터장 (KISTI), 정민중 센터장 (KISTI), 정기문 센터장 (KISTI), 조부승 센터장 (KISTI)
Workshop	HPC+AI 인프라 기술 동향 및 국내 대형 시스템 소개 분과위원장 홍태영 센터장 (KISTI) AI + Physics Hybrid Computing 분과위원장 손일엽 팀장 (KISTI) AI·HPC 데이터센터 네트워크 기술 분과위원장 조부승 센터장 (KISTI) 고신뢰도모델 슈퍼컴퓨팅 가속화 기술 개발 분과위원장 정민중 단장 (KISTI) 기상·기후 분야 초고성능컴퓨팅 활용고도화 분과위원장 조민수 박사 (KISTI) 양자컴퓨팅 활용 및 양자-HPC 하이브리드 컴퓨팅 기술 분과위원장 최태영 교수 (이화여대) 차세대 장치 기반 HPC/클라우드 기술 분과위원장 정기문 센터장 (KISTI) 초고성능컴퓨팅과 AI 기반 제약·바이오 분야 연구개발 혁신 분과위원장 염민선 연구소장 (나무ICT) 초저전력 반도체 슈퍼컴퓨팅 실시간 모사 기술 분과위원장 서상재 팀장 (KISTI) 초고성능컴퓨팅 SW 생태계조성사업 성과 교류회 분과위원장 권오경 팀장 (KISTI)
Forum,	2025년 한국계산과학공학회 추계학술대회 분과위원장 김종수 부회장 (천문연구원)
Conference & Tutorial	FUNDAMENTALS OF ACCELERATED COMPUTING WITH MODERN CUDA C++

DAY 1 | 2025년 9월 4일(목) 13:00~18:00

13:00~13:30

등록

13:30~18:00	☑ Workshop 01	HPC+AI 인프라 기술 동향 및 국내 대형 시스템 소개	📍 202호
13:30~17:30	☑ Workshop 02	AI + Physics Hybrid Computing	📍 203호
16:00~18:00	☑ Workshop 03	AI-HPC 데이터센터 네트워크 기술	📍 205호
13:30~18:00	☑ Workshop 04	고신뢰도모델 슈퍼컴퓨팅 가속화 기술 개발	📍 209호
13:30~16:45	☑ Workshop 05	기상·기후 분야 초고성능컴퓨팅 활용고도화	📍 206호
13:30~17:30	☑ Conference	2025년 한국계산과학공학회 추계학술대회	📍 201호

DAY 2 | 2025년 9월 5일(금) 08:30~18:00

YouTube Live LIVE 중계

08:30~09:30

등록

09:30~10:30	☑ 기조강연 1: 전통적 계산의 경계를 넘어: 양자컴퓨터의 도전과 통찰	📍 201~203호
Beyond the Classical Limits: Quantum Challenges and Insights 📍 김기환 교수 칭화대학교		
10:30~11:30	☑ 기조강연 2: GPU 클러스터, 창작의 새 시대를 열다: 멀티모달 AI 혁명	📍 201~203호
Unleashing a New Era of Creation with GPU Clusters: The Multimodal AI Revolution 📍 이연수 대표 NC AI		
11:30~12:00	☑ KSC2025 개회식	📍 201~203호
개회사 이 식 원장 한국과학기술정보연구원, 한국계산과학공학회 회장, KSC2025 조직위원장 환영사 박호상 총장 국립금오공과대학교, 한국초고성능컴퓨팅포럼 운영위원장, KSC2025 공동 조직위원장 축 사 김영식 이사장 국가과학기술연구회 축 사 황정아 국회의원 더불어민주당 축 사 박충권 국회의원 국민의힘		

12:00~13:30

Luncheon

📍 COEX 식당

13:30~17:00	☑ Workshop 01	양자컴퓨팅 활용 및 양자-HPC 하이브리드 컴퓨팅 기술	📍 202호
13:30~17:30	☑ Workshop 02	차세대 장치 기반 HPC/클라우드 기술	📍 201호
13:30~18:00	☑ Workshop 03	초고성능컴퓨팅과 AI 기반 제약·바이오 분야 연구개발 혁신	📍 203호
13:30~18:00	☑ Workshop 04	초저전력 반도체 슈퍼컴퓨팅 실시간 모사 기술	📍 205호
13:30~18:00	☑ Workshop 05	초고성능컴퓨팅 SW 생태계조성사업 성과 교류회	📍 209호
14:00~16:00	☑ Forum	(Closed) KSCA(한국슈퍼컴퓨팅센터연합) 운영위원회	📍 210호

연계 프로그램 Tutorial

2025년 9월 3일(수)
10:00~18:00
양재 엘타워, 비바체움(2F)

국가슈퍼컴퓨터 6호기 사용자를 위한 NVIDIA & HPE 연계 프로그램
Deep Learning Institute: Fundamentals of Accelerated Computing with Modern CUDA C++

DAY 1

Workshop

Thursday, September 04, 2025

**KOREA SUPERCOMPUTING
CONFERENCE 2025**

THE NEXT FRONTIER: HPC with AI and Quantum

Thursday, September 04, 2025

HPC+AI 인프라 기술 동향 및 국내 대형 시스템 소개

계산과학 및 AI 기반 연구를 하기 위해서는 슈퍼컴퓨팅 인프라가 필수적이며, 특히 대형 실험 데이터 분석, 과학·공학 분야 대규모 모델링 및 시뮬레이션, LLM 등 초거대 AI 모델 개발 시 중추적인 역할을 한다.

본 워크숍에서는 신규 구축되는 국가슈퍼컴퓨터 6호기의 최적 활용 방안과 국내 대표적인 대형 슈퍼컴 운영 사례를 살펴보고 최근 주목받고 있는 HPC+AI 인프라 및 플랫폼 기술을 살펴보고자 한다.

13:30~13:50	NVIDIA 최신 GPU 포트폴리오 및 분야별 워크로드 정구형 팀장 (NVIDIA)
13:50~14:10	프로파일링을 통한 CUDA 어플리케이션 성능 최적화 류현곤 이사 (NVIDIA)
14:10~14:30	NVIDIA 최신 IB 포트폴리오 및 네트워크 성능 최적화 이민형 이사 (NVIDIA)
14:30~14:50	HPE Cray Slingshot 네트워크 및 EX4000 냉각 소개 김희식 이사 (HPE)
14:50~15:10	초고성능컴퓨터 최신 냉각기술 현황 신우종 팀장 (스탠더드시스템연구소)
15:10~15:30	국가슈퍼컴퓨터 6호기 에너지 효율 극대화 방안 고동건 책임 (KISTI)
15:30~16:00	Coffee Break
16:00~16:20	지역인프라 기반 컴퓨팅자원 및 국산AI반도체 시험검증 지원 오병두 센터장 (AICA)
16:20~16:40	LLM 인프라 동향과 네이버클라우드의 대응 방향 김준범 이사 (NAVER)
16:40~17:00	삼성전자 AI향 고성능/고효율 슈퍼컴퓨터 소개 임진규 책임 (삼성전자)
17:00~17:20	GPU기반 대형 HPC 시스템 6호기 소개 안도식 책임 (KISTI)
17:20~17:40	효율적인 NVIDIA GPU 자원 분배를 위한 Run:ai 플랫폼 윤기향 부장 (NVIDIA)
17:40~18:00	AI 인프라 구성과 Kubernetes 기반 오케스트레이션 플랫폼 오세진 대표 (주식회사 텐)



정구형

팀장

NVIDIA

NVIDIA 최신 GPU 포트폴리오 및 분야별 워크로드

이번 세션에서는 NVIDIA의 최신 GPU 아키텍처인 Hopper, Blackwell, 그리고 Blackwell Ultra로 이어지는 아키텍처 발전 흐름을 중심으로, 각 아키텍처가 어떤 기술적 특징을 갖고 있으며, 어떠한 워크로드에 최적화되어 있는지를 설명드릴 예정입니다.

특히 유체역학(CFD)이나 분자동역학(MD)과 같은 전통적인 과학 및 공학 시뮬레이션 워크로드부터, 대규모 모델 기반의 AI 학습 및 추론, 그리고 물리 기반 시뮬레이션을 포함하는 디지털 트윈(Digital Twin)까지, 다양한 분야에서 요구되는 컴퓨팅 특성과 자원 활용 방식에 따라 어떤 GPU가 더 적합한지를 사례 중심으로 소개해드릴 계획입니다.

이를 통해 참석자 여러분이 실제 환경에서의 워크로드 요구사항에 맞추어 적절한 GPU를 선택하고, 시스템 자원을 보다 효과적으로 활용할 수 있는 방향성을 얻으실 수 있도록 돕고자 합니다.

· Educational History

서울대학교 컴퓨터공학과 학사 (2008)

· Employment History

IBM Korea 소프트웨어 엔지니어 (2008~2014)

British Telecom Korea 서비스 관리자 (2014~2016)

HPE Korea 기술 영업 (2016~2020)

NVIDIA Korea 기술 팀장 (2020~현재)



류현곤

이사
NVIDIA

프로파일링을 통한 CUDA 어플리케이션 성능 최적화

이번 세션에서는 NVIDIA Nsight Systems(Nsys)를 활용하여 멀티 노드 환경에서의 성능을 효과적으로 분석하는 방법을 소개드립니다. MPI 기반 어플리케이션을 대상으로, 각 노드의 CPU 연산, GPU 커널 실행, 통신 대기 시간 등을 시각화하고, 병목 지점을 식별하는 분석 기법을 다룰 예정입니다.

특히 MPI API 호출, GPU 커널, CPU 이벤트를 하나의 타임라인에서 연동해 전체 워크플로우를 통합적으로 추적하는 방법을 실제 사례와 함께 설명드립니다. 이를 통해 참석자 여러분은 복잡한 분산 환경에서도 성능 저하의 원인을 정확히 파악하고, 최적화 방향을 도출하는 데 필요한 실질적인 인사이트를 얻으실 수 있습니다.

· Educational History

연세대학교 상경계열 석사 (1997)
연세대학교 수학과 석사 (2006)
연세대학교 수학과 박사수료 (2018)

· Employment History

NVIDIA Korea, Sr. Solutions Architect (2009~현재)



이민형

이사
NVIDIA

NVIDIA 최신 IB 포트폴리오 및 네트워크 성능 최적화

이번 세션에서는 최신 InfiniBand 기술인 XDR(Extremely High Data Rate)을 소개하고, 이를 활용하여 HPC 및 AI 워크로드에서 네트워크 성능을 극대화하는 전략을 설명드립니다. 대규모 연산 환경에서 점점 더 중요한 요소가 되는 네트워크 대역폭과 지연 시간에 대한 고려를 바탕으로, XDR이 기존 세대 대비 어떤 기술적 진화를 이뤘는지 살펴볼 예정입니다.

또한 UCX 프레임워크 기반의 Adaptive Routing과 Multi-Rail 기능을 통해, 네트워크 경로를 동적으로 조정하고 트래픽을 병렬 분산함으로써 통신 병목을 줄이고 시스템 전체의 처리 효율을 높이는 방법을 소개드립니다.

· Educational History

서울대학교 컴퓨터공학과 학사 (2002)
서울대학교 컴퓨터공학과 석사 (2004)

· Employment History

KT, 연구원 (2004~2010)
Extreme Networks, System Engineer (2010~2015)
Gigamon, Sr. System Engineer (2015~2019)
Cisco Systems, Consulting Engineer (2020)
Infoblox, Sr. Solutions Architect (2020~2021)
NVIDIA, Sr. Solutions Architect (2021~현재)



김희식

상무

HPE

HPE Cray Slingshot 네트워크 및 EX400 냉각 소개

슈퍼컴퓨팅의 성능 향상에 영향을 미치는 핵심 요소 중의 하나인 인터커넥트 기술의 주요 사항들을 살펴보고, 신규로 구축되는 국가슈퍼컴퓨터 6호기에 적용된 HPE Cray Slingshot 네트워크 기술을 소개한다. Grand Challenge 문제를 포함하는 계산 과학 및 AI 기반 연구를 더 효율적으로 사용하기 위한 방안 및 필요 지원 기술에 대해서 논의할 수 있도록 한다.

효율적인 슈퍼컴 운영의 또 다른 핵심 역할을 하고 있는 냉각 기술의 현황 및 기술 변화 경향을 살펴본다. 이와 더불어 신규 국가슈퍼컴퓨터 6호기에 적용된 최신 수냉 기술을 소개하며, 안정적인 운영 방안과 전력 절감 방안을 위한 방안을 논의한다.

· Educational History

서울대학교 대기과학과 학사 (1999)

서울대학교 지구환경과학부 석사 (2001)

· Employment History

ROKAF, Weather Staff Office (2001~2004)

Cray, Application Analyst and Pre-Sales Eng. (2004~2014)

Cray, APAC Pre-Sales Manager (2014~2019)

HPE, APAC/India HPC/AI Pre-Sales Manager (2020~현재)



신우중

책임연구원(팀장)

㈜스탠더드시험연구소

초고성능컴퓨터 최신 냉각기술 현황

초고성능컴퓨터는 최근 대규모 전력 소비, 비효율적인 에너지 활용, 프로세서의 급격한 발열량 증가로 인해 냉각기술의 전환기를 맞이하고 있다. AMD는 '23년에 초고성능컴퓨터의 급속한 발전으로 인해 '33년에는 초고성능컴퓨터 1대가 제타스케일 규모에 도달하면서 500MW의 막대한 전력이 소비할 것으로 예측하였다. 그리고 이러한 예측은 '24년 NVIDIA(B200)와 AMD(MI325X)가 출시한 두 제품이 칩당 1,000W라는 경험하지 못한 TDP(Thermal Design Performance)를 선보이면서 현실화되고 있다.

본 발표에서는 향후 예측되는 초고성능컴퓨터 냉각 문제를 해결하기 위한 글로벌 기업들의 최신 냉각기술 개발 현황을 소개한다. 그리고 가까운 미래에 국가슈퍼컴퓨터에 적용 가능한 최적의 냉각기술에 대해 해외의 선도연구를 중심으로 논의한다.

· Educational History

서울대학교 컴퓨터공학과 학사 (2008)

· Employment History

IBM Korea 소프트웨어 엔지니어 (2008~2014)

British Telecom Korea 서비스 관리자 (2014~2016)

HPE Korea 기술 영업 (2016~2020)

NVIDIA Korea 기술 팀장 (2020~현재)



고통건

책임기술원

한국과학기술정보연구원

국가슈퍼컴퓨터 6호기 에너지 효율 극대화 방안

최근 탄소배출 저감이라는 대내·외적인 요구에 대응하기 위하여 대표적인 에너지 다소비 건물인 데이터센터에는 다양한 시도가 진행되고 있다. 특히 HPC는 성능 향상에 따른 고밀도화 진행됨에 따라 막대한 전력을 소비하고 있으며, 이에 에너지 절감은 필수가 되었다. GPU기반의 슈퍼컴퓨터 6호기에도 수냉식(Direct Liquid Cooling) 냉각방식을 도입하여 높은 에너지 효율 달성을 목표로 하고 있다.

본 발표에서는 슈퍼컴퓨터 6호기의 에너지 절감을 위해 구축된 기반시설분야의 설계 주요안점, 구축공정 및 주요 고려사항에 대하여 설명하고자 한다.

· Educational History

한국해양대학교 냉동공조공학 학사

충남대학교 기계공학 석사

· Employment History

한국생산기술연구원 선임연구원

한국과학기술정보연구원 책임기술원



오병두

센터장

인공지능산업융합사업단 (AICA)

지역인프라 기반 컴퓨팅자원 및 국산AI반도체 시험검증 지원

(AI 패권 경쟁의 본질 변화) GPU는 국가경쟁력의 핵심 전략자산으로 부상 - 전 세계는 초거대 AI 모델 개발 경쟁이 심화됨에 따라, AI 패권의 중심축이 알고리즘과 데이터에서 초고성능 연산 자원(GPU 등) 보유 능력으로 급속히 이동하고 있음. 이에 따라 주요 국가들은 GPU를 '국가 컴퓨팅 자산'이자 전략기술로 간주하고, 대규모 투자를 통해 인프라를 선점 중임

본 발표에서는 지역 인프라를 기반으로 인공지능 연구·개발 필요한 AI기업에게 전국 이용자 대상으로 156TF ~ 2PF까지 고성능 컴퓨팅 자원 제공을 통해 AI기업 지원 디지털기반 지역 활성화 및 국내 인공지능 경쟁력 강화 지원

- 가속화기는 공급자는 AI 가속화기를 동적할당 방식 등 자원을 효율적으로 운영 및 관리할 수 있는 방식의 운영

- 국산AI반도체 시험검증 체계를 통해서 AI반도체의 HW 호환성, 안정성, 성능, 사용성, 확장성 등을 종합적으로 검증할 수 있도록 시험 항목과 절차를 국제 표준(PCI-SIG, MLCommons 등) 기반으로 체계화하고 연차별로 고도화

· Educational History

세한대학교 전자공학과 학사 (2001)

정보관리기술사, 컴퓨터시스템응용기술사 (2022)

· Employment History

인공지능산업융합사업단 센터장 (2020~2025)



김준범

상무

네이버클라우드

LLM 인프라 동향과 네이버클라우드의 대응 방향

AI Index 2025는 LLM의 쿼리 및 추론비용의 점진적 축소와 LLM간 성능격차의 감소 및 경량모델의 성능 향상 등 기존 LLM시장과 차별화되는 유의미한 기술변화를 소개 하고 있음.

기존 LLM시장의 기술적 변화에 따라 우리나라를 비롯한 세계각국의 LLM에 대한 정책 및 기술자원 지원 등 적극적인 대응양상이 전개되고 있음

이번 발표에서는 급격하게 변화하고 있는 글로벌 LLM시장을 데이터센터 및 인프라 중심으로 조망하고, 네이버클라우드가 변화하는 글로벌 시장에 대응하기 위한 기술전략적 방향에 대하여 소개

· Educational History

국민대학교 경영학 학사 (2000)

· Employment History

네이버클라우드 (2012~현재)

임진규

책임

삼성전자

삼성전자 AI향 고성능/고효율 슈퍼컴퓨터 소개

최근 AI 분야 R&D 증가 지속 및 계산 과학 분야 슈퍼컴퓨팅 확산으로 인해 슈퍼컴퓨터에 대한 관심이 높은 시점에 삼성전자에서는 AI향 고성능 슈퍼컴퓨터를 2024년에 구축 완료했습니다. 삼성전자 슈퍼컴퓨터는 '25년 6월에 발표한 전세계 슈퍼컴퓨터 랭킹에 Top500 18위, Green500 7위, IO500 4위를 하는 등 고성능/고효율 슈퍼컴퓨터로 현재 국내 1위 슈퍼컴퓨터로 대내외 소개되었습니다.

본 발표에서는 삼성전자에서 2024년 구축 완료된 슈퍼컴퓨터에 대해서 간략하게 소개하며, 나아가 AI모델 트렌드에 따른 시스템 아키텍처 변화와 이를 반영하기 위한 슈퍼컴퓨터 설계 및 운영 기술에 대해서도 설명하겠습니다. 추가로 최근 대규모 언어 모델 학습 기술과 고발열 서버 장비를 도입 및 운영하기 위한 수냉식 공조 시스템과 Digital-Twin 기술에 대해서도 설명하겠습니다.

· Educational History

서울대학교 지능융합시스템학과 석사 (2012)

서울대학교 전기정보공학 박사 (2024)

· Employment History

삼성전자 종합기술원 연구원 (2014~2018)

삼성전자 AI센터 Data Center그룹 (2019~현재)



안도식

책임기술원

한국과학기술정보연구원

GPU기반 대형 HPC 시스템 6호기 소개

첨단 과학기술 및 인공지능(AI) 분야에서의 폭발적인 계산 수요 증가에 대응하기 위해, 고성능컴퓨팅(HPC) 및 AI 컴퓨팅 인프라의 신속한 확충이 요구되고 있다. 특히, 거대 계산 및 AI 기반 연구 수요의 급증에도 불구하고, 현재 운영 중인 슈퍼컴퓨터 5호기의 자원은 한계에 도달한 상황으로, GPU 기반 대형 HPC 시스템의 구축이 시급한 상황이다.

KISTI는 2023년부터 「국가 플래그십 슈퍼컴퓨터 6호기」 구축을 추진해 오고 있으며, 안정적인 시스템 운영을 위한 기반시설(전력, 냉각 등)을 2024년에 구축을 완료하였다. 2025년 상반기에 시스템 선정 절차를 마치고, 하반기부터 본격적인 설치에 돌입하였다.

6호기는 GPU 기반의 차세대 슈퍼컴퓨터로, 이론 최고 성능(Rpeak) 614.7PFlops의 연산 처리 능력을 갖춘다. 본 시스템은 400Gbps 고성능 인터커넥트 네트워크, 205PB 규모의 대용량 병렬 파일시스템, 다양한 유형의 계산 노드(GPU 파티션, CPU 파티션, GPU-Fat 노드, 대용량 메모리 노드 등)로 구성된다.

6호기는 2026년 5월까지 설치를 완료하고, 6월부터 본격적인 사용자 서비스를 개시할 예정이다. 6호기를 통해 대규모 HPC 및 AI 계산 자원을 안정적으로 제공함으로써, 국가 연구개발(R&D)의 경쟁력 향상에 기여하고자 한다.

· Educational History

전북대학교 전자·정보 공학사, 경영 학사 (2008)

전북대학교 컴퓨터공학 석사 (2010)

전북대학교 컴퓨터공학 박사 (2017)

· Employment History

한국과학기술정보연구원 (2013~2015)

국민연금공단 (2015~2017)

한국과학기술정보연구원 (2017~현재)



윤기항

SA

NVIDIA

효율적인 NVIDIA GPU 자원 분배를 위한 Run:ai 플랫폼

이번 세션에서는 Run:AI 플랫폼을 활용하여 AI 및 HPC 환경에서 GPU 자원을 더욱 효율적으로 활용하는 방법을 소개드립니다. GPU 사용률을 극대화하면서도 사용자 간 자원 경쟁을 공정하게 조율할 수 있는 방안을 중심으로, 다양한 스케줄링 전략과 자원 관리 기법을 살펴볼 예정입니다.

특히 Fair-Share 및 Priority Queue 기반의 스케줄링 전략, 그리고 하나의 GPU를 여러 사용자 혹은 작업이 나누어 사용하는 Fractional GPU 기능을 통해 실제 운영 환경에서 어떻게 자원을 탄력적으로 할당하고, 동시에 시스템 전체의 활용률을 높일 수 있는지를 설명드리겠습니다.

· Educational History

한양대학교 수학과 학사 (2009)

한양대학교 수학과 석사 (2011)

한양대학교 수학과 박사 (2019)

· Employment History

Lenovo, Application Engineer (2019~2023)

NVIDIA, Solutions Architect (2023~현재)



오세진

대표

주식회사 텐

AI 인프라 구성과 Kubernetes 기반 오케스트레이션 플랫폼

AI 산업은 이제 기술적 가능성을 넘어, 투자 대비 수익(ROI)이 본격적으로 논의되는 단계에 이르렀다. 그러나 AI 인프라의 핵심인 GPU 서버 클러스터 구축 비용은 물론, 데이터센터 수준의 전력과 운영 관리 비용까지 고려하면, 많은 기업들이 인프라 비용을 명확히 계획하고 효율적으로 운영하기에 어려움을 겪고 있는 것이 현실이다.

특히 DeepSeek 등 최신 모델의 등장은 생성형 AI의 방향이 단순한 계산력의 확장이 아닌, 혁신적이고 비용 효율적인 접근 방식으로 전환되고 있음을 보여주고 있으며, 이에 따라 AI 인프라 최적화 기술이 경쟁력의 핵심 요소로 부각되고 있다.

TEN은 이러한 변화에 맞춰, 독자적인 GPU 분할 가상화 기술과 Kubernetes 기반 오케스트레이션을 결합한 인프라 관리 도구 'AI Pub', 그리고 고객 맞춤형 클러스터 설계·구축을 지원하는 컨설팅 서비스 'RA:X'를 제공하고 있으며, 더 나아가 이를 위한 에이전트 서비스까지 알아본다.

· Educational History

연세대학교 전기전자공학부 학사 (2009)

연세대학교 전기전자공학부 석박사통합 수료 (2016)

· Employment History

주식회사 아크릴 사업부장 (2016~2019)

주식회사 텐 대표 (2020~현재)

AI + Physics Hybrid Computing

인공지능 모델의 학습 과정에서 직면하는 데이터 획득의 한계, 불균형 및 잡음이 포함된 데이터 문제를 극복하고, 복잡하고 비선형적인 물리 현상을 정밀하게 예측하기 위한 방안으로서, 인공지능과 물리 기반 시뮬레이션의 융합 및 이를 구현하는 하이브리드 컴퓨팅 기술의 최신 연구 동향 소개

물리 기반 시뮬레이션과 인공지능의 융합 기술 이론 및 응용 연구 사례 소개

- | | |
|-------------|--|
| 13:30~14:10 | Physical AI: AI 파운데이션 모델과 로봇의 결합
김은우 교수 (중앙대학교) |
| 14:10~14:50 | 지식과 물리, 그리고 사람 중심의 제조 AI
유승화 교수 (KAIST) |
| 14:50~15:30 | 센서 기반 물리정보·물리인지 기계학습을 활용한 비선형 편미분방정식의 실시간 대리모델링
임재혁 교수 (경희대학교) |
| 15:30~16:00 | Coffee Break |
| 16:00~16:30 | 대규모 CAE 데이터와 ML을 통한 엔지니어링 혁신
전완호 상무 (Hexagon) |
| 16:30~17:00 | CAE 최신 동향과 AI 기반 디지털 트윈 가속화
이승훈 본부장 (한국알테어) |
| 17:00~17:30 | 산업 설계: DX 에서 AX로 진화한 최적화 과정
양경모 프로 (ANSYS Korea) |



김은우

부교수

중앙대학교 SW학부/AI대학원

Physical AI: AI 파운데이션 모델과 로봇의 결합

최근 인공지능 기술은 이미지, 텍스트, 음성 등 디지털 영역에서 놀라운 성과를 보이며 인간 수준 또는 그 이상의 이해 및 생성 능력을 입증해 왔습니다. 특히 GPT-4, Gemini, Claude 등의 거대 파운데이션 모델들은 범용성과 추론 능력 측면에서 새로운 기준을 제시하고 있습니다. 이러한 인공지능의 비약적인 발전은 이제 로봇틱스, 센서 기술, 물리적 상호작용 기술과 결합되어 Physical AI라는 새로운 패러다임으로 확장되고 있습니다.

본 발표에서는 거대 인공지능 파운데이션 모델에 대한 소개, 로봇 embodiment와 학습의 전환, 제조, 물류, 가정용 서비스 로봇 분야에서 어떻게 활용될 수 있는지 소개하고자 합니다.

· Educational History

중앙대학교 전자전기공학부, 학사 (2011)
서울대학교 전기컴퓨터공학부, 석사 (2013)
서울대학교 전기컴퓨터공학부, 박사 (2017)

· Employment History

University of Oxford, Postdoc. (2018~2019)
중앙대학교 소프트웨어학부, 교수 (2019~Present)



유승화

교수
KAIST

지식과 물리, 그리고 사람 중심의 제조 AI

본 발표에서는 제조 분야에서의 역설계(inverse design)를 위한 인공지능(AI) 기술의 관점과 미래 전망을 제시한다. 기존의 블랙박스 기반 머신러닝 모델은 데이터가 부족하거나 물리 제약이 강한 실제 제조 환경에서는 일반화 성능이 떨어지는 한계를 보여준다. 이러한 한계를 극복하기 위해, 본 발표는 도메인 지식, 물리 기반 학습(physics-informed learning), 대규모 언어 모델(LLM)을 결합한 지식 유도형 AI 시스템의 필요성과 구현 방안을 다룬다.

우선, 전문가의 직관을 반영한 설계 변수 공간 내 데이터 샘플링 전략이 어떻게 데이터 효율성과 모델의 일반화 능력을 향상시키는지 다양한 사례를 통해 설명한다. 이어서, PINN(Physics-Informed Neural Networks)이나 Operator Learning 기반의 물리 유도 모델이 복잡한 제약 조건 하에서도 물리적으로 일관된 예측을 가능하게 하는 방식과 그 한계점, 그리고 실제 제조 응용 사례(최소 측정으로 소재 물성 특성평가)를 소개한다.

마지막으로, 자연어 기반 인터페이스를 통해 사용자 의도와 설계-시뮬레이션-최적화 도구를 연결하는 최신 LLM 기반 프레임워크와 멀티에이전트 시스템의 활용 사례를 조망한다. 이는 AI의 활용을 비전문가까지 확장시키고, 반복적인 설계 과정을 인간 중심으로 재구성하는 새로운 방향성을 제시한다. 결론적으로, 본 발표는 도메인 지식과 물리 기반 추론, 그리고 직관적인 인간-AI 상호작용을 통합함으로써, 확장 가능하고 해석 가능하며 협업 가능한 제조 설계 시스템으로의 진화를 모색하고자 한다.

· Educational History

KAIST 물리학 학사 (2000~2004)
Stanford University 물리학 박사 (2004~2011)

· Employment History

Postdoc, Dept of Civil and Environment Engineering, MIT, MA, USA (2012~2013)
Visiting Professor, UC Berkeley, CA, USA (2024~2025)
KAIST 기계공학과 조교수, 부교수, 정교수, KAIST 지정 석좌교수 (2013~현재)



임재혁

부교수

경희대학교

센서 기반 물리정보·물리인지 기계학습을 활용한 비선형 편미분방정식의 실시간 대리모델링

본 연구는 고비선형 편미분방정식(PDE) 문제를 대상으로, 센서 기반 실시간 예측이 가능한 대리모델링 기법을 제안한다. 제안된 모델은 물리정보(Physics-Informed)와 물리인지(Physics-Aware) 기계학습을 통합하여, 제한된 센서 데이터로도 물리적 일관성과 계산 효율을 동시에 확보한다. 특히, 학습 범위를 넘어서는 외삽 상황에서도 높은 일반화 성능을 유지하며, 고속 비선형 탄성파와 같은 복잡한 동적 현상을 실시간으로 예측할 수 있음을 수치 사례를 통해 검증한다.

· Educational History

인하대학교 기계공학, 학사 (2000)

한국과학기술원 기계공학, 석사 (2002)

한국과학기술원 기계공학, 박사 (2006)

· Employment History

한국과학기술원 기계기술연구소 (2006~2007)

한국항공우주연구원 (2007~2016)

전북대학교 기계공학과 (2016~2025)

경희대학교 기계공학과 (2025~현재)



전완호

본부장

핵사곤 코리아 D&E

대규모 CAE 데이터와 ML을 통한 엔지니어링 혁신

제품의 설계와 제조 과정에서 사용되는 CAE는 슈퍼컴과 같은 하드웨어의 발달에 힘입어서 다양한 분야에 사용되면서 그 영역을 넓혀가고 있다. 또한, 해석 과정의 복잡성과 인력부족, 해석 시간의 문제로 인한 CAE 적용의 어려움을 process 자동화와 기계학습을 이용하여 해결하려는 연구가 꾸준히 지속되고 있다.

제조 현장의 생산성을 향상시키기 위해서 AI의 도움을 통해, 다양한 CAE해석 솔루션 (구조, 동역학, 유체, 소음, 등)의 사용 영역을 기존의 CAE Expert에서 설계자, 제조 공정 그리고 품질 관련 분야까지 확대하기 위한 방안을 제안한다. AI와 CAE를 연계하며, 방대한 해석 데이터를 학습시켜서 누구나 쉽게 사용할 수 있는 예측모델을 구성하는 플랫폼으로의 전환을 위한 기술을 개발하고 있다. 이런 기술을 통해서 다양한 분야의 엔지니어들이 제품 설계에서 제조의 과정에서 쉽게 CAE기술의 도움을 받을 수 있으며, Digital Twin을 비롯한 DX(Digital Transformation)의 가속화에도 큰 동력이 되고 있다.

· Educational History

인하대학교 항공우주공학과 학사 (1988~1992)

KAIST 항공우주공학과 석사 (1992~1994)

KAIST 항공우주공학과 박사 (1994~1999)

· Employment History

LG전자 DA연구소 책임연구원 (2000~2004)

씨덕 주식회사 기업부설연구소 연구소장 (2004~2020)

핵사곤 매뉴팩처링인텔리전스 기술본부 본부장 (2020~현재)



이승훈

기출총괄 본부장

한국알테어

CAE 최신 동향과 AI 기반 디지털 트윈 가속화

디지털 트윈은 현실세계에서 발생하는 다양한 물리적인 현상들을 가상의 환경에서 똑같이 모사하는 기술로, CAE는 시간과 비용을 절감하고, 설계를 최적화하기 위해 핵심적인 역할을 합니다. 과거에는 고급 기능과 높은 컴퓨팅 파워를 기반으로 한 정밀하고 빠른 시뮬레이션이 핵심이었으며, 주로 전문 해석 엔지니어에 의해 활용되었습니다. 하지만 최근에는 AI, Meshless, Multi-Physics 등 다양한 최신 기술의 도입되면서 사용자 접근성이 향상되고, 더욱 빠르고 정교한 시뮬레이션이 가능해지고 있습니다.

특히 AI 기반 시뮬레이션은 결과를 신속하게 예측할 수 있는 다양한 방법론을 통해 해석 속도와 효율을 극대화하고 있습니다. 본 발표에서는 CAE의 최신 동향과 함께, 시뮬레이션 분야에서 AI를 적용한 다양한 사례들을 소개드릴 예정입니다.



양경모

프로

ANSYS KOREA

산업 설계: DX 에서 AX로 진화한 최적화 과정

오늘날 산업 설계는 단순한 디지털 전환(DX)을 넘어, AI 기반의 확장 설계(AX; Augmented Design) 시대로 진입하고 있습니다. 본 발표에서는 Ansys의 최신 AI 기반 시뮬레이션 기술을 활용한 설계 고도화 전략을 소개합니다.

전통적인 반복적 해석에서 벗어나, AI-physics Hybrid 설계를 통해 복잡한 물리 모델을 단순화하면서도 고정밀 해석을 실시간으로 가능하게 합니다. 특히, Surrogate Model 기반의 ROM(Reduced Order Model), MOP(Meta Model of Optimal Prognosis), 그리고 비모수(Non-parametric) 접근법은 물리 기반 시뮬레이션의 병목을 해소하며, 고속 설계를 가능케 합니다.

머신러닝을 활용한 데이터 기반 모델은 클라우드 기반 대규모 설계 탐색과 최적화를 지원하며, 수백~수천 회의 해석을 몇 배 빠르게 수행합니다. 해석 모델링의 자동화는 설계 공간을 획기적으로 넓히며, 인간 엔지니어의 직관에 의존했던 창의성의 한계를 기술적으로 극복할 수 있는 기반을 제공합니다.

이제 설계는 반복이 아닌, 탐색과 혁신의 여정으로 변하고 있습니다. 본 세션을 통해, 기존 해석 프로세스를 어떻게 시가 가속화하고, 설계자에게 더 큰 자유와 가능성을 부여하는지를 다양한 사례와 함께 설명드리고자 합니다.

· Educational History

물리화학공학과 CPGE (그랑제콜 예비학교) 졸업 (2014~2016)

ISAE-ENSMA(프랑스 공립항공기계공학대학원) 졸업 – 항공정보기술공학과 (2016~2019)

· Employment History

Digital Product Simulation (Dassault Systemes 협력사) – 백엔드 개발자 (2019~2021)

육군 미래혁신연구센터 – 현역 LVCG 연구병 (2022~2023)

Ansys Korea –Digital Twin & AIML 기술영업 (2024~현재)

Thursday, September 04, 2025

AI·HPC 데이터센터 네트워크 기술

본 세션에서는 과학기술연구망(KREONET)을 기반으로 AI·HPC 데이터센터를 운영 중인 기관들의 실무 경험과 기술적 요구사항을 공유하고, RoCEv2 기반의 초고속 네트워크, AI 워크로드를 고려한 데이터센터 네트워크 설계, 운영 자동화 등의 최신 기술과 과제를 전문가들과 함께 심도 있게 논의합니다.

- | | |
|-------------|--|
| 16:00~16:30 | AWS에서 AI를 위한 데이터센터 네트워크 기술
장석재 SA (AWS) |
| 16:30~17:00 | Networks for AI workload Concept(Juniper)
김현준 이사 (Juniper) |
| 17:00~17:30 | 대형 연구시설장비 수집 실험데이터 분석 전용 네트워크 구축
허무영 책임기술원 (IBS) |
| 17:30~18:00 | Discussion & Networking
조부승 센터장 (KISTI) |



장석재

Solutions Architect
Amazon Web Services

AWS에서 AI를 위한 데이터센터 네트워크 기술

AI/HPC 데이터센터 기술로, AWS의 Global Network 특징과 VPC, HPC 클러스터 환경에서의 인피니밴드 대신 가능한 AWS의 EFA 기술 등에 대한 설명

· Educational History

한동대학교 전산전자공학부 졸업 (2003)

· Employment History

해군 교육사령부 CBT개발팀 대위 (2003~2010)

KT Cloud추진본부 Core개발팀 (2010~2016)

AWS Solutions Architect (2016~현재)



김현준

이사 / 팀장

Juniper

Juniper's Networks for AI workload Concept

AI기술이 비즈니스와 사회 전반에 깊숙이 확장되는 오늘날, AI 워크로드에 최적화된 네트워크 인프라의 중요성이 빠르게 부각되고 있습니다. 본 발표에서는 주니퍼가 제안하는 "Networks for AI Workload"의 핵심 비전과 구현전략을 다룹니다.

· Educational History

국민대학교 Business IT 전문대학원 졸업 (2023)

취득학위 경영정보학박사

· Employment History

(주)콤텍정보통신 네트워크기술팀 책임엔지니어 (1999~2007)

한국주니퍼네트웍스 테크니컬솔루션팀 팀장 (2007~현재)



허무영

책임기술원

기초과학연구원

대형 연구시설장비 수집 실험데이터 분석 전용 네트워크 구축

최근 기초과학 연구는 첨단 대형 연구시설·장비의 발전에 힘입어 이전에는 상상하기 어려웠던 규모의 방대한 실험데이터를 생산하고 있습니다. 이와 같은 대용량 실험데이터는 기존 네트워크 인프라로는 효율적인 전송 및 분석에 한계가 있어 연구 생산성을 저해하는 주요 요인이 되어왔습니다.

이 발표는 기초과학연구원(IBS)가 대형 연구시설·장비에서 생산되는 방대한 실험데이터를 효율적으로 수집하고 초고성능컴퓨팅(HPC) 자원을 활용하여 분석하기 위해 KREONET과 협력하여 구축한 대형 연구시설·장비 수집 실험데이터 분석 전용 네트워크를 소개합니다.

이 전용망(100Gbps)은 ScienceDMZ로 구성되어, 기존 네트워크 트래픽과 완전히 분리되어 운영되고 있으며, 대규모 연구데이터 전송에 최적화된 환경을 제공합니다. 현재 이 네트워크는 한국천문연구원의 KVN 관측 데이터, 성균관대학교의 MRI 데이터, KAIST의 공초점 현미경 데이터, 그리고 기상청 슈퍼컴퓨터를 활용하여 생산한 기후 데이터 등 다양한 분야의 대용량 실험데이터를 IBS HPC 자원으로 전송하여 분석하는데 핵심적인 역할을 합니다.

· Educational History

부산대학교 물리학 학사 (1998)

부산대학교 이학석사 (2000)

부산대학교 이학박사 이론 통계물리학 전공 (2004)

· Employment History

부산대 전임연구원 (2004~2006)

하버드대학교 화학과 포스트닥 & 전임연구원 (2006~2011)

부산대 연구교수 (2011~2016)

기초과학연구원 기후물리연구단 프로젝트 리더 (2017~2019)

기초과학연구원 선임/책임 기술원 (2019~현재)

고신뢰도모델 슈퍼컴퓨팅 가속화 기술 개발

가상원자로 해석을 위한 고신뢰도 열유체 시뮬레이션의 이기종 슈퍼컴퓨팅 가속화 기술을 개발하고, CPU 대비 획기적 성능 향상을 달성하기 위한 연구 내용을 공유한다. 고신뢰도 모델의 슈퍼컴 환경 최적화, 이기종 아키텍처 기반 응용 SW 개발, 성능 평가 및 응용 사례를 살펴보고 향후 고성능컴퓨팅 기반 원자로 설계 시뮬레이션의 발전 방향을 논의하고자 한다.

- | | |
|-------------|---|
| 13:30-13:55 | GPU 기반 그래프 병렬 처리 알고리즘: Balanced Partitioning-Temporal Aware Batch-Uncertainty Aware Sample
오상윤 교수 (아주대학교) |
| 13:55-14:20 | SGTucker: A scalable GPU-based Tucker decomposition method with storage-based operations
전강욱 교수 (한국기술교육대학교) |
| 14:20-14:45 | 혼합 정밀도에 따른 난류 유동 시뮬레이션 오차 및 수치 안정성 분석
김도균 교수 (홍익대학교) |
| 14:45-15:10 | Gaussian process와 expectation propagation을 활용한 크리프 구성 방정식 모델링
이택상 교수 (명지대학교) |
| 15:10~15:30 | Coffee Break |
| 15:30~15:55 | 가상원자로 해석을 위한 CUDA 기반의 이상유동 열수력 해석코드 GPU 병렬화
박소현 선임 (KAERI) |
| 15:55-16:20 | Nurion KNL과 Grace Hopper GH200 시스템을 활용한 원자력 열유동 해석 코드의 성능 분석
김종찬 팀장 (KISTI) |
| 16:20-16:45 | CUPID 열유동 솔버에서 압력 계산 모듈의 GPU 가속화
김기하 선임 (KISTI) |
| 16:45-17:10 | GPU 가속을 활용한 고이식성 MD 시뮬레이션 엔진 개발
서상재 팀장 (KISTI) |
| 17:10-18:00 | Discussion |



오상운

교수

아주대학교 소프트웨어학과

GPU 기반 그래프 병렬 처리 알고리즘: Balanced Partitioning-Temporal Aware Batch-Uncertainty

초 대규모 시뮬레이션과 과학 계산에서는 시간에 따라 변화하는 방대한 그래프가 생성되며, 이를 GPU로 효율적으로 처리하는 것이 핵심 과제이다. 본 발표에서는 GPU 기반 그래프 병렬 처리를 데이터 관점에서 고도화하기 위한 알고리즘: 그래프 데이터를 나누고 (Partitioning)/묶고 (Batching)/뽑아내는 (Sampling) 세 가지 최신 알고리즘을 소개한다.

첫째, 균형 지향 Label Propagation 파티셔닝은 동질성과 부하 균형을 동시에 만족하도록 반복 단계마다 다목적 지표를 평가 및 반영한다. 둘째, 시간 인지 배치 생성은 시계열 의존성이 낮은 이벤트를 하나의 배치로 묶어 동적 그래프의 처리 문제를 완화한다. 셋째, 불확실성 인지 샘플링은 데이터 희소성과 노이즈가 큰 환경에서 예측 불확실성을 정량화해 유의미한 서브그래프만 선택한다.

알고리즘들은 연산 자원 활용률을 높이면서도 학습 정확도를 향상시키는 것을 목표로 하고 있으며, 본 발표에서는 결과를 바탕으로 동적 그래프 학습의 병목을 완화할 구체적 전략과 구현 경험을 공유할 예정이다.

· Educational History

Indiana University, Bloomington, IN - Ph. D., Computer Science (Aug. 2001~Aug. 2006)

Syracuse University, Syracuse, IN - MS, Computer Science (Aug. 1997~May. 1999)

Sungkyunkwan University, Suwon, Republic of Korea - Bachelor of Engineering,
Mechanical Design (Mar. 1990~Feb. 1995)

· Employment History

Professor - Dept. of Software and Computer Engineering, and Dept. of Artificial
Intelligence, Ajou University (Sept. 2007~Present)

Visiting Associate Professor - Department of Computer Science, Indiana University
(Aug. 2013~Aug. 2014)

Senior Research Staff Member - Innovation Research Center, SK Telecom
(Oct. 2006~Aug. 2007)



전강욱

조교수

한국기술교육대학교

SGTucker: A scalable GPU-based Tucker decomposition method with storage-based

Tucker decomposition is one of the fundamental methods for analyzing tensors, which are known as multi-dimensional arrays. Existing Tucker decomposition methods, however, face significant challenges due to high computational complexity and substantial memory requirements, especially when processing large-scale and sparse tensor datasets. Recent studies suggest that most large-scale datasets can be feasibly managed using the storage of a single PC. Consequently, storage-based methods have attracted attention across various domains, including machine learning, data mining, and scientific computing. In this paper, we propose SGTucker, a scalable and efficient GPU-based Tucker decomposition method specifically designed for large-scale tensor analysis in single-PC environments. SGTucker divides the input tensor into appropriately sized chunks, ensuring that each can be effectively managed within main memory. Additionally, we introduce disk-based computation strategies capable of efficiently handling input and intermediate data that exceed available memory capacities. To enhance computational performance and memory utilization, SGTucker integrates a GPU-based data pipeline. Furthermore, we significantly reduce the I/O overhead associated with disk-based operations by overlapping data transfers and computations, ensuring seamless data management between memory, storage, and GPU devices. Leveraging GPU-based parallelization, SGTucker further accelerates computation-intensive operations within the Tucker decomposition process. Through extensive experiments, we demonstrate that SGTucker achieves superior scalability and decomposition speed compared to existing state-of-the-art methods.

· Educational History

Ph.D. in Computer Science, DGIST (2018)

· Employment History

Manager, SK Telecom (2018~2020)

Senior Researcher, KISTI (Korea Institute of Science and Technology Information)
(2020~2023)

Assistant Professor, KOREATECH (Korea University of Technology and Education)
(2023~present)



김도균

교수
홍익대학교

혼합 정밀도에 따른 난류 유동 시뮬레이션 오차 및 수치 안정성 분석

최근 과학 계산 및 인공지능 분야에서는 혼합 정밀도(Mixed Precision) 계산과 GPU 병렬 연산을 결합한 고성능 계산 기법이 활발히 연구되고 있다. 특히 전산유체역학(CFD) 분야에서는 연산 성능 향상을 위한 다양한 적용 사례가 보고되고 있으나, 낮은 정밀도로 인해 발생할 수 있는 수치적 불안정성과 해석 정확도 저하 문제는 여전히 해결이 필요한 핵심 과제이다.

본 세미나에서는 혼합 정밀도 기반 유동 해석에서 발생하는 수치 오차가 해석 정확도 및 수치적 안정성에 미치는 영향을 체계적으로 분석한 연구를 소개한다. 특히 단정밀도 계산에서 빈번하게 나타나는 수치 발산 현상의 주요 원인으로 격자 해상도 불일치와 압력 항 처리 방식의 한계를 지적하고, 이를 개선하기 위한 두 가지 주요 기법, 재정규화(normalization) 접근법과 압력 항의 대칭 차분 처리 방식을 제안하였다. 제안된 기법은 비점성 오일러 와류(Mach 0.5 조건) 문제에 적용되어 수치 실험을 통해 검증되었으며, 약 2~3%의 추가 계산 비용만으로 배정밀도와 동등한 수준의 수치 안정성을 확보하는 데 성공하였다. 본 연구는 혼합 정밀도 계산이 단순한 연산 속도 향상을 넘어, 수치 해석의 신뢰성과 정확도를 동시에 확보할 수 있는 기반 기술로 작용할 수 있음을 시사한다. 나아가, 반정밀도 이하의 저정밀도 환경에서도 안정적인 CFD 시뮬레이션이 가능함을 보여주며, 고성능 수치 해석의 계산 효율성과 확장성을 동시에 달성할 수 있는 새로운 가능성을 제시한다.

· Educational History

서울대학교, 기계항공우주공학부 학사 (1999)
서울대학교, 기계항공우주공학부 석사 (2004)
Stanford University, 기계공학과 박사 (2011)

· Employment History

Center for Turbulence Research, Research Associate (2011~2013)
Cascade Technologies, Inc, Senior Scientist (2013~2021)
홍익대학교 기계시스템디자인공학과 조교수 (2021~현재)



이택상

교수
명지대학교

Gaussian process와 expectation propagation을 활용한 크리프 구성 방정식 모델링

본 발표에서는 Gaussian process(이하 가우시안 프로세스)와 expectation propagation(이하 EP)을 활용한 데이터 기반 크리프 구성 방정식 모델 개발 방법론을 소개한다. 9Cr-1Mo 강의 550°C 크리프 시험 데이터를 확보하여 시간과 응력에 따른 크리프 변형률을 학습 데이터셋으로 사용하였다. 또한, 크리프 변형의 단조성을 보장하기 위해 가상의 제어점을 추가하고 이를 EP에 적용한다. 크리프 변형률과 가상의 제어점은 모두 학습 데이터로 사용되며, 전자는 가우시안 likelihood를, 후자는 단조 증가 조건을 반영하기 위해 probit likelihood를 따른다고 가정한다. Probit likelihood는 단조성에 대한 soft constraint를 부여하기 위한 것인데, 비가우시안 likelihood로 인해 사후 분포는 분석적으로 계산할 수 없게 되며 이를 해결하기 위해 EP 알고리즘을 활용하여 사후 분포를 가우시안 분포로 근사한다. EP evidence나 site parameter가 수렴한 후 negative log marginal likelihood를 최소화하는 하이퍼파라미터를 추정하고, 이를 기반으로 사후 분포를 업데이트한다. 본 방법론으로 도출한 시간 및 응력에 따른 크리프 변형률 선도는 단조 증가 함수를 만족하며, 열역학 제2법칙에 따른 mechanical work의 양(positive work) 조건도 충족한다. 이는 물리 법칙을 따르는 데이터 기반 크리프 구성 방정식 모델링을 가능하게 하며, 보다 유연하고 물리적으로 일관된 모델링 방식이라 할 수 있다. 특히, 가우시안 프로세스를 기반으로 한 접근법은 학습 데이터가 제한적인 경우에도 불확실성을 정량화하며 모델링할 수 있는 장점이 있다. 제안한 방법론은 비선형 변형 특성을 가지는 재료의 구성 방정식 모델링에 활용될 수 있으며, 향후 유한요소법에 적용하여 구조 해석으로의 확장도 가능하다.

· Educational History

성균관대학교 기계공학부 학사 (2014)
성균관대학교 기계공학과 석사 (2016)
Purdue University, Mechanical Engineering, 박사 (2020)

· Employment History

삼성전자 생산기술연구소 책임연구원 (2020~2021)
명지대학교 기계시스템공학부 기계공학전공 (2021~현재)



박소현

선임연구원

한국원자력연구원 디지털원자로*AI연구센터

가상원자로 해석을 위한 CUDA 기반의 이상유동 열수력 해석코드 GPU 병렬화

디지털원자로AI연구센터는 CPU-GPU 슈퍼컴퓨팅 클러스터에서 가상원자로 해석을 목적으로 이상유동 열수력 해석코드를 GPU 병렬화하고 있다. 기존 한국원자력연구원은 포트란 기반의 MPI로 실행되는 CPU 기반의 열수력 해석코드(CUPID)를 보유하고 있으며, 원자로의 이상유동을 해석하는데 사용된다.

본 연구에서는 CUPID 코드를 CUDA 기반의 GPU 병렬화하기 위한 두 가지 전략을 제시한다. 첫 번째 전략은 기존 CUPID 코드의 구조를 유지하면서 CUDA Fortran 언어를 사용하여 서버루틴을 1대1 대응 방식으로 GPU 병렬화하는 방법이다. 두 번째 전략은 CUDA C 언어를 사용하여 기존 코드를 재구성하고, GPU 최적화에 용이하도록 병렬화하는 방법이다.

본 연구는 두 전략의 장단점과 기술적 특징, 그리고 현재까지의 병렬화 성능을 분석하고자 한다.

· Educational History

서울대학교 원자핵공학과 학사 (2015)

서울대학교 원자핵공학과 박사 (2021)

· Employment History

한국원자력연구원 선임연구원 (2021~현재)



김종찬

팀장

한국과학기술정보연구원

Nurion KNL과 Grace Hopper GH200 시스템을 활용한 원자력 열유동 해석 코드의 성능 분석

본 연구는 국가슈퍼컴퓨터 5호기 누리온의 자원인 KNL(Knights Landing) 시스템과 6호기 시스템으로 선정된 NVIDIA의 AI 슈퍼칩 기반 Grace-Hopper(GH200) 플랫폼을 활용하여, 원자력 분야에서 사용되는 열유동 해석 코드의 자원 전환 시 발생할 수 있는 문제점을 분석하고 CPU 단계에서의 성능을 비교·분석하는 것을 목적으로 한다.

본 연구에서는 동일한 해석 코드를 두 시스템에 이식한 후, 단일 코어 성능, 병렬 확장성(MPI), 벡터화 활용도(AVX, SVE) 등을 정량적으로 측정한다. 이를 통해 x86 manycore 기반과 ARM 기반의 최신 HPC 구조 간의 병렬 연산 처리 방식, 메모리 대역폭, 통신 지연 특성이 해석 코드의 성능에 미치는 영향을 비교하고, 열유동 해석에 있어 최신 플랫폼의 적합성 및 효율성을 종합적으로 평가한다.

향후 국가슈퍼컴퓨터 6호기 도입에 따른 다양한 해석코드의 ARM 기반 전환 및 이식 전략 수립, 시뮬레이션 자원 활용 계획 수립에 기여할 수 있을 것으로 기대된다.

· Educational History

한국항공대학교 항공우주및기계공학부 학사/석사 (2007/2009)

Georgia Institute of Technology, Aerospace Eng., M.S. (2014)

한국항공대학교 항공우주및기계공학과 공학박사 (2020)

· Employment History

한국과학기술정보연구원 선임연구원 (2021~현재)



김기하

선임연구원

한국과학기술정보연구원 슈퍼컴퓨팅가속화연구단 엑사컴퓨팅연구팀

CUPID 열유동 솔버에서 압력 계산 모듈의 GPU 가속화

본 발표에서는 다상 열유동 해석 코드인 CUPID의 압력 계산 단계에 대해 GPU 가속을 적용한 사례를 소개한다. CUPID는 복잡한 열유동 현상을 해석하기 위한 고해상도 수치해석 코드로, 특히 압력 보정 과정은 전체 계산에서 가장 많은 연산 자원을 소모하는 병목 지점으로 알려져 있다.

이에 본 연구에서는 해당 압력 계산 모듈을 대상으로 sparse matrix 기반의 반복 선형 해법(BiCG)에 대해 GPU 기반 가속화를 수행하였으며, 이를 통해 연산 성능 향상과 병렬화 가능성을 확인하고자 하였다.

발표에서는 CUPID의 압력 계산 구조와 병목 특성을 간략히 소개한 후, GPU 가속을 위한 전반적인 구조 설계, CUDA 및 cuSPARSE 라이브러리를 활용한 구현 방식, Fortran과 CUDA 간 연동 구조, 그리고 단일 GPU 상에서의 초기 성능 측정 결과 등을 중심으로 내용을 공유할 예정이다. 또한, 향후 preconditioner 대체 및 멀티 GPU 확장에 대한 계획도 간략히 논의한다.

· Educational History

연세대학교 천문우주과학과 이학석사 (2014)

연세대학교 계산과학공학과 공학박사 (2020)

· Employment History

차세대수치예보모델개발사업단 (2020~2022)

삼성전자, SAIT (2022~2024)

한국과학기술정보연구원 선임연구원 (2024~현재)



서상재

책임기술원

한국과학기술정보연구원

GPU 가속을 활용한 고이식성 MD 시뮬레이션 엔진 개발

본 발표에서는 현재 개발 중인 분자동역학(Molecular Dynamics, MD) 시뮬레이션 코드(DeepScaleMD)에 대해 소개한다. 해당 코드는 MPI 기반 CPU 병렬화 뿐만 아니라 CUDA 및 SYCL 아키텍처를 모두 지원하는 고이식성 구조로 설계되었다. 또한, 다양한 계산 환경에서의 효율적인 계산을 목표로 하고 있다. Force field 측면에서는 내부 최적화된 built-in force field 뿐만 아니라 머신러닝 기반 force field(MLFF)의 활용을 위하여 Python 인터페이스를 개방하고 있다. 또한 Hilbert space filling curve를 활용한 고성능 neighbor list 구성 기법을 적용하여 계산 효율을 향상시켰다.

현재 MD 시뮬레이션 엔진은 개발 단계에 있고, 과제 적용을 위해 MTP 기반 MLFF를 우선 지원할 예정이며, 향후 GNN 기반 MLFF의 가속 기술을 개발할 예정이다. 본 발표에서는 코드 설계 철학과 구현 요소를 살펴보고, 향후 과제 활용을 위한 확장 방향에 대해 논의하고자 한다.

· Educational History

B.S.E. in Mechanical Engineering, Sungkyunkwan University (2010)

M.S.E. in Department of Nano Science and Technology, Sungkyunkwan University (2012)

Ph.D. in Department of Nano Science and Technology, Sungkyunkwan University (2015)

· Employment History

Postdoc Researcher at Institute of Advanced Machinery and Technology, Sungkyunkwan University (2015~2016)

Postdoc Researcher at Department of Materials Chemistry, Nagoya University (2016~2019)

Present Researcher at Korean Institute of Science and Technology Information (2019~present)

기상·기후 분야 초고성능컴퓨팅 활용고도화

국가초고성능컴퓨팅 혁신전략'에 따른 10대 국가전략 분야 중 하나인 기상·기후 분야는 '22년부터 초고성능컴퓨팅 활용고도화 사업을 수행하고 있다.

본 워크숍에서는 사업의 내용과 성과뿐만 아니라, 본 사업과 관련된 초고성능 컴퓨팅, 인공지능, 기상·기후 예측, 수치모델 등에 대해 소개하고자 한다.

13:30~13:45	Ensemble Perturbation Method for Deep learning-based Subseasonal Climate Prediction 강대현 박사 (KIST)
13:45~14:00	Deep learning-based adjoint modeling for CO assimilation 함유근 교수 (서울대)
14:00~14:15	Advances in subseasonal prediction for intraseasonal variability and the associated extremes using an AI global climate model 이준이 교수 (부산대)
14:15~14:30	Seasonal Prediction of Antarctic Sea Ice Using Transfer Learning and Explainable Deep Learning Models 국종성 교수 (서울대)
14:30~14:45	Current Status of Deep Learning Model Development and GPU Performance Evaluation using KISTI Supercomputer 박진영 박사 (KISTI)
14:45~15:00	Coffee Break
15:00~15:30	Building a Community-Centric AI Ecosystem: Integrating Data and HPC at NSF NCAR Thomas Hauser (NCAR)
15:30~16:00	Directions in Energy Efficient HPC and AI for Driving Earth System Digital Twins Stan Posey (NVIDIA)
16:00~16:15	Development of AI-based Ultra-High-Resolution Wind Prediction Model Using FourCastNet 김동훈 교수 (제주대)
16:15~16:30	Reproduction of Wildfires on the East Coast of Korea Using a High-resolution WRF-Fire Model 차동현 교수 (UNIST)
16:30~16:45	Development of an AI-Integrated High-Resolution Modeling Strategy for Wildfire Spread Prediction Using MPAS 박상훈 교수 (연세대)



강대현

선임기술원

한국과학기술연구원

Ensemble Perturbation Method for Deep learning-based Subseasonal Climate Prediction

Recent deep learning-based models have shown great potential in predicting and interpreting weather and climate phenomena. For example, the data-driven weather forecast models (e.g., GraphCast and Pangu-Weather) showed better forecast skills of the global atmosphere within a week than the operational numerical weather prediction. However, with their short history, understanding of trained physical processes in the deep learning-based model is not satisfactory, which limits its predictability until two weeks.

In particular, it is uncertain whether the ensemble prediction method for traditional numerical weather prediction can be valid in the deep learning models. Motivated by the above, this study investigates ensemble methods, such as random normal and bred vector, for perturbing initial condition of data-driven climate prediction model. The results suggest that a realistic perturbation of ensemble member is crucial for ensemble prediction skill of the subseasonal prediction.

· Educational History

울산과학기술원 도시환경공학부 학사 (2012)

울산과학기술원 도시환경공학부 박사 (2019)

· Employment History

University of Washington, 박사후연구원 (2019~2021)

전남대학교 연구교수 (2021~2022)

한국과학기술연구원 선임연구원 (2022~현재)



함유근

부교수

서울대학교 환경관리학과

Deep learning-based adjoint modeling for CO assimilation

Carbon monoxide (CO) is a colorless, odorless, and tasteless gas that is highly toxic. Various types of the observations, such as ground-, airborne-based measurements, and satellite remote sensing, consistently recognized the East Asia as one of the world's major industrial regions and a significant source of CO, therefore, data assimilation to assess its emission and atmospheric distribution is essential for high quality monitoring.

While the 4DVAR technique has been utilized in the estimation of CO concentration and emission, its application has been largely restricted to few chemical models equipped with its adjoint version, making the conclusions drawn from such studies inherently model-dependent. By leveraging its capabilities, DL have been employed to build adjoint models for understanding CO transport dynamics and utilizing for 4DVAR.

We found that adjoint model of the U-Net based forward operator realistically captures the spatiotemporal propagation of CO concentration toward the upstream regions. And, idealized 4DVAR experiment with a single observation exhibited that the DL-based adjoint model can successfully assimilate observational data and contribute to improved forecast accuracy.

· Educational History

서울대학교 지구환경과학부 학사 (2003)

서울대학교 지구환경과학부 박사 (석박사 통합과정) (2009)

· Employment History

NASA/GFSC 연구원 (2010~2013)

전남대학교 해양학과 (2013~2024)

서울대학교 환경대학원 환경계획학과 (2024~현재)



이준이

교수

부산대학교 기후과학연구소

Advances in subseasonal prediction for intraseasonal variability and the associated extremes using an AI global climate model

Internal climate variability plays a critical role in determining the spatial distribution, timing, and duration of weather and climate extremes. In particular, tropical intraseasonal modes, such as Madden-Julian Oscillation and Boreal Summer Intraseasonal Oscillation, have been shown to exert significant influence on extreme heat and rainfall events, particularly over Asia.

Studies using S2S dynamical prediction highlight that models capable of accurately representing and predicting the propagation of tropical intraseasonal modes demonstrate enhanced skills in predicting extreme heat and rainfall events on weather to subseasonal timescales. Recent advancements in AI-based global models have surpassed traditional dynamical models in weather prediction and show promising potential in improving subseasonal forecast.

A deep learning-based, data-driven model - KIST's Atmospheric Rhythm with Integrated Neural Algorithms (KARINA)- has been developed. KARINA integrates advanced neural network architectures, including ConvNeXt, SENet, and Geocyclic Padding technique, to enhance prediction accuracy up to one month in advance. KARINA outperforms the ECMWF dynamical weather forecast system and demonstrates comparable performance to state-of-the-art AI-based global models.

· Educational History

이화여자대학교 과학교육학과 지구과학전공 학사 (1997)

서울대학교 대기과학과 석사 (1999)

서울대학교 대기과학과 박사 (2003)

· Employment History

NASA/GFSC 박사후연구원 (2003~2005)

하와이대학교 국제태평양연구소 연구원 (2005~2013)

부산대학교 기후과학연구소 브레인폴 초빙 교수 (2013~2015)

부산대학교 기후과학연구소 조교수 및 부교수 (2015~2024)

부산대학교 기후과학연구소 교수 (2024~현재)



국종성

교수
서울대학교

Seasonal Prediction of Antarctic Sea Ice Using Transfer Learning and Explainable Deep Learning Models

Accurate prediction of Antarctic sea ice variability is critical for understanding global climate stability and mitigating associated economic and ecological risks. Despite extensive efforts, current dynamical models exhibit limited skill, particularly during summer, due to the complex interactions of atmospheric and oceanic processes.

In this study, we develop a U-Net-based deep learning framework with transfer learning to predict seasonal Antarctic sea ice anomalies across five regions. The model is pre-trained on CESM2 Large Ensemble simulations and fine-tuned using observational and reanalysis datasets spanning 1980–2023. Our results show that the fine-tuned U-Net model outperforms state-of-the-art dynamical models, achieving higher anomaly correlation coefficients and lower root-mean-square errors across all seasons.

To enhance interpretability, we apply contribution maps and signed-contribution analysis, revealing the dominant roles of sea ice concentration and sea surface temperature during growth seasons, meridional wind during summer, and shortwave radiation during spring. These findings highlight the potential of explainable deep learning to improve seasonal sea ice prediction and deepen understanding of the key physical drivers of Antarctic sea ice variability.

· Educational History

서울대학교 대기과학과 학사 (1998)
서울대학교 지구환경과학부 석사 (2000)
서울대학교 지구환경과학부 박사 (2003)

· Employment History

한국해양과학기술원 책임연구원 (2009~2014)
포항공과대학교 교수 (2014~2024)
서울대학교 교수 (2024~현재)



박진영

박사후연구원

한국과학기술정보연구원

Current Status of Deep Learning Model Development and GPU Performance Evaluation using KISTI Supercomputer

Numerical climate modeling typically demands substantial computational resources and energy consumption, posing challenges for significant performance improvements. AI-based high-resolution climate prediction systems, once trained, present a promising alternative by operating with lower energy consumption and reduced computational costs compared to traditional climate models. This positions AI-driven models as a new paradigm capable of overcoming existing performance stagnation.

Through the "Development of an AI global climate prediction system at high-resolution" project, KISTI supports the development of a deep learning climate prediction models trained on climate big data using massively parallel accelerators (GPUs). Since 2022, collaborative research have focused on: 1. Establishing a high-performance computing environment optimized for accelerated computing technologies, thereby facilitating the development of deep learning climate prediction models. 2. Implementing machine learning techniques to reduce energy consumption and computational expenses while simultaneously enhancing predictive performance.

This presentation outlines the current status of computational resources available within KISTI's supercomputing infrastructure, summarizes key results from the collaborative research, and provides comparative performance evaluations of global numerical weather prediction model and AI-driven models utilizing GPU resources on KISTI's 5th-generation supercomputer.

· Educational History

공주대학교 대기과학과 학사 (2017.02)

울산과학기술원 도시환경공학과 석/박사 (2023.02)

· Employment History

울산과학기술원 도시환경공학과 박사후연구원 (2023.02~2023.09)

한국과학기술정보연구원 슈퍼컴퓨팅 인프라센터 박사후연구원 (2023.10~현재)



Thomas Hauser

Director, Computational and Information Systems Lab
NSF NCAR

Building a Community-Centric AI Ecosystem: Integrating Data and HPC at NSF NCAR

The National Science Foundation's National Center for Atmospheric Research (NSF NCAR) is establishing a community-centric AI Ecosystem for Earth System Science, built upon a tightly integrated Research Data Commons and advanced high-performance computing (HPC) capabilities. This ecosystem combines NSF NCAR's extensive geoscience data repositories, the Derecho supercomputer, and scalable on-premise cloud infrastructure ("CIRRUS").

One of the goals of the AI ecosystem is to facilitate the automation of the entire AI development lifecycle, from data ingestion and preprocessing to model training, validation, and deployment. A defining strength of this planned ecosystem is its foundational commitment to ethical, responsible, and trustworthy AI practices. The platform will systematically assess data quality, biases, uncertainties, and fitness for use to ensure the development of robust and transparent AI models.

I will present our progress in integrating the data commons with our HPC system and provide an overview of the Community Research Earth Digital Intelligence Twin (CREDIT) platform. I will also outline collaboration opportunities.

· Educational History

Ph.D. in mechanical engineering, TU Muenchen

· Employment History

Director (Computational and Information Systems Laboratory) (2023.10~present)



Stan Posey

Program Manager, Earth System Science Domain
NVIDIA Corporation, Santa Clara, CA, USA

Directions in Energy Efficient HPC and AI for Driving Earth System Digital Twins

HPC and AI have become critical components of Earth system modeling and climate change research, which has experienced rapid growth in data from model output of increasing resolution in weather and climate models, and Earth observation systems that produce orders of magnitude more data than their previous generations. Efforts are underway in the weather and climate modeling community towards further refinement in horizontal resolutions of numerical atmosphere GCMs towards km-scale to explicitly resolve certain small-scale convective cloud processes and provide more realistic local information on climate change.

At the same time, exascale HPC systems have arrived and in most cases are designed with GPU accelerator technology that offers opportunities in reasonable numerical simulation and AI training turnaround times balanced with efficiency in energy consumption. Ultimately output from global km-scale storm-resolving models will become the essential driver behind the deployment of Earth digital twins for programs like the EC Destination Earth, NVIDIA Earth-2, and others.

This talk will describe advances in HPC for GPU-accelerated numerical models, AI software and system features for large-scale data handling, and ML model training and inference that when combined, provide the critical components towards the vision of Earth system digital twins.

• Educational History

B.Sc. Mechanical Engineering, University of Tennessee, Knoxville, USA
M.Sc. Mechanical Engineering, University of Tennessee, Knoxville, USA

• Employment History

U.S. DOE Oak Ridge National Laboratory, Research Engineer (1983)
CD-adapco, Engineering Analyst (1985)
Control Data Corporation, HPC Applications Engineer (1987)
Silicon Graphics Inc, Director Worldwide CAE Program (1990)
Panasas Parallel Storage, Director HPC Applications Program (2007)
NVIDIA Corporation, Program Manager, ESS and CFD Domains (2009)



김동훈

학술연구교수

제주대학교 태풍연구센터

Development of AI-based Ultra-High-Resolution Wind Prediction Model Using FourCastNet

While numerous global atmospheric circulation AI-based weather models have been recently developed, regional-scale limited area models remain in the developmental stage. This study develops a regional wind prediction model (RFCN) that incorporates lateral boundary conditions using FourCastNeXt, a resource-optimized version of FourCastNet, and implements 3-hour forecasts at 1-km ultra-high resolution with 10-minute temporal intervals.

The original FourCastNet was trained on 40 years of ERA5 reanalysis data to learn global circulation patterns but showed limitations for regional applications. In this study, we performed retraining using high-resolution regional WRF model data. Training datasets were constructed using initial and boundary conditions from the WRF outer domain as inputs and forecast fields from the 1-km inner domain as outputs, effectively incorporating regional model boundary conditions.

Results demonstrate that RFCN successfully reproduces WRF prediction patterns and effectively captures regional characteristics even under complex terrain conditions. The model shows computational efficiency gains exceeding 90% compared to conventional WRF models while maintaining comparable prediction accuracy, requiring less than one minute for 3-hour forecasts.

Acknowledgments: 본 연구는 한국과학기술정보연구원(KISTI)의 위탁연구개발과제와 국가초고성능컴퓨팅센터로부터 초고성능컴퓨팅자원과 기술지원(KSC-2025-CRE-0310)을 받아 수행된 연구성과임

· Educational History

성균관대학교 토목환경공학과 학사 (1994)

성균관대학교 대학원 해안·해양 공학 전공 석사 (1996)

성균관대학교 대학원 해안·해양 공학 전공 박사 (1999)

· Employment History

연세대학교 대기과학과/지구환경연구소 박사후연구원 (1999~2000)

서울대학교 대기과학과/기후환경시스템연구센터 박사후연구원 (2000~2002)

(일본) 전력중앙연구소(CRIEPI) 특별계약연구원 (2002~2005)

기상청/국립기상연구소 기상연구관 (2005~2012)

한국외국어대학교 WISE사업단 연구개발본부장 (2014~2016)

인하대학교 인공지능융합연구센터 산학연구교수 (2017~2022)

제주대학교 태풍연구센터 학술연구교수 (2023~현재)



차동현

교수
UNIST

Reproduction of Wildfires on the East Coast of Korea Using a High-Resolution WRF-Fire Model

Using the high-resolution numerical model WRF-SFIRE, which enables two-way coupling between atmospheric and wildfire models, a wildfire spread prediction system was reasonably established. Based on this system, major wildfire events that occurred in the Gangwon province and Uljin since 2005 were successfully reproduced.

To reduce uncertainty in wildfire simulations, ensemble forecasting was conducted by combining various conditions, including three ignition points, two sets of initial and boundary conditions, and three different physical parameterization schemes. As a result, a total of 18 experiments were conducted for each case. Additionally, a Pseudo Global Warming (PGW) experiment was applied to simulate wildfire spread under future warming conditions.

Overall, WRF-SFIRE realistically reproduced the characteristics of wildfires occurring along the east coast of Korea. The simulation results varied significantly among ensemble members that were more sensitive to wind conditions. These reproduced wildfire simulations are planned to be used as training data for future artificial intelligence applications.

· Educational History

서울대학교 지구환경과학부 이학사 (2001)
서울대학교 지구환경과학부 이학박사 (2009)

· Employment History

서울대학교 BK21 박사후연구원 (2009~2010)
하와이대 국제태평양연구소 박사후연구원 (2011~2012)
울산과학기술원 지구환경도시건설공학과 교수 (2012~현재)



박상훈

교수

연세대학교

Development of an AI-Integrated High-Resolution Modeling Strategy for Wildfire Spread Prediction Using MPAS

Improving high-resolution forecasts over East Asia—particularly in regions with complex terrain such as the Korean Peninsula—requires innovative approaches that combine traditional numerical modeling with emerging data-driven methods. In this exploratory study, we investigate a hybrid framework that integrates high-resolution simulations from the Weather Research and Forecasting (WRF) model with artificial intelligence (AI) techniques, aiming to enhance forecast skill within the variable-resolution, unstructured mesh environment of the Model for Prediction Across Scales (MPAS).

Rather than developing a fully operational system, this work serves as a proof of concept to assess the feasibility of using AI models trained on WRF outputs to support and complement MPAS forecasts. Special emphasis is placed on wildfire-related weather prediction, where rapid, probabilistic assessment is critical. By testing the potential of AI-guided postprocessing (AI-FIRE) within the MPAS framework, we aim to provide insights into future directions for high-resolution, hazard-aware forecasting systems over East Asia.

· Educational History

B.S. in Atmospheric Sci., Yonsei Univ. (1999)

M.S. in Atmospheric Sci., Yonsei Univ. (2001)

Ph.D. in Atmospheric Sci., Yonsei Univ. (2009)

· Employment History

Project Scientist in National Center for Atmospheric Research (2011~2017)

Professor, Atmospheric Sci., Yonsei Univ. (2017~현재)

DAY 1

Conference

Thursday, September 04, 2025

**KOREA SUPERCOMPUTING
CONFERENCE 2025**

THE NEXT FRONTIER: HPC with AI and Quantum

2025년 한국계산과학공학회 추계학술대회

13:30~14:00	GPU-Accelerated Solver for Batched Block Tridiagonal Matrix Systems on Distributed Memory Architectures 김기하 (KISTI)
14:00~14:30	Ab initio nuclear theory 김영만 (IBS)
14:30~15:00	An Efficient, High-Precision Self-Gravity Solver in Rotating Frames 김용휘 (KISTI)
15:00~15:30	Coffee Break
15:30~16:00	Efficient Implementation of a GMRES Solver for Compressible Flow Simulations Using Python 김남형 (인하대학교)
16:00~16:30	난류유동의 Super-Resolution 학습을위한Local Constraint Neural Operator 모델 허정원 (연세대학교)
16:30~17:00	An Adaptive Mesh Refinement for Relativistic Hydrodynamics Using a Finite Volume Predictor Corrector Scheme 김진호 (KASI)
17:00~17:30	Spin-Dependent Polaron Pair Charge Recombination and Singlet Exciton Yields of Blue Organic Light-Emitting Diode Materials 이영민 (KAIST)
	(*)포스터 발표 Design of ALU Based on Complex-base Numeral System: Performance Evaluation and Application Methods 권도한 (안동고등학교 3학년)



김기하

선임연구원

한국과학기술정보연구원

GPU-Accelerated Solver for Batched Block Tridiagonal Matrix Systems on Distributed Memory Architectures

이 연구에서는 GPU acceleration을 통합한 distributed memory architectures에서의 batched block tridiagonal matrix systems에 대한 domain-decomposed parallel solution method를 제시한다. 이러한 시스템은 특히 high-order finite difference schemes이나 nonlinear implicit techniques를 사용할 때, 다차원 partial differential equations의 수치적 해법 과정에서 자주 발생하며, 대규모 batch-processing 환경에서의 효율적 해법은 현대 scientific computing에서 중요한 과제이다. 제안된 방법은 원래 scalar tridiagonal matrix systems를 위해 개발된 PaScaL_TDMA 알고리즘을 확장하여 block matrices를 처리하도록 하였으며, 수정된 block Thomas algorithm을 채택하고 two-step reduction과 back-substitution 전략을 통해 inter-process communication을 최소화한다. 구현은 batched operations에 최적화되어 GPU 계산 효율을 극대화한다. CPU 플랫폼에서의 성능 평가 결과, block tridiagonal systems의 경우 block matrix inversion의 높은 computation-to-communication ratio가 오히려 기존 all-to-all communication 기반 방법보다 성능 저하를 일으킬 수 있음이 확인되었다. 반면 GPU에서는 computational kernels의 상당한 가속화로 인해 communication costs의 상대적 영향이 증가한다. 또한 GPU 개수가 증가할수록 제안된 방법은 거의 이상적인 scaling performance를 보인 반면, 기존 방법들은 약 35%의 scaling efficiency만을 달성하였다.

· Educational History

연세대학교 천문우주과학과 이학부 (2007~2014)

연세대학교 계산과학공학과 공학박사 (2014~2020)

· Employment History

차세대수치예보모델개발사업단 (2020~2022)

삼성전자, SAIT (2022~2024)

KISTI, 슈퍼컴퓨팅가속화연구단 (2024)



김영만

연구위원

기초과학연구원, 희귀핵 연구단

Ab initio nuclear theory

Nuclei are fascinating quantum many-body systems that provide a solid testing ground for our understanding of the strong interaction at low energies. A central and challenging problem in nuclear physics is to fully understand how stable and radioactive nuclei emerge from protons and neutrons, whose interactions are governed primarily by the strong force. Recent advances in high-performance supercomputing have opened up exciting opportunities for rigorous studies of nuclear structure and reactions using fundamental (or realistic) nuclear interactions derived from QCD. The ultimate goal of ab initio nuclear theory is not only to describe nuclei with high precision from QCD or its effective theories, but also to uncover key features of the strong interaction at low energies through reliable many-body methods.

In this presentation, we will introduce nuclear lattice effective field theory as an example of such ab initio approaches, and present some recent achievements along with future research plans.

· Educational History

B.Sc. in Physics, Hanyang University, Korea (1992)

Ph.D. in Physics, Hanyang University, Korea (1999)

· Employment History

Postdoctoral research fellow, Seoul National University, Korea (2000~2002)

Research assistant professor, Univ. of South Carolina, Columbia, USA (2002~ 2005)

Research fellow, Korea Institute for Advanced Study, Korea (2005~2009)

Adjunct professor, Pohang University of Science and Technology, Korea (2009~ 2012)

JRG leader, Asia Pacific Center for Theoretical Physics (2009~2012)

Senior staff scientist/nuclear physics team leader, Rare Isotope Science Project at IBS, Korea (2012~2022)

Senior research fellow, Center for Exotic Nuclear Studies at IBS, Korea (2023~Present)



김용희

선임연구원

한국과학기술정보연구원

An Efficient, High-Precision Self-Gravity Solver in Rotating Frames

We present a fast and high-precision algorithm for solving the Poisson equation in rotating frames, designed for astrophysical systems in spherical coordinates such as accretion disks. The method features a logarithmic radial grid with open boundary conditions and decomposes the computational domain hierarchically to efficiently manage varying spatial resolutions. Zero-boundary potentials are computed using James's algorithm and combined via matrix-vector operations with precomputed kernel matrices [1]. The open-boundary correction is applied using a discrete Green's function approach. The solver achieves a computational complexity of $O(N^3 \log(N))$, ensuring scalability for high-resolution simulations. Implemented in the FARGO3D MHD code, the solver demonstrates second-order accuracy and robust performance in various test problems. This approach enables precise and efficient modeling of self-gravity in rotating, stratified systems, opening new opportunities for large-scale simulations in computational astrophysics.

· Educational History

서울대학교 물리천문학부 학사 (2007)

서울대학교 물리천문학부 박사 (2015)

· Employment History

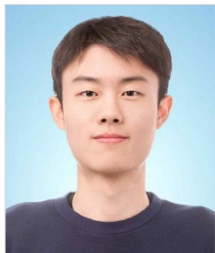
Kavli Institute for Astronomy and Astrophysics, Kavli Fellow (2015~2018)

한국과학기술원 부설 고등과학원, KIAS Fellow (2018~2022)

연세대학교 산학협력단, Project Researcher (2022~2023)

한국과학기술원 부설 고등과학원, Associate Member (2022.09~현재)

한국과학기술정보연구원 (2023~현재)



김남형

대학원생

인하대학교 항공우주공학과

Efficient Implementation of a GMRES Solver for Compressible Flow Simulations Using Python

정상 유동 해석에서는 일반적으로 시간 간격을 크게 가질 수 있는 내재적시간 적분 기법을 사용하며, 이때 선형 시스템 방정식의 해를 구하는 과정이 필요하다. 시스템 행렬은 매우 큰 희소 행렬 형태를 가지므로 GMRES 기법을 통한 효율적인 계산이 가능하다. 하지만 Python은 코드를 한 줄씩 읽는 인터프리터 언어의 특성상 행렬 및 벡터 원소의 반복적 접근 과정에서 성능 저하가 발생하며, 이는 기본적인 선형대수 연산으로 구성된 GMRES 기법을 적용할 때 취약점으로 작용한다. 따라서 본 연구에서는 Python 환경에서 GMRES 기법의 계산 병목구간을 분석하고, 효율적인 계산을 위한 다양한 최적화 기법의 성능 향상 정도를 비교하였다.

· Educational History

전북대학교 항공우주공학과 학사 (2023)

인하대학교 항공우주공학과 석사 (2025)



허정원

대학원생

연세대학교 계산과학공학과

난류유동의Super-Resolution 학습을 위한Local Constraint Neural Operator 모델

In Computation Fluid Dynamics, resolving small-scale turbulence through fine-grid Direct Numerical Simulation (DNS) remains computationally expensive, making coarse-grid models such as Large-Eddy Simulation(LES) and Reynolds-Averages Navier-Stokes(RANS) the practical alternative. However, in highly turbulent regimes, these model approaches exhibit significant large error from DNS results. Recent studies have explored machine learning methods to overcome such limitation. Among them, Fourier Neural Operator (FNO) offers the discretization invariant framework, that can, in theory, extrapolate from coarse grid training data to finer grid test predictions within bounded error. However, in practice, FNO suffers from spectral bias, over fitting large scales while under-predicting small scales and its computational cost grows rapidly with increasing resolution[2]. In this study, we propose a constraint based local operator layer that embeds convolutional kernels within the FNO architecture, enforcing locality and retaining the spectral generalization mapping. Our method enables more accurate reconstruction of unseen high frequency components during super resolution, despite training on coarse grids. We conducted intensive turbulence statistics evaluation including energy spectra on isotropic turbulence. Our study shows that the discretization invariant property of neural operators can be practically applied for turbulence super-resolution, enabling high-resolution reconstructions without additional training.

· Educational History

대구경북과학기술원 (2018~2023)

연세대학교 (2023~현재)



김진호

연구원

한국천문연구원

An Adaptive Mesh Refinement for Relativistic Hydrodynamics Using a Finite Volume Predictor-Corrector Scheme

This study aims to develop a highly accurate numerical scheme for relativistic hydrodynamics (RHD) simulations. We construct a computational framework that combines the conservative finite volume method (FVM) with a predictor-corrector algorithm on top of the adaptive mesh refinement (AMR) technique. The proposed method is designed to capture nonlinear dynamics such as shock waves, steep density gradients, and relativistic flows with high resolution and numerical stability under extreme conditions. This approach enables accurate modeling of high-energy astrophysical phenomena, including accretion disks around black holes, neutron star mergers, and relativistic jets. By implementing an RHD simulation software fully developed in Korea, this work contributes to securing independent core technology and establishing a foundation for large-scale computational astrophysics. The developed framework is expected to be applicable to a wide range of astrophysical simulations and to contribute to producing internationally competitive research outcomes.

· Educational History

서울대학교, 이학사 (천문학) (2005)

서울대학교, 이학박사 (천문학) (2012)

· Employment History

서울대학교, 박사후연구원 (2012~2013)

University of Notre Dame, 박사후연구원 (2013~2017)

한국천문연구원, 리더급우수과학자 (JRL) (2017~2018)

현재 한국천문연구원, 선임연구원 (2018~2022)

한국천문연구원, 책임연구원 (2023~현재)



이영민

교수
KAIST

Spin-Dependent Polaron Pair Charge Recombination and Singlet Exciton Yields of Blue Organic Light-Emitting Diode Materials

Recently, hot excitonic materials have been suggested toward improving the efficiency of fluorescent organic light-emitting diode (OLED) materials. The improvements are achieved by harvesting triplet excitons via high-lying reverse inter-system crossing (hRISC), which requires suppression of internal conversion (IC) within triplet state manifolds. This violates Kasha's rule and, in fact, there is no direct evidence that triplet ICs are really suppressed. Here, we propose spin conversion in polaron pairs (PPs) as an alternative channel that can explain such hRISC. In our model, spin states can be converted to each other via hyperfine coupling, and the singlet exciton yield can be affected by the relative rates of charge recombination of singlet and triplet PPs. We investigate the variations of singlet exciton yields by calculating rate constants for charge recombination, IC, and (hR)ISC processes for hot excitonic molecules together with a kinetic picture through the kinetic master equation.

· Educational History

서울대학교 화학과 (학사) (1995.02)

서울대학교 화학과 (석사) (1997.02)

스탠포드 화학과 (박사) (2005.06)

· Employment History

Postech 화학과 (2008~2017)

KAIST 화학과 (2017~현재)



권도한

3학년 재학 중

안동고등학교

복소수 진법 체계 기반 ALU 설계: 성능 평가 및 응용 방안

1960년 Donald Knuth가 처음 제안한 복소수 진법(An Imaginary Number System, DOI: 10.1145/367177.367233)은 복소수를 기수(Radix)로 사용하는 새로운 수 체계로, 기수로 어떤 복소수를 선택하느냐에 따라 숫자 집합과 표현법이 달라진다. 복소수 진법의 장점은 실수부와 허수부를 분리해 계산하지 않고 하나의 수로써 복소수 연산을 수행할 수 있다는 점이며, 이는 복소수 연산의 처리 속도 향상에 기여할 수 있다. 이후 연구에서는 다양한 기수를 탐구하면서 모든 복소수를 표현할 수 있는 체계를 확립하였고, 표현에 0과 1만을 사용하는 체계를 CBNS(Complex Binary Number System)로 정의하여 이진수와 유사한 표현을 갖게 되면서 컴퓨터 과학적 응용 가능성이 확대되었다. 본 논문은 국내에서 상대적으로 연구가 활발하지 않은 복소수 진법을 대상으로 수학적 이론을 정리하고, 복소수 연산에 특화된 ALU 설계 및 하드웨어 구현 방안을 제시한다. 설계한 ALU의 성능을 기존 방법과 비교·평가하고, 복소수 진법의 특성을 활용한 응용 사례들을 논의한다. 특히 특정 기수를 사용하는 복소수 진법에서 소수부를 복소평면에 나타냈을 때 생성되는 프랙털 구조를 영상 손실 압축 기법에 적용하는 가능성을 탐색한다.

· Educational History

안동고등학교 (2023~재학 중)

· Employment History

‘움직임’ 대표 (2020 - 2023)

- 안동시 공공아이디어 공모전 (2019; 1st)
- 경북콘텐츠코리아랩 콘텐츠 창작살롱 공모전 (2020; 1st)
- 경북콘텐츠코리아랩 콘텐츠 파트너링 데이 -IR 피칭 (2020)

한국과학창의재단 대학부설 과학영재 교육원 사사과정 연구 성과 발표대회 (2021)

경상북도교육청 SW-AI 해커톤 (2024; 1st)

대한민국 고등학생 소프트웨어 개발 공모전 (2024; 4th)

DAY 2

Keynote & Plenary

Friday, September 05, 2025

**KOREA SUPERCOMPUTING
CONFERENCE 2025**

THE NEXT FRONTIER: HPC with AI and Quantum

2025 한국슈퍼컴퓨팅컨퍼런스 기조강연

09:30-10:30	[Keynote Speech 1] 전통적 계산의 경계를 넘어: 양자컴퓨터의 도전과 통찰 Beyond the Classical Limits: Quantum Challenges and Insights 김기환 교수 (칭화대학교)
10:30-11:30	[Keynote Speech 2] GPU 클러스터, 창작의 새 시대를 열다: 멀티모달 AI혁명 Unleashing a New Era of Creation with GPU Clusters: The Multimodal AI Revolution 이연수 대표 (NC AI)
11:30-12:00	KSC 2025 개회식 개회사 이식 원장 (한국과학기술정보연구원, 한국계산과학공학회 회장, KSC2025 조직위원장) 환영사 박호상 금오공과대학 총장 (한국초고성능컴퓨팅포럼 운영위원장, KSC2025 공동 조직위원장) 축사 김영식 이사장 (국가과학기술연구회) 축사 황정아 국회의원 (더불어민주당) 축사 박충권 국회의원 (국민의힘)
12:00~13:30	Luncheon
13:30~18:00	Workshop, Community Forum



김기환

교수
칭화대학교

전통적 계산의 경계를 넘어: 양자컴퓨터의 도전과 통찰 Beyond the Classical Limits: Quantum Challenges and Insights

양자컴퓨터는 중첩과 얽힘과 같은 양자역학적 원리를 활용하여, 고전적 계산한계를 넘어 새로운 가능성을 제시합니다.

본 강연에서는 양자컴퓨터의 기본 개념과 고전적 계산과의 근본적 차이를 설명하고, 현재 양자 하드웨어가 직면한 기술적 제약과 이를 극복하기 위한 스케일업,

오류정정 등의 연구 방향을 살펴봅니다. 특히 최근 과학·공학 분야에서 널리 활용되고 있는 HPC와 양자컴퓨터가 상호 보완적으로 결합하는 하이브리드 계산 시나리오를 소개합니다.

이러한 접근은 HPC의 대규모 병렬 처리 능력과 양자컴퓨터의 특화된 연산 장점을 결합함으로써, 물리·화학 시뮬레이션, 복잡한 최적화 문제, 그리고 새로운 머신러닝 모델 개발 등 다양한 분야에서 고전적 방법만으로는 어려웠던 계산을 가능하게 할 수 있습니다.

이를 통해 청중이 양자컴퓨터가 열어갈 새로운 계산 지평을 이해하고, 자신의 연구 분야와의 접점을 탐색할 수 있는 구체적인 통찰을 제공하고자 합니다.

· Educational History

B. S., Physics, Seoul National University, Seoul, Korea (1992~1996)

M. S., Physics, Seoul National University, Seoul, Korea (supervisor: Prof. Wonho-Jhe)
(1996~1998)

Ph. D., Physics, Seoul National University, Seoul, Korea (supervisor: Prof. Wonho-Jhe)
(1998~2004)

· Employment History

Postdoctoral Researcher, Seoul National University (supervisor: Prof. Wonho-Jhe)
(2004~2005)

Postdoctoral Fellow, Innsbruck University (supervisor: Prof. Rainer Blatt) (2005~2007)

Postdoctoral Fellow, University of Maryland (supervisor: Prof. Chris Monroe) (2008~2011)

Associate Professor, Tsinghua University (2011~2016)

Tenured Associate Professor, Tsinghua University (2016~2022)

Tenured Professor, Department of Physics, Tsinghua University (2022~현재)



이연수

대표이사

NC AI

GPU 클러스터, 창작의 새 시대를 열다: 멀티모달 AI혁명 Unleashing a New Era of Creation with GPU Clusters: The Multimodal AI Revolution

이번 기조연설에서는 치열한 경쟁이 펼쳐지는 콘텐츠 산업 환경 속에서 NC AI가 어떻게 AI 기술을 발전시키고 적용해 왔는지를 살펴봅니다. 수많은 시도와 반복을 거쳐, NC AI는 AI의 잠재력을 실질적인 성과로 전환하고 있습니다. 또한, 이번 기조 연설에서는 예술과 기술이 만나는 콘텐츠 분야에서 생성형 AI 기술이 어떻게 활용·발전되고 있는지를 다루며, 특히 AI가 큰 변화를 이끌고 있는 세 가지 핵심 영역에 대해 소개합니다.

· Educational History

고려대학교 컴퓨터학과 학사 (2000.02)

고려대학교 컴퓨터학과(자연어처리) 석사 (2008.08)

고려대학교 컴퓨터학과(자연어처리) 박사 (2014.08)

· Employment History

삼성SDS(주), SW Engineer (2000.02~2004.03)

엔씨소프트AI Lab 연구원 (2014.08~ 2016.01)

엔씨소프트NLP Lab Language 팀장 (2016.01~ 2017.09)

엔씨소프트NLP Center/Language AI Lab 실장 (2017.09~ 2022.06)

엔씨소프트NLP Center 센터장 (2022.06~ 2024.01)

엔씨소프트NC Research 본부장 (2024.01~ 2025.02)

(주)엔씨문화재단 사외이사 (2024.05~ 현재)

(주)엔씨에이아이 대표이사 (2025.02~ 현재)

DAY 2

Workshop

Friday, September 05, 2025

**KOREA SUPERCOMPUTING
CONFERENCE 2025**

THE NEXT FRONTIER: HPC with AI and Quantum

양자컴퓨팅 활용 및 양자-HPC 하이브리드 컴퓨팅 기술

본 트랙에서는 이온 트랩 방식의 양자 컴퓨터에 대한 소개와 최근 주목 받는 HPC와 하이브리드 컴퓨팅 최신 기술 개발에 대해서 논의하고, 또 학계, 산업계에서의 최신 양자컴퓨팅 활용 사례에 대해서도 소개함으로써 양자컴퓨팅에 대한 이해를 넓히는데 기여하고자 함

- | | |
|-------------|--|
| 13:30~14:00 | JHPC Quantum project towards Utility-scale Quantum-HPC hybrid computing
Mitsuhisa Sato (RIKEN) |
| 14:00~14:30 | Leading the Future of Quantum Technologies at IonQ
Tim Rogers, Sang Hyub Kim (IonQ) |
| 14:30~15:00 | Quantum-centric supercomputing: Pasqal's neutral atom quantum processing units and applications
정희정 (Pasqal) |
| 15:00~15:30 | Coffee Break |
| 15:30~16:00 | 양자컴퓨팅의 오류 문제와 오류정정 기술
이승우 (포항공과대학교) |
| 16:00~16:30 | Challenges and directions with superconducting quantum computing
구자승 (KRISS) |
| 16:30~17:00 | 광 기반 양자시뮬레이션: 광자의 궤도 각운동량 큐디트 상태를 이용한 양자 화학 계산
임향택 (KIST) |



Mitsuhsa Sato

Division Director

RIKEN R-CCS

JHPC Quantum project towards Utility-scale Quantum-HPC hybrid computing

We are conducting JHPC Quantum project to design and build a quantum-supercomputer hybrid computing platform by integrating different kinds of on-premises quantum computers, IBM superconducting quantum computer and Quantinuum trapped-ion quantum computer, with several supercomputers including Fugaku. We are aiming at utility-scale quantum-HPC hybrid computing using our JHPC Quantum platform. The overview and current status of the JHPC Quantum project with a perspective of quantum HPC hybrid computing will be presented.

· Educational History

M.S. degree information science University of Tokyo (1984)

Ph.D. degree information science University of Tokyo (1990)

· Employment History

Team Leader, Architecture Development Team, FLAGSHIP 2020 Project
(2014~2020)

Deputy Director, RIKEN Center for Computational Science (R-CCS) (2018~2022)

Division Director, Quantum HPC Hybrid Computing Platform Division, RIKEN Center for Computational Science (R-CCS) (2023~present)

Professor, Juntendo University (2023~present)

Professor Emeritus, University of Tsukuba (2023~present)



Tim Rogers

Quantum Solutions Engineer

IonQ

Leading the Future of Quantum Technologies at IonQ

IonQ stands at the forefront of the quantum revolution as a definitive leader in both quantum computing and networking. This presentation will illuminate IonQ's comprehensive and ambitious industry roadmap, detailing the advanced technology that underpins our strategy. We will demonstrate how IonQ's quantum computers are transcending theoretical concepts to deliver tangible, real-world value today, showcasing recent use cases such as fine-tuning Large Language Models (LLMs) and enhancing computational fluid dynamics workflows. This session will provide a clear overview of IonQ's vision for the quantum future and the strategic steps we are taking to make it a reality.

· Educational History

B.S. and M.S. in Nuclear Engineering from Texas A&M University

· Employment History

Over a decade in the nuclear power industry and three years working in Quantum Computing at IonQ.



정희정

Head of Quantum Computing
Pasqal

Quantum-centric supercomputing: Pasqal's neutral atom quantum processing units and applications

Recent advances in quantum-centric supercomputing have spotlighted Pasqal's neutral atom quantum processors, which are paving the way for scalable quantum computing integrated with classical high performance computing (HPC) infrastructures. This talk presents an overview of the Pasqal's neutral atom QPU, focusing on its unique architecture and control mechanisms. This talk highlights recently deployed Pasqal QPU at major HPC centers in France and Germany, discussing the integration strategies employed. I will discuss use cases where Pasqal's quantum processors have successfully addressed business-relevant problems, including optimization, simulation, and machine learning tasks, as well as its current and potential impact on industry challenges and the future landscape of quantum-enabled supercomputing.

· Educational History

BS in Physics, Soongsil University, Seoul, Korea (1997)

MS in Physics, Seoul National University, Seoul, Korea (1999)

Ph.D. in Physics, Duke University, NC, USA (2006)

· Employment History

Post-Doctoral Research Associate, Thayer School of Engineering, Dartmouth
(2006~2008)

Senior Engineer, VD Division, Samsung Electronics (2008~2010)

Research Staff Member, SAIT, Samsung Electronics (2010~2016)

Research Assistant Prof/IAS Junior Fellow, Dept. of Physics/IAS, HKUST (2016~2018)

Research Assistant Prof., Dept. of Physics, KAIST (2018~2019)

Associate Prof., Dept. of Physics, Faculty of Science, University of Malaya, Malaysia
(2019~2022)

Vice Director/Research Professor, Q Center, SKKU (2022~2023)

Head of R&D, QuNova Computing Inc. (2023~2024)

Head of Quantum Computing, Pasqal Korea (2024~present)



이승우

교수

포항공과대학교 물리학과

양자컴퓨팅의 오류 문제와 오류정정 기술

Quantum information science has advanced dramatically over the past decade, but significant challenges remain in achieving practical real-world quantum applications. Among these, the exponentially growing errors that arise as quantum computing systems scale have emerged as one of the most critical and urgent issues. Without addressing this error problem, no useful quantum algorithms can be executed, and practical applications of quantum computing as well as related other technology will remain unattainable. This talk introduces Quantum Error Correction (QEC), a key technology aimed at fundamentally resolving the error problem in quantum computing. It will cover the current status and trends in QEC research, including recent theoretical and experimental breakthroughs and the global race to develop fault-tolerant quantum computing systems.

· Educational History

M.S and B.S in Physics, KAIST

DPhil in Physics (Quantum Information), Univ. of Oxford (2010)

· Employment History

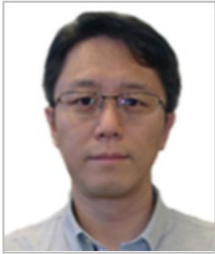
Postdoc (TJ Park fellow), Seoul National Univ. (2010~2012)

Research Associate, Dartmouth College (2013)

BK Assistant Professor, Seoul National Univ. (2014)

QUC Research Professor, Korea Institute for Advanced Study (KIAS) (2015~2020)

Senior and Principal Researcher, Korea Institute of Science and Technology (KIST)
(2020~2025)



구자승

선임연구원

한국표준과학연구원

Challenges and directions with superconducting quantum computing

Quantum computing hold promise for solving problems that are extremely hard to tackle with conventional classical computers. Superconducting qubits have been one of the most promising platforms for practical quantum computing. Over the last few decades, tremendous advances have been made in this research field and the realization of fault-tolerant universal computer is becoming a reality. Led by big tech companies, the world is racing to build a useful quantum computer which could outperform classical computers in practical applications. In this talk, I'll give a brief introduction to superconducting quantum computing, and cover the current challenges and directions in terms of quantum hardwares.

· Educational History

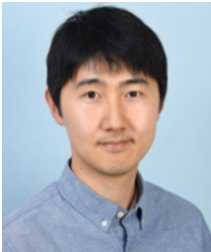
포항공과대학교 물리학 B.S. (2000)

University of Illinois at Urbana-Champaign Ph.D. (2016)

박사후 연구원 (Post-doc) Syracuse University (2016~2022)

· Employment History

표준과학연구원 양자기술연구소/양자소자그룹 선임연구원 (2022~현재)



임향택

책임연구원

한국과학기술연구원

광 기반 양자시뮬레이션: 광자의 궤도 각운동량 큐디트 상태를 이용한 양자 화학 계산

전자 구조 문제는 양자화학과 재료과학에서 잘 알려진 난제이다. 변분 양자 고유값 해결기(VQE)는 분자계의 최저 에너지 상태를 찾는 유망한 고전-양자 하이브리드 알고리즘이지만, 복잡한 전자파동함수를 정확히 표현하려면 많은 수의 큐비트와 깊은 양자 회로가 필요하다. 본 발표에서는 단일 큐디트를 활용한 VQE를 통해 전자 구조 문제를 해결하는 새로운 방법을 소개한다. 제안 방식은 신호성 단일 광자의 고차원 궤도 각운동량 상태를 이용하여 기존 다중 큐비트 기반 VQE 대비 필요한 양자 자원을 크게 절감한다. 실험적으로, 제안한 단일 큐디트 기반 VQE를 사용해 각각 2큐비트 및 4큐비트 문제에 해당하는 수소(H_2)와 리튬 하이드라이드(LiH) 분자계의 바닥 상태 에너지를 효율적으로 추정함을 입증하였다. H_2 의 경우 평균 오차가 약 0.00146 Hartree로, 화학 정확도 기준인 0.0016 Hartree를 만족하였다. 본 연구 결과는 현존하는 기술 제약 하에서도 복잡한 분자계 전자 구조 문제를 해결할 수 있는 대규모 양자 시뮬레이션의 가능성을 제시한다.

· Educational History

POSTECH 물리학과 학사 (2004.3~2008.2)

POSTECH 물리학과 박사 (2008.3~2015.2)

· Employment History

POSTECH 물리학과 박사후연구원 (2015.2.~2015.3)

스위스 ETH Zurich 물리학과 박사후연구원 (2015.4.~2018.12)

KIST 양자정보연구단 선임연구원 (2019.2.~2023.2)

UST 양자정보학과 부교수 (2021.3~현재)

KIST 양자기술연구단 책임연구원 (2023.3~현재)

차세대 장치 기반 HPC/클라우드 기술

이 세션에서는 최신의 DPU, 확장 메모리 (CXL) 등 다양한 하드웨어 혁신이 HPC 환경에서 어떻게 성능 최적화로 이어지는지를 집중 조명합니다. 또한, 클라우드 환경에서의 HPC 응용, 자원 할당 기술, 원격 관리 등 차세대 인프라를 위한 소프트웨어 기술까지 폭넓게 다룹니다.

13:30~14:00	Peer to Peer 기반 서버관리 기술 이완연 (동덕여자대학교)
14:00~14:30	HPC 응용 시뮬레이션 코드 분석을 통한 시스템 성능 최적화 방안 이현조 (한국농수산대학교)
14:30~15:00	차세대 분산 스토리지를 위한 DPU 활용: Ceph 메시저 오프로딩과 성능 최적화 김영재 (서강대학교)
15:00~15:30	Offloading MPI onto DPU 진현욱 (건국대학교)
15:30~16:00	Coffee Break
16:00~16:30	메모리 확장 시스템 개발을 위한 프로토타입 시스템 연구 이재환 교수 (한국항공대학교)
16:30~17:00	CXL 메모리 관련 기술 동향 및 활용 사례 김진영 (XCENA)
17:00~17:30	클라우드 기반 HPC 센터 자원 예측 기술 허의남 (경희대학교)



이완연

교수

동덕여자대학교 자연정보과학대학

Peer to Peer 기반 서버관리 기술

기존의 P2P 통신 기반의 OS 배포 기술은 클러스터 컴퓨터의 하드웨어 특성과 배포 대상 OS 이미지의 특성을 고려하지 않은 방법이다. 본 연구에서는 적용 대상 슈퍼컴퓨터의 클러스터 서버들의 네트워크 구성 토폴로지, TOR(Top of Rack)의 위치, 스위치 장비의 통신 대역폭 및 메모리 제약사항 등의 하드웨어 특성을 고려한 최적의 P2P 통신 기반 OS 배포 기법을 설계한다.

또한 배포될 OS 이미지의 파일 특성을 고려한 분할 기법, 파이프라인 relay 기법, 프록시 기법 등을 활용하는 최적의 P2P 통신 기반의 OS 배포 기법을 설계한다. 설계된 P2P 통신 기반의 OS 배포 기법을 수치적 분석을 통해서 성능 평가를 수행하고, 기존의 P2P 통신 기반 OS 배포 기법과의 성능 차이를 비교한다.

그리고 클러스터 슈퍼컴퓨터의 하드웨어 특성과 OS 이미지 특성이 OS 배포 시간에 미치는 영향을 분석하여, 차세대 슈퍼컴퓨터의 하드웨어 구성 및 OS 이미지 설계의 발전 방향을 제시한다.

· Educational History

포항공과대학교 (학사)

포항공과대학교 (석사)

포항공과대학교 (박사)

· Employment History

LG전자 선임연구원 (2000.09~2003.02)

한림대학교 컴퓨터공학과 조교수 (2003.03~2011.2)

동덕여자대학교 컴퓨터학과 교수 (2011.3~현재)



이현조

책임연구원

한국농수산대학교

HPC 응용 시뮬레이션 코드 분석을 통한 시스템 성능 최적화 방안

고성능 컴퓨팅(HPC) 응용 어플리케이션의 성능 최적화는 실행 시간 단축과 비용 절감, 전체 시스템 효율성 향상에 필수적이다. 최근에는 기후 변화, 핵융합, 신소재 및 신약 개발 등 다양한 과학적 분야에서 HPC 기반 연구가 활발히 진행되고 있으며, 이러한 HPC 응용은 과학적 발견과 기술 혁신을 가속화하는 핵심 수단으로 자리 잡고 있다.

그러나 계산 복잡도와 대용량 데이터 처리 요구로 인해, 알고리즘 효율화, 코드 최적화, 하드웨어 자원 활용 등 다양한 성능 개선이 요구된다. 특히 실행 과정에서 발생하는 병목 현상, 연산 지연, 에너지 소모 증가는 HPC 시스템의 성능 저하를 발생시키는 주요 요인이며, 이를 해결하기 위한 방안이 필수적이다.

본 발표에서는 우주 시뮬레이션용 HPC 어플리케이션인 RAMSES_HR5를 대상으로, 코드 분석 및 프로파일링을 통한 hotspot 탐지 방법과 그 결과를 설명한다. 핫스팟 영역에 대해 코드 재구성, 알고리즘 교체, 데이터 구조개선 등을 적용하여 성능 향상 방안을 제시할 것이다.

· Educational History

전북대학교 컴퓨터공학과 학사 (2008)

전북대학교 컴퓨터공학과 석사 (2010)

전북대학교 컴퓨터공학과 박사 (2014)

· Employment History

한국과학기술정보연구원 (2015~2016)

한국농수산대학교 (2017~현재)



김영재

교수

서강대학교 컴퓨터공학과

차세대 분산 스토리지를 위한 DPU 활용: Ceph 메신저 오프로딩과 성능 최적화

데이터 중심의 분석, 학습, 초고속 네트워크 기반의 HPC 환경이 보편화됨에 따라, 고성능 컴퓨팅 환경에서 대규모 데이터를 안정적이고 신속하게 저장, 처리할 수 있는 분산 스토리지 시스템의 중요성이 크게 증가하고 있다. 그 중 대표적인 스토리지 시스템인 Ceph는 객체 기반의 고확장성 스토리지로 널리 활용되며, 다양한 워크로드를 유연하게 지원한다.

그러나 읽기/쓰기를 포함한 데이터 복제, 리밸런싱 등을 수행하는 Ceph 내부의 Messenger계층은 클러스터 내 모든 메시지 통신을 담당하면서 CPU 사용률이 급증하는 주요 병목 지점으로 작용하고 있다. 이러한 문제를 해결하기 위한 대안으로 주목받는 기술이 바로 DPU(Data Processing Unit)로, 네트워크 상에서 직접 연산을 처리할 수 있는 스마트 NIC 아키텍처이다.

본 강연에서는 이러한 DPU를 활용하여 Ceph의 네트워크 경로를 재설계하고, 오프로드 구조로 확장한 연구 내용을 논한다. BlueField DPU 상에서 메시지 송수신과 TCP 처리를 직접 수행할 뿐만 아니라, DMA와 channel 통신을 활용한 nearly zero-copy 메시지 전송을 통해 통신 오버헤드를 최소화한다.

이와 함께, Ring buffer 기반 통신 경로, pinned memory, 조건부 batching 등 다양한 최적화 기법을 적용하여 데이터 흐름 상에서의 DPU 처리 효율의 극대화하는 방안을 논의한다.

· Educational History

B.S.: Computer Science and Engineering, Sogang University

M.S.: Computer Science, Korea Advanced Institute of Science and Technology (KAIST)

Ph.D.: Computer Science and Engineering, Pennsylvania State University, USA

· Employment History

Research Staff Member, US Department of Energy's Oak Ridge National Laboratory



진현욱

교수
건국대학교

Offloading MPI onto DPU

CPU에서 수행되던 작업을 오프로딩할 수 있는 프로그램 가능한 SoC와 고속 네트워크 연결을 통합한 DPU (Data Processing Unit)이 최근 등장하였다. 대표적인 예로서 NVIDIA의 BlueField DPU는 Arm 코어 기반의 SoC를 장착하고 있어서 CPU의 연산을 오프로딩할 수 있고, 200~400 Gbps의 고대역 통신을 지원하여 슈퍼컴퓨터와 데이터센터 등에서 통신 및 스토리지 시스템의 성능을 향상시킬 수 있다.

본 발표에서는 DPU에 Message Passing Interface (MPI)를 오프로딩하기 위한 기술을 논의한다. MPI는 슈퍼컴퓨팅 시스템을 위한 메시지 기반의 가장 널리 사용되는 대표적 병렬 프로그래밍 모델이며, 최근 MPI를 DPU에 오프로딩하기 위한 노력들이 진행되고 있다. 이 중에서 기존 MPI 구현에 대한 의존성을 낮추기 위한 기술을 집중적으로 논의한다.

· Educational History

고려대학교 전산학 학사 (1997)
고려대학교 컴퓨터학 석사 (1999)
고려대학교 통신시스템공학 박사 (2003)

· Employment History

오하이오 주립 대학교 박사후 연구원 (2003~2006)
건국대학교 조교수/부교수/교수 (2006~현재)



이재환

교수

한국항공대학교 컴퓨터공학과

메모리 확장 시스템 개발을 위한 프로토타입 시스템 연구

본 발표에서는 차세대 메모리 인터페이스인 CXL(Compute Express Link) 기반 메모리 확장 시스템의 프로토타입을 확보하고, 이를 활용한 시스템 소프트웨어 최적화 방안을 연구 성과를 소개한다. 오픈소스 에뮬레이터(QEMU)를 활용한 CXL 메모리 확장 시스템 시뮬레이션 환경 구축 및 테스트베드에서의 메모리 대역폭, 지연 시간, 확장성 등 성능 분석 결과를 제시하고 그 의미에 대해 논의한다.

데이터 이동 시 발생하는 병목 현상 확인 및 개선 방안 및 CXL 메모리와 호스트 메모리 간 데이터 복사 최적화를 위한 방안 등을 제안하고자 한다.

· Educational History

서울대학교 전기공학부 학사/석사 (1998/2000)

University of Maryland, Computer Science Ph.D. (2012)

· Employment History

케이티 연구개발본부 (2000~2005)

NEC Labs in America (2007)

Bell Labs, Alcatel-lucent (2011)

Samsung Semiconductor Inc., Memory Solutions Lab (2012~2014)

한국항공대학교 컴퓨터공학과 조교수/부교수/교수 (2014~현재)



김진영

대표이사

XCENA (엑시나 주식회사)

CXL 메모리 관련 기술 동향 및 활용 사례

CXL(Compute Express Link)은 고성능 컴퓨팅(HPC)과 인공지능(AI) 워크로드의 데이터 병목 현상을 해결하기 위한 핵심 인터커넥트 기술로 빠르게 부상하고 있습니다. 본 발표에서는 CXL 기술의 발전 동향과 메모리 확장 구조의 변화, 그리고 다가오는 CXL 3.x의 주요 특징을 중심으로 최근 업계의 흐름을 조망합니다.

특히, 메모리 패브릭 아키텍처에서의 CXL Type-3 Memory Device의 역할과, AI 및 HPC 환경에서 대규모 데이터셋을 효율적으로 처리하기 위한 Computational Memory의 개념과 응용 가능성에 대해 중점적으로 다룹니다. 이는 단순한 용량 확장을 넘어, 메모리 내 데이터 처리(near-memory processing)와 연산 가속 측면에서 CXL의 잠재력을 보여주는 중요한 사례가 될 것입니다.

마지막으로, XCENA가 개발 중인 CXL 기반 메모리 제품을 간략히 소개하며, 시장에서의 실질적 구현 가능 사례와 함께 산업 전반에 미치는 영향에 대해 공유할 예정입니다.

· Educational History

서울대학교 컴퓨터 공학부 (학사)

· Employment History

삼성전자 메모리 사업부 Enterprise SSD SW 책임

삼성전자 SSIC (Samsung Strategy & Innovation Center) 매니저

SK 텔레콤 종합 기술원 Software-Defined Storage Lab 장

SK 하이닉스 차세대 솔루션 아키텍처 담당 임원

현) XCENA 대표이사



허의남

교수

경희대학교 소프트웨어융합대학

클라우드 기반 HPC 센터 자원 예측 기술

최근 GPU, NPU, TPU 등 다양한 AI 가속장치의 발전으로 에너지 효율적인 AI 학습 및 추론이 가능해지고 있다. 그러나 이러한 이기종 AI 가속장치는 각기 다른 특성(런타임, 라이브러리 등)을 가지며, 지원하는 오퍼레이터 유형도 다르다. 따라서 AI 가속장치를 효과적으로 운영하기 위해서는 워크로드 분석, 오퍼레이터 유형에 따른 자원 매핑, 동적 자원 할당 기술이 필수적이다.

이기종 AI 가속장치를 갖춘 고성능 클라우드 환경에서 AI 서비스를 효율적으로 운영하려면 최적의 자원 스케줄링과 프로비저닝 기술이 필요하며, 특히 다양한 AI 가속장치가 공존하는 환경에서는 전력 소모와 자원 활용을 최적화해 운영 비용을 줄이는 것이 중요하다.

본 강연에서는 이러한 과제를 해결하기 위해 트레이스 데이터에 기반하여 전력 소비와 자원 활용도를 AI 모델로 예측하고, AI 모델 분석을 통해 연산 유형별로 가장 적합한 AI 가속장치를 매핑하며, 워크로드를 효과적으로 스케줄링하는 연구 내용을 소개한다.

· Educational History

Busan National University (학사)

University of Texas at Arlington (석사)

The Ohio University (박사)

· Employment History

서울여자대학교 컴퓨터공학과 조교수 (2003~2005)

경희대학교 컴퓨터공학부 교수 (2005~현재)

경희대학교 부설 인공지능연구소 소장 (2019~현재)

과학기술정보통신부 지정 클라우드 컨티뉴엄(ITRC) 연구센터장 (2023~현재)

4단계 BK21 지능웨어 융합 교육연구단장 (2025~현재)

초고성능컴퓨팅과 AI 기반 제약·바이오 분야 연구개발 혁신

Deep Dive into AI & CADD for In Silico Drug Discovery – 국내 신약개발 현장에서의 실질적 기여와 기술 확산 전략
AI 및 CADD 기술은 신약개발의 패러다임을 전환시키는 핵심 동력으로 자리잡고 있습니다. 본 세션은 이들 기술이 국내 제약·바이오 산업 현장에서 실제로 어떻게 활용되고 있으며, 어떠한 성과와 한계를 드러내고 있는지를 심도 있게 조망합니다.

- | | |
|-------------|---|
| 13:30~14:10 | 실제 신약개발에서의 AI 기반 생물정보학 및 HPC 전략
변병진 책임 (C&C신약연구소) |
| 14:10~14:50 | 고정밀 계산 기반 가상탐색을 통한 신경세포보호 저분자 발굴과 최적화
이주연 책임 (한국화학연구원) |
| 14:50~15:30 | Practical Applications and Technical Challenges of the Free Energy Perturbation (FEP) Method for Hit-to-Lead Optimization in Medicinal Chemistry
이윤지 교수 (중앙대학교) |
| 15:30~16:00 | Coffee Break |
| 16:00~16:30 | 슈퍼컴퓨팅, AI, 양자컴퓨팅과 신약개발 플랫폼
염민선 연구소장 (나무ICT) |
| 16:30~17:00 | Molista AI 플랫폼을 활용한 건선 치료용 선택적 TYK2 알로스테릭 저해제 발굴
박해진 연구소장 (메이조스바이오) |
| 17:00~17:30 | In silico 기반 신약 개발의 발전과 미래 과제
오경석 연구위원 (대웅제약) |
| 17:30~18:00 | 인공지능·슈퍼컴퓨팅·로보틱스 융합 플랫폼을 통한 신약개발의 미래
황재성 이사장 (XtalPi) |



변병진

책임매니저/데이터사이언스 팀장

C&C신약연구소

실제 신약개발에서의 AI 기반 생물정보학 및 HPC 전략

정보학과 AI 기술은 더 이상 미래의 기술이 아닙니다. 지금 이 순간, 국내 신약개발의 패러다임을 근본적으로 전환시키는 핵심 엔진으로 자리잡고 있습니다.

이번 발표에서는 JW중외제약이 신약개발에 어떻게 WGS, WES, RNA-Seq. 와 같은 차세대 염기서열 분석 데이터를 활용하여 바이오마커를 도출하고, 작용기전(MoA)을 분석하며, 약물 반응성을 평가하고 있는지 실제 사례를 중심으로 소개드립니다.

환자와 동물 유래 샘플, 오가노이드, 세포주 데이터를 통합 분석하며, 클라우드 HPC 인프라를 통해 다중 소스의 데이터를 효율적으로 처리하고 있습니다.

· Educational History

충북대학교 화학과 학사 (2004)

충북대학교 물리화학 석사 (2006)

충북대학교 물리화학 박사 (2013)

· Employment History

한국화학연구원 박사후 연구원 (2013~2015)

University of Notre Dame 박사후 연구원 (2015~2017)

JW중외제약 (2017~2025.5)

C&C신약연구소 (2025.5~현재)



이주연

책임연구원
한국화학연구원

고정밀 계산 기반 가상탐색을 통한 신경세포보호 저분자 발굴과 최적화

본 연구는 고성능 컴퓨팅 (High Performance Computing, HPC) 인프라를 기반으로, 분자동역학 (Molecular Dynamics) 시뮬레이션과 MM/GBSA (Molecular Mechanics/Generalized Born Surface Area) 결합 에너지 예측을 통합한 정밀 가상탐색 전략을 통해 신경보호 저분자 약물의 발굴 및 최적화에 성공한 사례를 제시한다. 표적은 신경영향성 인자 (NF- α 1)인 carboxypeptidase E (CPE)가 β -arrestin/ERK 신호를 유도할 때 작용하는 세로토닌 수용체 5-HT_{1E}이다.

HPC 자원을 활용하여 대규모 MD 시뮬레이션을 수행함으로써 CPE-HT_{1E} 간의 동적 상호작용을 정밀 분석하고, 핵심 약물유사 잔기를 규명하였다. 이를 바탕으로 약 600만 개의 화합물에 대해 머신러닝 기반 1차 가상 스크리닝을 수행하고 상위 후보에 대해 MD 및 MM/GBSA 기반 결합 에너지 예측을 적용하여 고정밀 우선순위를 진행하였다. 최종 선정된 히트 화합물은 5-HT_{1E}에 결합함을 실험적으로 확인하였으며 신경세포 보호 효과도 입증되었다.

후속 연구에서는 in-silico 기반 R-group 최적화를 통해 설계한 4종의 유도체 중 2종이 나노몰(nM) 수준의 결합력(K_d = 1.38 및 2.1 nM, CPE 대비 26.5 nM)과 함께 인간 신경세포 모델에서 강력한 신경보호 활성을 나타냈다. 본 연구는 HPC 활용 고정밀 계산이 가상탐색의 정확도와 실용성을 크게 향상시키 구조 기반 약물 설계에 효과적으로 적용될 수 있음을 보여준다.

· Educational History

가톨릭대학교 화학과 학사 (2000)
가톨릭대학교 화학과 물리화학 석사 (2002)
서울대학교 약학대학 약품화학 박사 (2019)

· Employment History

분자설계연구소 신약개발팀 연구원 (2002~2005)
LG화학(구LG생명과학) 신약설계팀 과장 (2005~2013)
California Institute of Technology (Prof. William A. Goddard III-Visiting Scholar)
(2022~2023)
한국화학연구원 감염병치료제연구센터 책임연구원 (2013~현재)
과학기술연합대학원대학교 의약화학 부교수 (2024~현재)



이윤지

부교수

중앙대학교 약학대학

Practical Applications and Technical Challenges of the Free Energy Perturbation (FEP) Method for Hit-to-Lead Optimization in Medicinal Chemistry

신약개발 과정에서 약물의 결합 친화도를 정확하게 예측하는 것은 hit-to-lead 및 lead optimization 단계의 핵심적 과제이다. 분자동킹이 루틴한 방법으로 많이 사용되고 있지만, score 기반의 예측 정확도 한계가 명확한 편이다. 이를 극복하기 위해 자유에너지 기반의 Free Energy Perturbation (FEP)와 같은 물리 기반 방법이 국내외 제약 현장에서도 적극적으로 활용되고 있다.

본 발표에서는 FEP의 기본 개념과 구조를 설명하고, 실제 연구 사례를 기반으로 다양한 소프트웨어 플랫폼의 방법론적 특성 및 workflow를 비교 분석하여, 각 접근법의 실무적 장단점과 활용 방안을 제시한다.

특히 의약화학 현장에서 경험한 실험 데이터와의 상관성 문제, input conformation 및 pair 설정, 파라미터 최적화 등 실무에서 마주한 현실적인 기술적 도전과제와 이를 극복하기 위한 실질적인 전략 및 접근법을 논의하고자 한다.

· Educational History

이화여자대학교 약학대학, 약학사 (2007)

이화여자대학교 일반대학원 생명·약학부, 약학석사 (2009)

이화여자대학교 일반대학원 생명·약학부, 약학박사 (2013)

· Employment History

이화여자대학교 약학대학 박사후연구원 (2013~2015)

이화여자대학교 약학대학 연구교수/Research Fellow (2015~2018)

University of Texas Southwestern Medical Center (TX, USA) Assistant Instructor/Instructor (2017~2020)

중앙대학교 약학대학 조교수/부교수 (2020~현재)



염민선

연구소장
나무아이씨티

슈퍼컴퓨팅, AI, 양자컴퓨팅과 신약개발 플랫폼

전통적인 신약 개발은 시간과 비용이 많이 소모되는 과정으로, 높은 실패율을 보인다. 그러나 최첨단 컴퓨팅 기술의 발전은 이러한 한계를 극복할 수 있는 전례 없는 기회를 제공하고 있다. 슈퍼컴퓨팅은 대규모 분자 시뮬레이션 및 데이터 분석을 가속화하여 약물 후보 물질의 스크리닝 및 최적화를 가능하게 하고, AI는 복잡한 생물학적 데이터를 학습하여 질병 메커니즘을 예측하고, 새로운 약물 타겟을 발굴하며, 약물의 독성 및 유효성을 예측하는 데 기여한다.

양자컴퓨팅은 아직 초기 단계에 있지만, 분자 상호작용 및 화학 반응을 모델링하는 데 있어 기존 컴퓨팅의 한계를 뛰어넘는 잠재력을 가지고 있어, 미래 신약 개발의 패러다임을 바꿀 것으로 기대된다.

본 발표는 각 기술의 핵심 원리와 신약 개발에서의 현재 응용 사례를 소개하고, 미래 전망과 함께 이 기술들이 융합될 때 가져올 시너지 효과에 대해 논의하고자 한다.

· Educational History

서강대학교 화학공학 학사 (1996)

서강대학교 화학공학 석사 (1998)

서울대학교 화학공학 박사 (2001)

· Employment History

노스웨스턴대학교 박사후 연구원 (2003~2006)

한국과학기술정보연구원 선임/책임연구원 (2003~2022)

나무아이씨티 (2024~현재)

서울대학교병원 초빙교수 (2024~현재)



박혜진

연구소장
에이조스바이오

Molista AI 플랫폼을 활용한 건선 치료용 선택적 TYK2 알로스테릭 저해제 발굴

최근 인공지능(AI)의 발전은 약물 발굴 과정에서 선별 효율성과 화합물 선택 정확성을 크게 향상시키고 있다. 본 연구는 AI 기반 약물 발굴 플랫폼인 Molista를 이용하여 자가면역질환, 특히 건선을 타겟으로 하는 선택적 TYK2 알로스테릭 저해제를 발굴한 사례를 보고한다. 건선은 전 세계 인구의 약 2~3%에 영향을 미치며, 기존 치료법의 한계로 인해 새로운 치료법에 대한 요구가 매우 높다.

본 연구에서는 Molista 플랫폼을 활용하여 약 200만 개의 화합물 라이브러리에서 TYK2 활성 가능성이 높은 후보물질을 신속히 선별하였다. Scaffold 유사성을 기준으로 화합물들을 그룹화하여 공통 scaffold를 도출하였고, 추가적인 구조-활성 상관성(SAR) 분석을 통해 강력하고 선택적인 Hit 물질을 확보하였다. 또한, 구조 기반의 인실리코 연구를 수행하여 발굴된 후보물질의 결합 방식을 분석하고 기존 약물인 듀크라바시티닙 과의 구조적 차별성을 규명하였다.

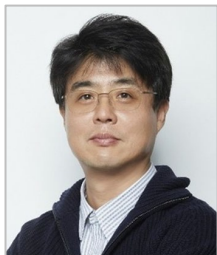
최종 선정된 후보물질은 우수한 선택성과 약리학적 특성을 보였으며, 철저한 in vitro 및 in vivo 평가를 통해 건선 치료제로서의 효능과 안전성을 입증하였다. 본 연구는 Molista AI 플랫폼이 약물 발굴 초기 단계의 효율성을 극대화할 수 있음을 입증하며, 향후 AI 기술이 제약 개발 과정에 더욱 널리 적용될 수 있는 가능성을 제시한다.

· Educational History

경북대학교 자연과학대학 학사, 유전공학 (1995~2001)
성균관대학교 의과대학 석사, 분자세포생물학 (2003~2005)
성균관대학교 의과대학 박사, 분자세포생물학 (2007~2013)

· Employment History

분자설계연구소 생물화학정보팀장 (2011~2014)
서울대학교 보건대학원 박사후 연구원 (2015~2016)
신테카바이오 인공지능 의학센터 팀장 (2016~2018)
에이조스바이오 AI 연구소 연구소장 (2018~2025)



오경석

연구위원

대웅제약

In silico 기반 신약 개발의 발전과 미래 과제

신약 개발 분야에서 in silico 방법론은 화합물의 특성 예측, 단백질 구조 예측, 새로운 분자 및 단백질 설계, 그리고 단백질-리간드 결합 구조 분석 등에 필수적인 역할을 수행하고 있습니다. 특히 슈퍼컴퓨팅 인프라를 활용한 고성능 계산은 이러한 in silico 접근법의 핵심 동력입니다.

분자 도킹, 분자 동역학(MD), 자유 에너지 섭동(FEP)과 같은 물리학 기반 시뮬레이션은 분자 상호작용에 대한 깊이 있는 이해를 제공하며, 이는 신약 후보 물질의 최적화에 기여합니다. 동시에, 생성 모델 및 머신러닝을 포함한 AI 기반 기술은 방대한 화학 공간을 탐색하고, de novo 설계 및 약물 재창출을 가속화하여 신약 개발의 패러다임을 변화시키고 있습니다.

본 발표에서는 물리학 기반 및 AI 기반 방법론의 성공적인 통합 사례들을 소개하고, 실제 신약 개발 과정에서의 적용 노하우를 공유하고자 합니다. 또한, 데이터 품질 관리, 물리학 및 AI 기반 모델의 설계, 예측 결과의 해석 및 정확도 향상, 높은 위양성률 감소, 그리고 합성 가능성 확보와 같은 여전히 남아있는 미래 과제들을 심층적으로 다룰 것입니다.

· Educational History

- 포항공과대학교 화학과 학사 (1996)
- 포항공과대학교 화학과 이학석사 (1998)
- 포항공과대학교 화학과 이학박사 (2000)

· Employment History

- SK주식회사 수석연구원 (2000~2011)
- SK바이오팜 수석연구원 (2011~2021)
- 일진에스앤티 연구소장 (2021~2022)
- 대웅제약 연구위원 (2022~현재)



황재성

사업개발 이사장

XtalPi

인공지능·슈퍼컴퓨팅·로보틱스 융합 플랫폼을 통한 신약개발의 미래

XtalPi는 AI 및 양자 물리 기반의 신약 개발 혁신 플랫폼 기업으로 AI, 슈퍼컴퓨팅, 자동화 실험실 기술 융합을 통해 신약 연구·개발의 속도, 규모, 혁신성을 대폭 향상하는 것을 목표로 하고 있습니다.

양자역학 기반 시뮬레이션과 대규모 클라우드 슈퍼컴퓨팅 자원을 활용해 분자 디자인, 예측, 최적화 등 신약개발 전 과정의 자동화/고도화를 추진하며, Wet Lab(로봇 자동화 실험)과 Dry Lab(슈퍼컴퓨팅 기반 시뮬레이션)이 데이터와 피드백을 실시간으로 주고받는 통합 혁신 R&D 파이프라인을 구축하고 있습니다.

실제 파이프라인에는 AI 기반 약물 설계, 분자 속성 예측, 화합물 스크리닝 및 최적화, 임상 전략까지 포함되며, 이를 통해 AI·슈퍼컴퓨팅·로봇자동화를 결합한 혁신적 신약 개발 사례와 바이오-IT 융합이 가져올 미래 신약개발의 변화를 확인하실 수 있습니다.

· Educational History

송실대학교 화학과 학사 (2001)

송실대학교 대학원 화학과 (물리화학) 석사 (2003)

연세대학교 대학원 생물소재공학 박사수료 (2016~현재)

· Employment History

중외제약(현JW중외) 신약연구실 선임연구원 (2003~2010)

동아제약(현 동아에스티) 기반기술연구실 수석연구원 (2010~2020)

닛타겟 신약개발 연구소 연구소장 (2020~2023)

한국제약바이오협회 A신약융합연구원 융합연구팀장 (2023~2025)

크리스탈파이(XtalPi) 아태 사업개발 이사장 (2025~현재)

초저전력 반도체 슈퍼컴퓨팅 실시간 모사 기술

본 워크숍은 슈퍼컴퓨팅을 기반으로 한 고집적 초저전력 반도체 개발에 관한 연구를 중점적으로 다룬다. 원자스케일의 미시구조와 소자 수준에서의 모사에 관한 최신 연구 동향을 소개하고 중요한 성과들을 공유한다. 또한, 해당 기술의 향후 발전 가능성에 대해 참석자들과 함께 토론하며 연구 방향을 모색한다.

13:30~14:00	Efficient Density Functional Theory Calculations on GPUs via Mixed Precision Approach 우재현 박사 (KISTI)
14:00~14:30	Real-time first-principles dynamics of real materials: charge current and spin current in the study of topological & geometrical natures of band states 박노정 교수 (UNIST)
14:30~15:00	Hafnia-Based Ferroelectric Memory Targeting 100 TB Density and Sub-Picosecond Switching 이준희 교수 (UNIST)
15:00~15:30	Modulating Nuclear Motions with Exciton Polariton Based on Correlated Electron-Nuclear Dynamics 민승규 교수 (UNIST)
15:30~16:00	Coffee Break
16:00~16:30	Development of Machine Learning Potential for HfO₂ 이동화 교수 (POSTECH)
16:30~17:00	Device simulation of resistance-based memories by coupling electrothermal and phase-field models 권용우 교수 (홍익대학교)
17:00~17:30	The Quest for Universal, Bayesian, and Equivariant Ab initio Machine Learning Potential: Bayesian Atoms Modeling (BAM) package 명창우 교수 (성균관대학교)
17:30~18:00	층간 결합을 통한 이중층 α-As에서 새로운 강유전체 상의 출현 이근식 교수 (UNIST)
18:00~	자유 토론 및 저녁식사



이근식

부교수

UNIST, 화학과

층간 결합을 통한 이중층 α -As에서 새로운 강유전체 상의 출현

2차원(2D) 강유전체(FE) 재료는 자발적이고 가역적인 분극을 통해 저전력, 고속 전자 응용 분야에서의 잠재력으로 인해 상당한 관심을 받아 왔습니다. 광범위한 노력에도 불구하고, 고유 FE 분극을 나타내는 재료의 수는 여전히 제한적이며, 이는 강유전성을 유도하는 전략 개발에 동기를 부여해 왔습니다. 그중 슬라이딩 강유전성은 가장 유망한 접근법 중 하나로 부상했습니다.

본 연구에서는 2차원 특성에도 불구하고 매우 강한 층간 상호작용으로 알려진 α -프닉타이드 시스템의 구성원인 이중층 α -As에 초점을 맞춥니다. 단층 α -As는 고유한 FE 질서가 없지만, 본 연구에서는 이중층에서 새로운 FE 상이 생성됨을 밝혔습니다.

측면 이동을 통해 층간 대칭성이 깨지면서 발생하는 기존의 슬라이딩 강유전성과 달리, 이중층 α -As에서 관찰된 강유전성은 층간 상호작용에 의해 유도된 층내 구조 재구성에서 비롯됩니다. 제안된 이중층 α -As는 기존 슬라이딩 강유전체와 유사한 낮은 스위칭 장벽을 나타내면서도 기존 강유전체와 동일한 분극 밀도를 달성하여 저전력 및 고밀도 소자 응용 분야에 실질적인 이점을 제공합니다.

· Educational History

포항공과대학교 물리학과 학사 (1999)

포항공과대학교 물리학과 석사 (2001)

포항공과대학교 물리학과 박사 (2007)

· Employment History

CUT Dallas 물리학과, 박사후 연구원 (2007~2009)

포스텍 화학과, 연구조교수 (2010~2013)

유니스트 화학과, 조교수-부교수 (2014~현재)



박노정

부교수

UNIST, 물리학과

Real-time first-principles dynamics of real materials: charge current and spin current in the study of topological & geometrical natures of band states

We have explored charge and spin currents in real materials using ab initio computational methods, grounded in Time-Dependent Density Functional Theory (TDDFT) and Time-Dependent Current Density Functional Theory (TDCDFT). While our research has examined various Berry curvature characteristics in solid-state systems, our primary focus is on uncovering the topological and geometrical properties of band states in the real-time dynamics of real materials.

For instance, we show that quantum anomalous Hall conductivity and quantum spin Hall conductivity in bulk topological insulators can be directly computed via ab initio evaluations of charge and spin currents, respectively.

In this talk, we also present our recent advances in the study of one-dimensional structures, with a particular attention to how the intricate interplay between the topology, chirality, and correlation gives rise to unique spin, orbital, and charge dynamics.

· Educational History

Undergraduate study at Seoul National University, Department of Civil & Environmental Engineering (March 1990 ~ February 1994)
Master of Science in Physics, Seoul National University, Department of Physics (February 1997)
Doctor of Philosophy in Physics, Seoul National University, Department of Physics (August 2002)

· Employment History

Research Staff Member, Samsung Advanced Institute of Technology (February 2004~February 2005)
Assistant Professor, Department of Applied Physics, Dankook University (March 2007~February 2011)
Associate Professor, Interdisciplinary School of Green Energy, UNIST (March 2011~February 2014)
Associate Professor(tenured), Department of Physics, UNIST (March 2014~February 2017)
Professor(tenured), Department of Physics, UNIST (March 2017~present)



이준희

교수

UNIST, 에너지화학/반도체소재부품대학원

Hafnia-Based Ferroelectric Memory Targeting 100 TB Density and Sub-Picosecond Switching

메모리 분야 초격차를 줄이기 위해 정부는 2028년까지 DRAM 및 NAND 메모리를 강유전체를 사용한 메모리로 바꾸고자 하는 정책을 발표한 바 있다. 우리 그룹은 슈퍼컴퓨팅 시뮬레이션 만으로 2020년 사이언스에 헤프니아 기반 원자 유닛셀 수준의 작은 도메인을 메모리 단위로 사용하는 강유전 메모리 소재를 보고한 바 있다.

최근에는 이 강유전체의 대전된 head-to-head 와 tail-to-tail 벽에서도 유닛셀 수준의 초국소 도메인을 슈퍼컴 시뮬레이션을 통해 발견하였고, 실험으로도 증명하므로 100TB 급의 궁극적 고밀도의 메모리를 보고하였다. 나아가 실험팀과의 추가 연구로, THz 빛을 사용하여 이 국소 도메인을 picosecond 이하에서 세계 최고로 빠르게 스위칭할 수 있음을 증명하였다.

본 강연에서는 슈퍼컴퓨팅 시뮬레이션을 이용하여 차세대 강유전 메모리의 연구 동향과 메모리 초격차를 늘리고자 하는 방안을 발표할 예정이다.

· Educational History

서울대 물리학부 학사 (1997~2001)

서울대 물리학부 석사 (2001~2003)

서울대 물리학부 박사 (2003~2008)

· Employment History

Rutgers University, USA 박사후 연구원 (2008~2011)

Princeton University, USA 박사후 연구원 (2011~2013)

Oak Ridge National Lab., USA 박사후 연구원 (2013~2015)

UNIST 에너지화학/반도체소재부품 대학원 조교수, 부교수, 교수 (2015~현재)



민승규

부교수

UNIST, 화학과

Modulating Nuclear Motions with Exciton Polariton Based on Correlated Electron-Nuclear Dynamics

Light-driven rotary molecular motors (LDRMs) can transform the energy of light to rotary motion of one part of the molecule with respect to another. The energy of the mechanical motion can be harnessed in various nanosized devices, which already find first applications in fields such as nanotechnology, optogenetics, synthetic biology, nanomedicine, and functional materials.

Here, we investigate possibilities arising from strong light-matter interactions occurring in optical cavities to alter characteristics of the excited state decay in molecular motor molecule. By performing nonadiabatic dynamics (NAMD) simulations of motor's photodynamics in the presence of strong coupling with a cavity mode, we use the Jaynes-Cummings (JC) model to introduce a strong coupling between a lossless cavity mode with an LDRM described as a two-level molecular system.

We employ surface hopping dynamics based on exact factorization for NAMD simulation to account for electron-nuclear correlation in polariton states. As a result, it was found that the coupling with a mode detuned off resonance with the molecular optical transition offers a means to considerably increase the excited state decay lifetime and to either inhibit or slow down the motor's rotation.

· Educational History

Ph.D, Pohang University of Science and Technology (POSTECH) (2005~2011)

· Employment History

Postdoc., Max Planck Institute of Microstructure Physics (2012~2015)

Assistant Professor, UNIST (2015~2020)

Associate Professor, UNIST (2020~Present)



이동화

부교수

POSTECH, 신소재공학과

Development of Machine Learning Potential for HfO₂

HfO₂ has emerged as a promising material for various applications due to its excellent properties. However, although extensive research is underway to apply HfO₂ to various applications, our understanding of the physical and chemical causes leading to its diverse properties is currently quite limited. To precisely control the physical properties of HfO₂ and utilize it in various applications, research on understanding and controlling its behavior at the atomic level is essential. Although the development of ab-initio and empirical potential-based molecular dynamics techniques have enabled the prediction of material behavior at the atomic level, those studies are limited either in predictable system size or in predictive accuracy. To overcome these limitations, this study develop a machine learning potential based on crystal graph representation. Comparing the developed machine learning potential with ab-initio calculations, we confirm that it performs excellently in predicting energy, force, and atomic charge. Furthermore, molecular dynamics simulation results based on the developed machine learning potential reveal a structure and atomic behavior that are very similar to those predicted by ab-initio-based molecular dynamics simulation results. These results demonstrate that the developed machine learning potential can accurately reproduce the behavior and properties of HfO₂, and thus, it is expected that this potential can be utilized to understand and predict the behavior of HfO₂ in various applications.

· Educational History

Ph.D, University of Florida (2005~2010)

· Employment History

Postdoc. researcher, Lawrence Livermore National Laboratory (2010~2014)

Postdoc. researcher, Oak Ridge National Laboratory (2014~2015)

Assistant Professor, Chonnam National University (2015~2017)

Assistant, Associate Professor, POSTECH (2017~present)



권용우

교수

홍익대학교, 신소재공학전공

Device simulation of resistance-based memories by coupling electrothermal and phase-field models

The phase-field model is a technique used to simulate the evolution of microstructures, that is, the spatial distribution of different phases in materials. It predicts the temporal changes in microstructure by numerically solving differential equations. This model can analyze the influence of factors such as sample shape and processing conditions on the microstructure.

We have developed device simulations for phase-change memory and resistive memory by integrating the phase-field model into a finite element solver combined with an electrothermal model. In both phase-change and resistive memories, the high or low resistance state is determined by the microstructure of the active material, specifically the spatial distribution of high- and low-resistance phases.

Switching between these two states involves changing the microstructure of the active material through the application of an electrical pulse. In this presentation, I will explain our simulation models and present several case studies.

· Educational History

Ph.D, Northwestern University (2001~2007)

· Employment History

Senior Engineer, Samsung Electronics (2007~2013)

Assistant Professor, Hongik University (2013~2018)

Associate Professor, Hongik University (2018~2024)

Professor, Hongik University (2024~present)



명창우

조교수

성균관대학교 에너지학과

The Quest for Universal, Bayesian, and Equivariant Ab initio Machine Learning Potential: Bayesian Atoms Modeling (BAM) package

In recent years, machine learning has transformed numerous scientific disciplines by tackling key challenges. Machine learning potential offers a promising avenue for surmounting the stringent limitations on size and speed in atomistic simulations, which are inherent to ab initio methods.

We develop a universal Bayesian machine learning potential based on equivariant neural network frameworks. We aim to build a universal machine learning potential that can be expanded into a general potential for all known compounds and all known electronic states based on Bayesian approaches.

The goal is to build and apply this general-purpose ab initio machine learning potential to investigate various complex reactions such as catalysis, electron transfer, nonadiabatic excited state dynamics, redox chemistry, and surface chemistry.

· Educational History

B.S. Department of Electrical & Electronic Engineering, Pohang University of Science and Technology (POSTECH) (2007~2012)

M.S. Department of Electrical & Electronic Engineering, Pohang University of Science and Technology (POSTECH) (2012~2014)

Ph.D., Department of Chemistry, Ulsan National Institute of Science and Technology (UNIST) (2014~2019)

· Employment History

Postdoctoral Researcher, UNIST, Korea (2019)

Postdoctoral Researcher, ETH Zürich/USI, Switzerland (2019~2020)

Postdoctoral Fellow, University of Cambridge, United Kingdom (2020~2021)

Assistant Professor, Department of Chemistry, Chungnam National University, Korea (2021~2023)

Assistant Professor, Department of Energy, Sungkyunkwan University, Korea (2023~present)



우제현

박사후연구원

한국과학기술정보연구원

Efficient Density Functional Theory Calculations on GPUs via Mixed Precision Approach

Single precision (SP) arithmetic offers significant performance advantages over double precision (DP) arithmetic, especially on graphics processing units (GPUs). However, adopting the SP in the whole process of density functional theory (DFT) calculations often fails to meet the required accuracy. For efficient computations, a mixed precision approach using SP and DP arithmetic with combination can be used.

The key challenge is to use SP appropriately for numerically stable operations with little or no loss of accuracy. In this study, we demonstrate the effectiveness of the mixed precision approach in real-space DFT calculations. Particularly, we confirmed that the use of SP during the preconditioning process within the iterative diagonalization of the Hamiltonian matrix can contribute to a significant acceleration without losing the accuracy of the results.

As a result, our results show that this approach is a promising direction for high-performance electronic structure calculations.

· Educational History

B. S. in Chemistry and Physics (double major) HYU, Seoul, Korea (2015~2019)

Ph. D. in Chemistry KAIST, Daejeon, Korea (2019~2025)

· Employment History

Post doctoral researcher, Div. of National Supercomputing, KISTI (2025~present)

초고성능컴퓨팅 SW 생태계조성사업 성과 교류회

차세대 초고성능컴퓨터의 성능 활용을 최대화하기 위해 초고성능컴퓨팅 SW 생태계조성사업 연구 및 개발 내용을 공유하고자 한다. 다양한 차원에서 성능과 전력을 모두 고려하는 자동 최적화 프레임워크를 개발하는 과제와, 고성능 선형 해석을 위한 엑사스케일 선형 해석자 수치라이브러리 과제 참여 연구자 간의 교류를 통해 다양한 과학기술 분야에의 적용을 위한 개발 방향을 발전적으로 논의하고자 한다.

13:30~13:35 **초고성능컴퓨팅 소프트웨어 생태계과제 교류회 관련소개**
권오경 (KISTI)

13:35~13:55 **프레임워크 과제 개요**
성효진 (서울대)

13:55~14:15 **전력관련 연구 소개**
송진호 (연세대)

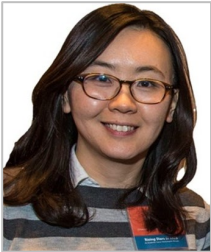
14:15~14:35 **수치라이브러리과제 개요**
최정일 (연세대)

14:35~14:55 **수치라이브러리 알고리즘 소개**
강지훈 (KISTI)

14:55~15:30 **패널 토의**
참석자 전원

15:30~16:00 **Coffee Break**

17:30~18:00 **각 과제별 2단계 연구 수행 계획 논의 (비공개)**
참석자 전원



성효진

부교수
서울대학교

엑사급 초고성능컴퓨터를 위한 다계층/다목적 오토튜닝 프레임워크 개발 과제 개요

엑사급 초고성능컴퓨터는 성능 및 전력 요구를 만족하기 위해 CPU와 GPU를 결합한 거대 이기종 클러스터로 구성됨. 이러한 시스템의 성능을 효율적으로 활용하려면 HPC 응용 알고리즘 뿐 아니라 이를 지원하는 라이브러리, 병렬 프로그래밍 모델, 컴파일러, 런타임과 같은 기반 소프트웨어의 최적화가 필수적임.

그러나 현재는 개별 시스템마다 특화된 최적화를 반복적으로 수행함으로써 시간과 비용 면에서 비효율적이고 확장성이 떨어짐. 따라서 확장과 적응이 용이한 통합적 최적화 프레임워크가 요구됨.

이를 위해, 본 과제에서는 병렬 프로그래밍 모델, 컴파일러, 런타임, 잡 스케줄러, 병렬 저장장치와 인터페이스하여 실행과 데이터 흐름을 통합적으로 제어하고 상호작용을 고려하여 전역적인 자동 최적화를 수행하는 프레임워크를 설계 및 구현하고자 함.

· Educational History

서울대학교 영어영문학 학사 (1996~2000)

서울대학교 컴퓨터공학 학사 (2002~2004)

일리노이 주립대학 컴퓨터공학 박사 (University of Illinois at Urbana-Champaign), USA
(2008~2015)

캘리포니아 주립대학 컴퓨터공학 석사 (University of California, San Diego), USA (2006~2008)

· Employment History

Research Engineer, 삼성전자 DM (디지털 미디어) 연구소 (2004~2006)

Research Scientist, IBM T. J. Watson Research Center, Yorktown Heights NY, USA
(2015~2019)



송진호

부교수

연세대학교

프로그램 코드 정보를 이용한 전력 예측 기술

머신러닝 컴파일러는 오토튜닝을 통해 프로그래머의 번거로운 개입 없이 애플리케이션의 성능을 최대화하는 데 중요한 역할을 하지만, 고성능 컴퓨팅 환경에서 중요한 요소 중 하나인 전력 소비를 크게 간과하고 있습니다.

이 발표에서는 프로그램 코드의 특성만을 이용하여 소비 전력을 예측할 수 있는 기술을 소개하고, 이를 활용하여 소비 전력을 고려한 머신러닝 컴파일러 프레임워크의 구현과 동작을 설명합니다.

해당 프레임워크는 경량 신경망 모델을 이용하여 코드 특성과 하드웨어에서 측정한 프로세서 전력 간의 관계를 학습하도록 훈련됩니다. 이를 바탕으로 최적화 과정에서 바이너리 생성이나 직접적인 전력 측정 과정 없이, 이미 컴파일러가 사용하고 있는 코드 특성만을 사용하여 소비 전력 예측이 가능합니다.

· Educational History

B.S., Electrical Eng., Yonsei University

Ph.D., Electrical & Computer Eng., Georgia Institute of Technology

· Employment History

Graduate Intern, Sandia National Labs, Albuquerque, NM

Graduate Co-op, AMD Research, Bellevue, WA

Graduate Co-op, IBM TJ Watson, Yorktown Heights, NY

Graduate Intern, Qualcomm, San Diego, CA

Senior Engineer, Intel, Santa Clara, CA



최정일

교수
연세대학교

XCCELS-엑사스케일 선형 해석자 수치라이브러리 개발 소개

XCCELS (eXascale Computing Center for sparse Linear Systems)는 엑사스케일 슈퍼컴퓨팅 환경에서 희소 선형 시스템을 고속으로 해석할 수 있는 핵심 수치 해석 소프트웨어를 개발하는 연구단입니다. 본 연구는 연세대학교를 주관으로, 포항공과대학교, 인하대학교, 이화여자대학교, KISTI가 함께 참여하고 있습니다.

XCCELS는 KISTI의 차세대 슈퍼컴퓨터 6호기 환경에 최적화된 선형 해석자 라이브러리를 구축하고 있으며, CPU 및 GPU 모두에서 고성능 병렬 계산이 가능하도록 개발되고 있습니다.

현재 PaScaL, UCFD_SPARSE, FEAL_KEM 등 총 6개의 차별화된 병렬 해석 모듈은 KISTI 5호기에서 성능 최적화를 마쳤으며, 구조, 유동, 전자기 등 다양한 공학 문제에 적용 가능한 형태로 지원되고 있습니다.

· Educational History

KAIST 기계공학과, 학사 (1990~1994)
KAIST 기계공학과, 석사, 전산유체역학 (1994~1996)
KAIST 기계공학과, 박사, 전산난류해석 및 제어 (1996~2002)

· Employment History

연세대, 연세청정기술센터, Post-Doc (2002)
노스캐롤라이나 주립대 (Chapel Hill) Post-Doc (2003~2004)
노스캐롤라이나 주립대 (NCSSU) 연구원 (2005~2010)
미국표준기술원, 방문연구원 (2010)
연세대 수학교산학부(계산과학공학), 조교수/부교수/교수 (2010.9~현재)



강지훈

책임연구원

한국과학기술정보연구원

엑사스케일 선형 해석자 수치라이브러리 모듈 알고리즘 및 코드 구현

본 발표에서는 XCCELS (eXascale Computing Center for sparse Linear Systems) 연구단에서 개발중인 수치라이브러리의 모듈별 핵심 수치알고리즘과 코드 구현 내용에 대하여 소개합니다. XCCELS 수치라이브러리는 희소 선형 시스템을 풀기 위한 6개의 모듈로 구성되어 있으며, 각 모듈은 목표로 하는 해석 대상을 위해 특화된 수치 알고리즘을 차용하고 이를 구현하였습니다.

PaScaL_TDMA, PaScaL_Poisson, FEAL_KEM, UCFD_SPARSE, PDD/PTT TDMA, Octree의 6개 모듈은 삼중대각행렬, 유한요소법 기반 선형 해석자, 고속푸리에변환, 멀티그리드, Octree 방법 등 여러 수치 알고리즘을 엑사스케일 컴퓨팅 환경을 목표로 구현하고 있습니다.

이러한 핵심 수치 알고리즘을 소개하고 알고리즘들이 어떻게 코드로 구현되어 있는지를 이산화된 방정식과 함께 설명합니다. 이를 통해 수치알고리즘 개선, 코드 최적화, 범용화 등 성능 및 편의성 향상에 대해 아이디어를 제공할 수 있기를 바라며 다양한 형태의 공동연구가 이뤄질 수 있기를 기대합니다.

· Educational History

KAIST 기계공학과, 학사 (1996~2000)

KAIST 기계공학과, 석사 (2000~2002)

KAIST 기계공학과, 박사 (2002~2007)

· Employment History

삼성전자 (2006~2009)

한국과학기술정보연구원, 선임/책임연구원 (2010~현재)

DAY 2

Community Forum

Friday, September 05, 2024

**KOREA SUPERCOMPUTING
CONFERENCE 2025**

THE NEXT FRONTIER: HPC with AI and Quantum

KSCA 운영위원회

- KSCA 운영에 관한 주요 안건 공유 및 논의를 위한 2025년도 제1차 운영위원회 개최

14:00~14:10	참석자 소개 및 운영위원회 개회 사무국장
14:10~15:10	전문센터 운영 실적 발표 전문센터장
15:10~15:40	신규 사업 기획 추진 방향 논의 전체
15:40~16:00	종합 토론 전체

Tutorial

Wednesday, September 03, 2025

**KOREA SUPERCOMPUTING
CONFERENCE 2025**

THE NEXT FRONTIER: HPC with AI and Quantum

Fundamentals of Accelerated Computing with Modern CUDA C++

국가슈퍼컴퓨터 6호기 사용자를 위한 본 튜토리얼은 GPU 가속 컴퓨팅에 입문하는 초급자를 대상으로, NVIDIA CUDA를 활용한 범용 GPU 프로그래밍의 기초 개념과 실습을 중심으로 구성된 교육 과정입니다.

참여자는 최신 GPU 아키텍처 환경에서 병렬 프로그래밍의 핵심 개념을 습득하고, 실제 GPU 가속 애플리케이션을 개발할 수 있는 기반 역량을 학습하게 됩니다.

본 튜토리얼은 NVIDIA와 HPE가 공동 주관하는 KSC2025 연계 프로그램입니다.

10:00~18:00

국가슈퍼컴퓨터 6호기 사용자를 위한 NVIDIA & HPE 연계 프로그램

Deep Learning Institute:

Fundamentals of Accelerated Computing with Modern CUDA C++

○ 교육 개요

- 일시: 2025년 9월 3일(수) 10:00 ~ 18:00
- 장소: 양재 엘타워 비바체룸 (2층)
- 정원: 40명 (선착순 사전 신청)
- 편의 제공: 점심 식사, 다과, 주차권 포함

○ 교육 대상

- 국가슈퍼컴퓨터 6호기 사용 예정자 또는 CUDA 기반 GPU 가속 프로그래밍 기초에 대한 이해가 필요한 연구자 및 개발자

○ 학습 목표

워크숍 수료 시 참가자는 다음과 같은 GPU 가속 컴퓨팅 기술을 습득하게 됩니다.

- GPU에서 실행되는 코드 작성 및 컴파일
- CPU와 GPU 간의 메모리 마이그레이션 최적화
- 코드에 GPU 가속 추가를 간소화하는 강력한 병렬 알고리즘 활용
- CUDA 커널로 GPU를 직접 프로그래밍하여 자체 병렬 알고리즘 구현
- 동시 CUDA 스트림을 활용하여 메모리 트래픽을 컴퓨팅과 중첩
- 기존 CPU 애플리케이션에 CUDA 가속을 효과적으로 적용하는 전략 파악

 한국과학기술정보연구원 Korea Institute of Science and Technology Information 한국과학기술정보연구원	 국가슈퍼컴퓨팅본부 www.kisti.ac.kr 국가슈퍼컴퓨팅센터	국산 Si반도체 기반 AX디바이스 개발·실증	DAWON COMPUTING 다원컴퓨팅(주)
 MKIS CORE MARKET INFORMATION SYSTEMS CORE  Hewlett Packard Enterprise (주)엠키스코어	 MKIS CORE MARKET INFORMATION SYSTEMS CORE  NVIDIA (주)엠키스코어	 KOLON BENIT  IBM Distributor 코오롱베니트	 aws AWS
 gaon Global Inc. 가온글로벌	 LEADERS SYSTEMS  NVIDIA (주)리더시스템즈	 ICRAFT  NVIDIA Elite Partner 아이크래프트	 Open Network SYSTEM (주)오픈네트웍시스템
 ALTAIR 알테어	 tSNE (주)태성에스앤이	 iERA (주)테라텍	

THE NEXT FRONTIER: HPC with AI and Quantum

KOREA SUPERCOMPUTING CONFERENCE 2025

KSC2025

2025년 9월 4일(목)~5일(금) | 코엑스 아셈볼룸 전관(2F)

ABSTRACT

주최 KISTI 한국과학기술정보연구원
www.kisti.ac.kr

주관 국가슈퍼컴퓨팅본부

KSF 한국초고성능컴퓨팅포럼

KSCSE 한국계산과학공학회

후원 과학기술정보통신부
Ministry of Science and ICT

THE NEXT FRONTIER: HPC with AI and Quantum

KOREA SUPERCOMPUTING CONFERENCE 2025

KSC2025

2025년 9월 4일(목)~5일(금) | 코엑스 아셈볼룸 전관(2F)

주최 **KISTI** 한국과학기술정보연구원
www.kisti.ac.kr

주관  국가슈퍼컴퓨팅본부

 KSF 한국과학기술정보연구원
한국초고성능컴퓨팅포럼

 KSCS 한국계산과학공학회
Korea Supercomputing Society

후원  과학기술정보통신부
Ministry of Science and ICT