

# PC 클러스터 상에서 분자동역학을 이용한 파괴 모사

최덕기<sup>†</sup>, 류한규<sup>\*</sup>

## Facture Simulation using Molecular Dynamics on a PC Cluster

Deok-Kee Choi and Han-Kyu Ryu

**Key Words :** Material simulation(재료 모사), Molecular dynamics(분자동역학), Fracture simulation(파괴 모사), Cluster(클러스터), LINUX(리눅스)

### Abstract

With the help of newly arrived technology such as PC clustering, molecular dynamics (MD) seems to be promising for large-scale materials simulations. A cost-effective cluster is set up using commodity PCs connected over Ethernet with fast switching devices and free software Linux. Executing MD simulations in the parallel sessions makes it possible to carry out large-scale materials simulations at acceptable computation time and costs. In this study, the MD computer code for fracture simulation is modified to comply with MPI (Message Passing Interface) specification, and runs on the PC cluster in parallel mode flawlessly. It is noted that PC clusters can provide a rather inexpensive high-performance computing environment comparing to supercomputers, if properly arranged.

### 1. 서론

최근 컴퓨터 기술의 발달과 더불어 미시적 관점에서의 분자동역학 모사가 화학에서 공학까지 그 응용범위가 확대되고 있다. 고성능 컴퓨터의 계산 능력을 바탕으로 한 분자동역학을 이용하여 특정 조건 하에서 금속, 반도체와 같은 재료의 거동을 예측할 수 있다. 연속체 역학에 기반을 둔 거시적 접근은 재료의 예상치 못한 파괴를 설명하는데 어려움이 있다.

분자동역학과 같은 수치 해석법을 이용한 재료 모사는 지난 수년간 관심 있는 분야로 떠오르고 있다. 분자동역학을 이용한 재료 모사는 크게 두 분야로 이루어 진다. 첫째는 다양한 하중 조건 하에서의 재료거동을 모사하는 것이고, 다른 하나는 최소한의 실험데이터를 가지고 재료의 물성치를 예측하는 것이다. 이를 위해서는 정확한 분자모델이 요구되는데 아직까지도 몇몇 일반적인 재료를 제외하고는 연구개발 단계에 있다.

일반적인 금속에 대한 분자모델은 Lennard-Jones<sup>(1)</sup>, Embedded-atom<sup>(2,6)</sup>, Sutton-Chen's<sup>(7)</sup> model 로 크게 구분된다. 초기의 분자동역학 연구에는 삼각 격자모델이 주로 사용되었다. Ashurst 등<sup>(8)</sup>은 Lennard-Jones 포텐셜 모델에 기초한 후크의 법칙으로 연결된 500 여 개의 분자들을 사용하였다. 그 후로 균열 첨단에서의 현상<sup>(9)</sup>과 미끄럼 현상<sup>(10)</sup>등이 분자동역학으로 연구되었다. 또한 균열 첨단의 진전과 재료 파괴<sup>(11,12)</sup>, 금속 표면에서의 현상<sup>(13)</sup>, 나노 스케일 가공<sup>(14)</sup>, 응력-변형을 해석<sup>(15)</sup>이 이루어 졌다.

분자동역학을 이용한 재료모사에서 만족할 만한 결과를 얻기 위해서는 수백만개 이상의 분자를 사용해야 한다. 하지만 이러한 숫자는 일반적인 컴퓨터의 용량을 초과하는 것으로써 보다 빠른 프로세서와 메모리를 요구하게 되었다. 따라서 지금까지는 슈퍼컴퓨터와 같은 고성능 컴퓨터에서만 계산이 가능하였다. 이와 같이 분자동역학 모사는 컴퓨터 기술의 발전과 직접적으로 관계해 왔다.

최근 병렬컴퓨터의 발전과 더불어 분자동역학 모사도 활발하게 진행되고 있다. 분자동역학 모사

<sup>†</sup> 단국대학교 기계공학과

<sup>\*</sup> 단국대학교 기계공학과 대학원

에서 계산시간의 대부분을 차지하는 분자간 힘을 계산하는 과정을 병렬컴퓨터가 가지고 있는 여러 개의 프로세서에 나누어 할당함으로써 효율적인 계산이 가능해지기 때문이다. 수억 개의 분자를 가지고 다양한 파괴 모사가 SPI<sup>(16)</sup>, Intel Paragon<sup>(17)</sup>, CM-2<sup>(18,19)</sup>, CM-5<sup>(20)</sup>, Cray T3D<sup>(21)</sup>, IBM RS/6000 SP<sup>(22)</sup>, CRAY C90<sup>(23,24)</sup>과 같은 병렬컴퓨터에서 이루어졌다.

슈퍼컴퓨터가 3 차원 모사까지도 가능하게 하였지만 아직까지도 실제 현상을 모사할 만한 분자수를 사용하는 데는 그 비용과 시간이 상당히 소요되므로 대부분의 연구자들에게 큰 제약이 되고 있다. 이런 비용과 시간을 줄이고자 하는 시도 중의 하나로 PC 를 기반으로 하는 클러스터가 대두되고 있으며, 잘 구성된 PC 클러스터는 슈퍼컴퓨터와 같은 성능을 발휘할 수 있다는 것이 여러 연구기관으로부터 보고되고 있다.

본 연구의 목적은 이와 같이 이더넷으로 연결된 PC 클러스터링 기술을 이용하여 재료의 파괴와 같은 분자동역학 재료 모사를 수행하는데 있다. 또한 PC 클러스터링 기술이 대규모 재료모사에 잘 적용될 수 있음을 보일 것이다.

## 2. 분자동역학 재료 모사

분자동역학 기법은 뉴턴의 운동방정식에 기초한 상미분방정식을 푸는 것이다.

분자 이론에 의하면 분자간에 작용하는 힘이나 에너지는 포텐셜 함수로 표현될 수 있다. 본 논문에서는 분자사이의 거리로 표현되는 Lennard-Jones 포텐셜 모델을 사용하였다. 이 모델에서는 각 시간 단계마다 뉴턴의 운동방정식에서 계산된 상호작용력으로부터 분자들의 새로운 위치가 결정된다.

두개의 분자를 생각할 때, 분자 사이의 거리가 충분히 가까워지면 두 분자사이에는 서로 미는 힘이 작용하게 되고, 거리가 멀어지게 되면 서로 당기는 힘이 작용한다.

Lennard-Jones 포텐셜은 다음과 같이 주어진다.

$$\phi_{LJ} = \sum_i \sum_{j>i}^N 4\epsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (1)$$

여기서,  $\sigma$ 는 포텐셜이 0 이 되는 분자간 거리를 나타내며,  $\epsilon$ 는 실험적으로 얻어지는 최소 에너지를 나타낸다.  $r$ 은 두 분자사이의 거리를 나타낸다. 따라서 두 분자사이에 작용하는 힘은 다음과 같다.

$$\vec{F} = -\nabla \phi_{LJ}(r) \quad (2)$$

$i$  번째 분자의 위치는 다음의 뉴턴의 운동방정식을 수치적으로 풀어서 얻을 수 있다.

$$\vec{F}_i = M_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} \quad (3)$$

여기서  $M_i$ 는  $i$  번째 분자의 질량이다.

각각의 시간 단계에서 분자들의 위치를 결정하기 위해서 힘의 계산이 필요한데 이것을 계산하는데 많은 시간이 요구된다. 즉  $N$  개의 분자에 대해서 약  $O(N^2)$ 의 계산이 필요하다. 따라서 분자수가 수백만개로 증가하게 되면 그 계산량은 일반적인 컴퓨터의 용량을 넘어서게 된다.

재료모사에 사용되는 분자 수에 따라 크기 효과<sup>(17-23)</sup>가 발생한다. 이와 같은 크기 의존성을 최소화하기 위하여 무차원화된 시간과 거리를 사용하였다. 무차원화된 거리  $R$  은 다음과 같이 정의된다.

$$\bar{R} \equiv \frac{\vec{r}}{\sigma} \quad (4)$$

무차원화된 시간은 다음과 같이 정의된다.

$$T \equiv \frac{t}{\sqrt{\frac{m\sigma^2}{\epsilon}}} \quad (5)$$

식 (4), (5)로부터 무차원 단위로 표현된 식을 얻을 수 있다.

$$\frac{d^2 \bar{R}}{dT^2} = 48 \sum_{i \neq j}^N \left( \bar{R}_{ij}^{-14} - \frac{1}{2} \bar{R}_{ij}^{-8} \right) \bar{R}_{ij} \quad (6)$$

여기서,  $i, j$ 는 각각  $i$  번째,  $j$  번째 분자를 나타낸다. 식 (6)은 분자수가 많기 때문에 해석적으로는 풀 수 없고, 수치해석법을 적용하여야 한다. 본 논문에서는 안정성과 정확성이 입증된 leapfrog 알고리즘<sup>(1)</sup>을 사용하였다.

$$\vec{v}_{i,1/2} = \vec{v}_{i,0} + \frac{\Delta t}{2} \vec{a}_{i,0} \quad (7)$$

$$\vec{v}_{i,k+1/2} = \vec{v}_{i,k-1/2} + (\Delta t) \vec{a}_{i,k}, k = 1, 2, \dots \quad (8)$$

$$\vec{R}_{i,k+1} = \vec{R}_{i,k} + (\Delta t) \vec{v}_{i,k+1/2}, k = 0, 1, \dots \quad (9)$$

여기서,  $\vec{v} = d\vec{R}/dT$ ,  $\vec{a} = d\vec{v}/dT$  이다.

## 3. PC 클러스터

### 3.1 클러스터

PC 클러스터란 프로세서 노드로 사용되는 PC 들의 네트워크를 의미하며, 여기서 노드란 하나 또는 그 이상의 프로세서, 메모리, 디스크 드라이브를 가지는 계산 요소를 뜻한다. 클러스터는 계산 집약적 응용프로그램, 과학적 가시화 프로그램, 대규모 데이터 관리프로그램 등에 사용되고 있다.

클러스터 시스템은 전통적인 슈퍼컴퓨터들과 다른 몇몇 특성을 가지고 있다. 그 중 하나는 클러스터를 구성하고 있는 각각의 컴퓨터가 하나의 완전한 시스템을 가진다는 것이다. 따라서 네트워크로 연결될 수 있는 모든 PC들이 하나의 클러스터로 형성될 수 있다.

가장 일반적인 클러스터링 프로젝트로써 1994년 초에 NASA의 Goddard Space Flight Center에서 Donald Becker에 의해 시작된 Beowulf 프로젝트<sup>(25)</sup>를 들 수 있다. 최초의 Beowulf 16 노드 클러스터는 지구와 우주 과학 프로젝트를 위해서 탄생하였으며, 곧 여러 연구실과 대학으로 빠르게 확산되어 갔다. 전통적인 Beowulf 시스템은 리눅스와 같은 무료 구동 시스템을 갖춘 PC들로 구성되며, 통신 라이브러리로써 MPI 등을 이용한다. 또한 저가의 고성능 계산환경을 제공하기 위해서 네트워킹 하드웨어들을 갖추고 있다.

### 3.2 하드웨어와 소프트웨어

그림 1은 2노드 클러스터 시스템을 나타낸다. 각각의 노드에는 Fast Ethernet NICs(Network Interface Controllers)가 설치되어 있으며, 각 시스템의 구성은 다음과 같다.

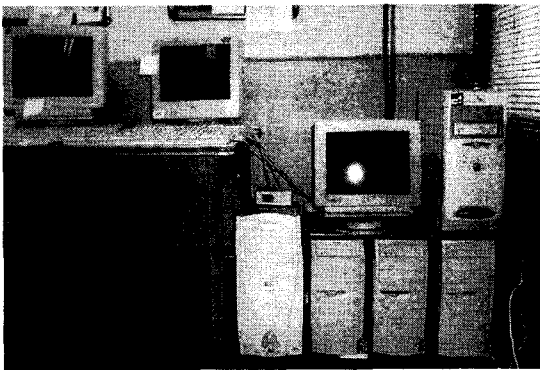


Fig. 1 : A PC-based cluster system with Linux running as an operating system.

- Intel Pentium III 667MHz CPU
- 128MB SDRAM
- Soltek SL-65FV+ motherboard
- Fast Ethernet NIC100Mbps
- Fast Ethernet switching hub 100Mbps
- Operating system: Linux

각각의 노드 사이에 데이터 전송 속도를 시험하기 위하여 netperf<sup>(26)</sup>를 이용하였다. 시험 결과는 다음과 같다.

- UDP STREAM test : 95.76 Mbit/sec

### ● TCP STREAM test : 94.11 Mbit/sec

낮은 가격과 고성능, 안정성과 유용성에서 많은 장점을 가지고 있는 리눅스를 클러스터 시스템의 구동 프로그램으로 선택하였으며, 통신 소프트웨어로는 전세계적으로 표준화가 되고 있는 MPI(Message Passing Interface)를 사용하였다. 메시지 전달 라이브러리<sup>(27, 28)</sup>에 대한 표준 MPI 함수들은 MPICH, LAM MPI 등으로 사용할 수 있다. 본 시스템에서는 MPICH<sup>(29)</sup> 버전 1.2.1을 각각의 노드에 설치하여 사용하였다.

### 3.3 분자동역학 코드의 병렬화

클러스터 시스템 상에서 분자동역학 모사 프로그램을 실행하기 위해서 내부 코드를 병렬화 하였다. 보다 좋은 성능을 얻기 위해서는 각각의 노드에 효율적으로 작업을 분배하는 것이 중요하다.

클러스터 시스템에서 병렬화된 분자동역학 재료 모사에 대한 순서도는 그림 2와 같다.

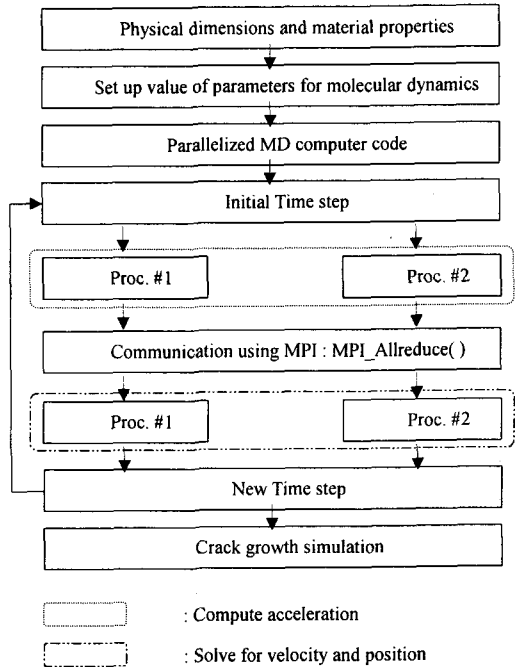


Fig. 2 : Flow chart of parallelized MD simulation on the two-node PC cluster using MPI library.

분자동역학 코드의 병렬화를 보다 자세히 설명하기 위해서 가상코드를 그림 3에 표시하였다. 가상코드에서 볼 수 있는 MPI 함수들은 다음과 같다.

- #include "mpi.h" : MPI 함수 정의
- MPI\_Init() : MPI 프로세스 시작
- MPI\_Finalize() : MPI 프로세스 종료

- MPI\_Comm\_size() : 현재 클러스터 상에 존재하는 노드 수
- MPI\_Comm\_rank() : 클러스터 상에서의 노드 번호
- MPI\_COMM\_WORLD : 기본 통신자
- MPI\_Allreduce() : reduce 연산 결과가 모든 노드에 전달되는 함수

```

#include "mpi.h"
:
:
int main()
{
:
:
MPI_Init();
MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD,&size);
MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD,&rank);
:
for(step=1;step<=MAXSTEP;step++) {
for(i=rank;i<N;i+=size) {
for(j=i+1;j<N;j++) {
accelartion=...
}
}
MPI_Allreduce();
velocity=...
position=...
:
:
MPI_Finalize();
}
}

```

Fig. 3 : The parallelized MD simulation code with MPI functions.

#### 4. 클러스터 상에서 파괴 모사

본 논문에서는 2-노드 클러스터 시스템에서 분자동역학을 이용한 파괴모사를 수행하였다. 그림 4(a)에서처럼 한 쪽 면에 균열이 존재하는 시편을 인장 시험할 때 발생하는 재료 거동을 모사하였다. 시편의 형상은 높이 대 넓이의 비가 4.21 이고, 초기 균열 길이 대 넓이가 0.25 이며, 두께 대 넓이가 0.46 이다. 가상인장시험을 수행함에 있어서 시편의 인장속도는 0.5 로 일정하게 유지하고 시간 간격은 0.01 로 하였다. 분자 수 42,770 개의 시편에 대한 균열 성장을 나타내는 모사 결과는 그림 4(b)-(d)이다.

클러스터 시스템을 이용하여 전체 계산 과정을 각각의 노드에 배분하여 수행함으로써 계산량을 반으로 줄일 수 있다.

문제의 크기에 따른 PC 클러스터 시스템의 성능을 분석하기위해서 분자 수를 각각 2970, 7336, 14670, 26796, 42770 개로 구분하여 파괴 모사를

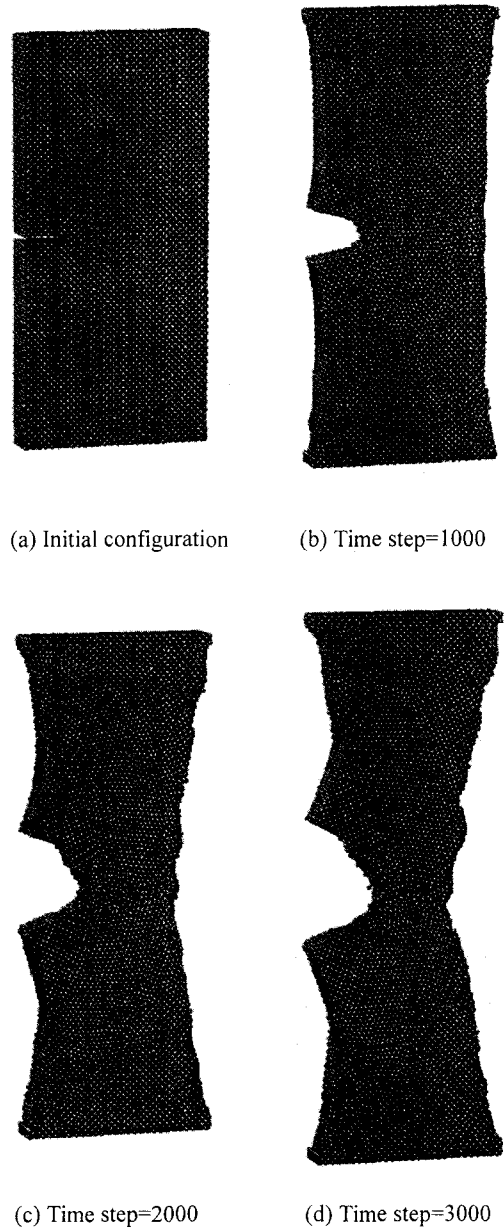


Fig. 4 : The fracture simulation with the crack growth.

수행하였다. 본 논문에서는 각각의 분자 수를 가지는 시편에 대해서 1-노드 시스템과 2-노드 클러스터에서의 계산 시간과 효율을 계산하였다. 먼저 2-노드 클러스터 시스템과 1-노드 시스템의 계산 시간 비율은 그림 5 에서 볼 수 있듯이 분자 수에 따라서 25%-49%범위에서 변화함을 알 수 있다. 문제의 크기가 커짐에 따라 보다 좋은 성능을 나

타법을 알 수 있었다.

클러스터 시스템의 효율은 다음과 같이 정의된다.

$$E = \frac{S(n)}{n} \times 100(\%) \quad (10)$$

여기서,  $S(n)$ 은 속도향상 요소로써 아래와 같이 정의된다.

$$S(n) = \frac{t_s}{t_p} \quad (11)$$

여기서,  $t_s$ 는 1-노드 시스템에서의 실행시간을 나타내며,  $t_p$ 는 멀티 노드에서의 계산 실행시간을 의미하며,  $n$ 은 노드 수이다. 그림 5에서 볼 수 있듯이 분자 수  $N=42,770$  에서 2-노드 클러스터 시스템의 효율이 거의 100%에 도달함을 알 수 있었다. 이것은 다시 말해서 1-노드 시스템보다 2-노드 클러스터 시스템이 거의 2 배 빠르다는 것을 의미한다.

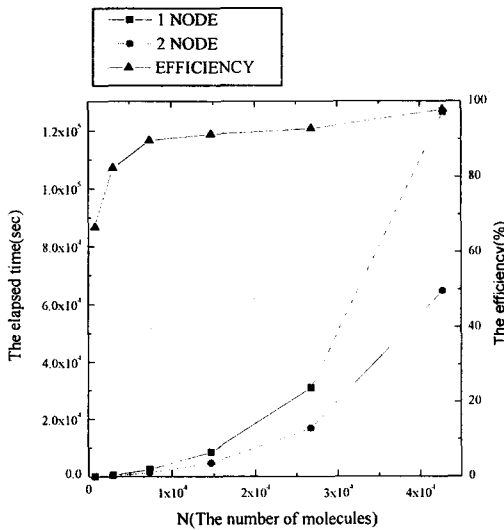


Fig. 5 : The elapsed time versus the number of molecules N for two different system configurations : single node and two-node system

## 5. 결론

전행적인 거시적 해석방법보다 분자레벨의 미시적 재료모사에서 보다 정확한 미시적 재료 거동과 물성치를 알 수 있는 것은 분명하다. 분자동역학이 기존의 다른 해석방법에 비하여 많은 장점을 가지고 있음에도 불구하고 방대한 계산량 때문에 실제 해석에 적용 할 때는 많은 어려움이 있어 왔다.

이와 같이 분자동역학 재료 모사의 많은 CPU

계산 시간과 메모리의 요구로 인하여 대부분의 재료모사는 슈퍼컴퓨터와 대규모 병렬 컴퓨터에서나 이루어 질 수 있었으나, 빠른 통신장비로 연결하여 하나의 클러스터 시스템을 구성하는 방식으로 보다 저렴한 가격으로 고성능 계산 환경을 만들어냄으로써 가능하게 되었다.

본 논문에서는 저렴한 가격의 PC 클러스터 시스템을 구성하여 계산 집약적인 분자동역학 재료 모사를 효율적으로 수행하였다.

## 참고문헌

- (1) Rapaport, D. C., 1995, *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, Cambridge University Press, Cambridge, UK.
- (2) Daw, M. S. and Baskes, M. I., 1984, "Embedded-Atom Method : Derivation and Application to Impurities, Surfaces, and Other Defects in Metals", *Physical Review B*, Vol. 29, pp. 6443
- (3) Jacobsen, K. W. et al., 1987, "Interatomic Interactions in the Effective-Medium Theory", *Physical Review B*, Vol. 35, pp. 7423
- (4) Holian, B. L. et al., 1991, "Effects of Pairwise versus Many-Body Forces on High-Stress Plastic Deformation", *Physical Review A*, Vol. 43, pp. 2655
- (5) Landman, U. and Luedtke, W. D., 1988, "Proc. Atomistic Simulation of Materials: Beyond Pair Potentials" (eds., Vitek, V. and Srolovitz, D. J.), pp. 443, Plenum press, Chicago.
- (6) Manninen, M., Nieminen, R. M. and Puska, M. J., 1989, "Proc. Many-Atom Interactions in Solids" (eds., Manninen, M., Nieminen, R. M. and Puska, M. J.), pp. 2, Springer-Verlag, Pajulahti, Finland.
- (7) Sutton, A. P. and Chen, J., 1990, "Long-Range Finnis-Sinclair Potentials", *Philosophical magazine Letters*, Vol. 61, pp. 139
- (8) Ashurst, W. T., Hoover, W. G., 1976, "Microscopic Fracture Studies in the Two-Dimensional Triangular Lattice", *Physical Review B*, Vol. 14, pp. 1465
- (9) DeCelis, B., Argon, A. S. and Yip, S., 1983, "Molecular Dynamics Simulations of Crack Tip Processes in Alpha-Iron and Copper", *Journal of Applied Physics*, Vol. 54, pp. 4864
- (10) Halicioglu, T and Cooper, D. M., 1984, "An Atomistic Model of Slip Formation", *Materials Science and Engineering*, Vol. 62, pp. 121
- (11) Green, D., 1986, "Quasi Molecular, Particle Modelling of Crack Generation and Fracture", *Computer and Structures*, Vol. 22, pp. 1055
- (12) Dienes, G. J. and Paskin, A., 1987, "Molecular Dynamics Simulations of Crack Propagation", *J. Phys. Chem. Solids*, Vol. 48, pp. 1015
- (13) Shiang, K. et al., 1994, "A Molecular Dynamics Study of Self-Diffusion on Metal Surfaces", *Surface Science*, Vol. 301, pp. 136
- (14) Maekawa, K. and Itoh, A., 1995, "Friction and

- Tool Wear in Nano-Scale Machining – A Molecular Dynamics Approach”, *Wear*, Vol. 188, pp. 115
- (15) Scagnetti, P. A. et al., 1996, “Stress and Strain Analysis in Molecular Dynamics Simulation of Solids”, *Transaction of the ASME*, Vol. 63, pp. 450
- (16) Abraham, F. F., Brodbeck, D., Rafey, R. A., Rudge, W. E., 1994, “Instability Dynamics of Fracture : A Computer Simulation Investigation”, *Physical Review Letters*, Vol. 73, pp. 272
- (17) Plimpton, S. and Hendrickson, B., 1994, “A New Parallel Method for Molecular dynamics Simulation of Macromolecular Systems”, Sandia Technical Report SAND94-1862.
- (18) Hoover, W. G. et al., 1990, “Large-Scale Elastic-Plastic Indentation Simulations via Non-Equilibrium Molecular Dynamics”, *Physical Review A*, Vol. 42, pp. 5844
- (19) Wagner, N., Holian, B. L. and Voter, A. F., 1992, “Molecular Dynamics Simulations of Two-Dimensional Materials at High Strain Rates”, *Physical Review A*, Vol. 45, pp. 8457
- (20) Holian, B. L. and Ravelo, R., 1995, “Fracture Simulation using Large-Scale Molecular Dynamics”, *Physical Review B*, Vol. 51, pp. 11275
- (21) Zhou, S. J. et al., 1997, “Large-Scale Molecular Dynamics Simulation of Three-Dimensional Ductile Failure”, *Physical Review Letters*, Vol. 78, pp. 479
- (22) Abranam, F. F., 1997, “Portrait of a Crack: Rapid Fracture Mechanics using Parallel Molecular Dynamics”, *IEEE Computational Science and Engineering*, April-June, pp. 66
- (23) Choi, D. K. and Kim, J. W., 1998, “Calculation of Stress Intensity Factors using Three-Dimensional Molecular Dynamics Simulation”, *Metals and Materials*, Vol. 4, pp. 920
- (24) Choi, D. K. and Kim, J. W., 1998, “A Study on Distribution of Plastic Region near a Crack Tip using Three-Dimensional Molecular Dynamics Simulation”, *Metals and Materials*, Vol. 4, pp. 925
- (25) Becker, D., 1994, The Beowulf Project, <http://www.beowulf.org>
- (26) Netperf, <http://www.netperf.org/netperf>
- (27) MPI Primer/Developing with LAM, 1996, Ohio Supercomputing Center, The Ohio State University, <http://www.osc.edu/lam.html>
- (28) Pacheco, P. S., 1998, A User’s Guide to MPI, <http://citeseer.nj.nec.com>
- (29) Argonne National Laboratory, 2001, MPICH: A Portable Implementation of MPI, <http://www.openchannelfoundation.org>