특집기사

분자 동역학을 이용한 재료 거동 해석

최 덕 기*

재료 거동에 대한 컴퓨터 시뮬레이션

수천년 전 고대의 그리스 철학자들은 이미 모든 재료가 더 이상 나누어 질 수 없는 어떤 것 즉 분자나 원자로 이루어져 있다는 것을 알고 있었다. 현재까지 잘 알려진 대로 재료에 대한 궁극적인 성질을 탐구하고 이해하기 위해서는 분자 수준에서의 연구가 가장 합당하다고 할 수 있을 것이다. 분자 수준의 컴퓨터 시뮬레이션은 주로 화학, 생물, 및 물리학 분야에서 활발하게 사용되어 왔다. 자연과학 분야에서의 응용은 주로 새로운 물질을 합성하고, 화학적인 작용을 분석하여 보다 진보된 물질을 개발하는데 초점을 두고 있다.

한편 공학분야에서는 다양한 나노 단위의 재료에 대한 제작과 설계 그리고 생체공학 분야에서 나노(nano) 단위의 의학용 기계 및 재료에 대한 관심이 고조되고 있다. 자연과학 분야에서의 관심이 주로 분자 사이의 화학적인 작용에 집중되어 있다면 공학분야에서는 재료에 대한 분자 수준의 설계 및 역학적인 해석이 주요 관심사라고 할 수 있다. 또한 고전적인 공학분야에서는 주로 재료의 역학적인 거동에 가장 큰 관심이 모아진다. 재료에 대한 많은 실험 데이터를 바탕으로 하여 거동에 대한 예측을 가능하게 하는 수식이 주어질 수 있다면 보다 나은 설계와 해석에 크게 도움을 줄 것은 의심할 여지가 없다.

실험에서 얻은 데이터를 분석하여 재료의 거동을 근거 있게 설명해야 하는 것은 공학자들에게 가장 어렵게 다가오는 문제중의 하나이다. 실험 결과에 근거하여 적절한 이론으로 그 결과를 뒷받침 것은 항상 많은 어려움을 수반한다. 즉, 재료에 대한 거동을 이론적인 근거를 바탕으로 예측할 수 있게 되면 설계, 해석, 구조 설계 및 해석, 파괴, 손상, 소성 가공 등 거의 모든 분야에서 유용하게 사용될 수 있으므로 선택된 재료가 어떤 거동을 보일 것인가를 미리 예측하는 것은 공학자들의 가장 중요한 관심사 중의 하나이다. 그러므로 주어진 재료에 대한 거동을 컴퓨터 시뮬레이션을 사용하여 모사할 수 있는 방법을 연구하는 것은 시간과 경비를 절약하여 보다 효율적인 설계와 해석을 가능하게 하는 유일한 방법이라고 볼 수 있다.

미시적인 해석 방법의 필요성

재료의 특성을 예측하는 해석 방법으로는 거시

* 단국대학교 공과대학 기계공학과

적인 해석과 미시적인 해석 방법으로 크게 나눌 수 있다. 거시적인 방법은 재료를 연속적인 물체로 취급하여 재료의 거동에 대한 적절한 거동 방정식을 가정하여 해석하는 방법이다. 현재는 거시적인 수치해석방법의 하나인 유한요소법이 가장 보편적으로 쓰이고 있다. 일반적으로 재료의 거동에 대한 컴퓨터 시뮬레이션은 최소 포텐셜 에너지(minimum potential energy) 개념에 기반을 둔 유한요소법을 사용하여 해석하였다. 유한요소법은 현재 공학 문제 전반에 걸친 대표적인 해석기법으로서 그 안정성 및 정확성을 검증 받아 널리 쓰이고 있는 수치기법이다. 한편, 최근에는 거시적인 해석 방법으로 해석하기 어려운 문제들을 미시적인 관점에서 해석하려는 시도가 진행되고 있다. 그 이유는 거시적인 해석 방법으로 해결하기 어려운 많은 문제들 중 재료의 미시적인 거동을 이해하는 것이 필수적인 부분이 산업의 발전에 따라 점차 증가하고 있기 때문이다. 예를 들어, 재료의 파괴(fracture), 손상(damage), 소성 변형, 전위(dislocation), 슬립(slip) 현상 등과 기체와 고체, 또는 액체와 고체의 계면 현상에 대한 해석 등을 들 수 있다. 이러한 문제들을 다루기 위한 미시적인 해석 방법 중에서 분자 동역학(molecular dynamics)을 사용한 재료의 수치적인 모사가 최근에 각광을 받고 있다. 분자 동역학에서는 재료를 구성하고 있는 각각의 분자에 대한 움직임을 포착하여 재료의 성질에 대한 이해를 높이고, 다양한 재료에 대한 거동을 예측 가능하게 하는 것이 목적이다. 즉, 분자 동역학에서는 거시적인 해석에서 사용되는 일반적인 방정식(탄성방정식 등)들이 사용되는 것이 아니라, 분자 사이에서 작용하는 작용력을 고려하는 것이 거시적인 해석과 크게 다른 점이다.

순차 연산과 병렬 연산

미시적인 해석 방법 중에서 분자 동역학(molecular dynamics)을 사용한 재료 모사에 대한 연구가 활발히 진행중이다. 이와 같은 수치기법을 사용한 재료 모사는 계산 집약적인 방법으로서 강력한 수치 프로세서와 확장된 메모리 그리고 대용량의 저장 공간을 필요로 한다. 또한 계산 효율성의 극대화를 이루기 위해서는 일반적으로 사용되는 순차적 프로그래밍 기법을 사용하는 것은 불합리하다. 분자 동역학에 대한 병렬화 과정과 수치예제들을 통해서 균열 진전과 같은 대규모 재료거동을 컴퓨터상에서 모사할 수 있는 가능성을 보였다. 최근 컴퓨터 기술의 급속한 발달과 더불어 공학의 제반문제를 수치해석방법으로 해결하고 있으며, 산업계 전반에서 이러한 수치해석을 이용한 시뮬레이션기법을 적극 활용함으로써 제품의 설계기간 단축 및 원가절감 등의 효과를 얻고 있다. 그러나 점차 해석하고자 하는 모델의 크기가 대형화되고, 복잡한 비선형 요소를 포함하게 됨에 따라 많은 계산시간을 요구하게 되고 그에 따른 비용이 비약적으로 증가하여 이를 줄일 수 있는 효율적인 계산방법의 필요성이 요구되고 있다. 지금까지 많이 활용되고 있는 계산용 슈퍼컴퓨터들은 벡터 프로세서를 장착한 것으로써 지난 수십년 동안 많은 발전이 이루어 졌지만, 하드웨어적인 한계성으로 인하여 점차로 그 발전속도가 둔화되고 있다. 최근 이러한 벡터 컴퓨터의 한계성을 극복하고자 병렬 컴퓨터가 도입되었으며, 선진국에서는 이미 병렬 컴퓨팅 분야에서 많은 연구가 활발히 진행되고 있고, 여러 응용분야에서 개발사례들이 보고되고 있다.

분자 동역학

분자동역학을 이용한 재료 모사는 크게 두 분야로 이루어진다. 첫째는 다양한 하중 조건 하에서의 재료거동을 모사 하는 것이고, 다른 하나는 최소한의 실험데이터를 가지고 재료의 물성치를 예측하는 것이다. 이를 위해서는 정확한 분자모델이 요구되는데 아직까지도 몇몇 일반적인 재료를 제외하고는 초보적인 단계에 있다.

분자 동역학을 사용하여 재료의 미시적인 거동을 시뮬레이션 하기 위해서는 간결하고도 정확한 분자모델이 필요하다. 일반적인 분자모델은 Lennard-Jones, Embedded-atom, Suton-Chen model 등이 있다. 초기의 분자동역학 연구에는 삼각격자모델이 주로 사용되었다. 즉 분자사이의 인력과 척력을 Hooke의 법칙을 만족하는 스프링으로 대치하여 외력이 작용할 경우의 분자들의 거동을 모사하는

방법이 사용되었다. Ashurst 등은 Lennard-Jones 포텐셜 모델에 기초한 후크의 법칙으로 연결된 500여 개의 분자들을 사용하였다. 그 후로 균열 첨단에서의 현상과 미끄럼 현상등이 분자동역학으로 연구되었다. 또한 균열 첨단의 진전과 재료 파괴, 금속 표면에서의 현상, 나노 스케일 가공, 응력-변형률 해석, 저온에서의 취성에 대한 고찰, 압축이 상기체의 팽창에 관한 연구가 이루어 졌다.

분자동역학 이론

분자동역학 기법은 Newton 운동방정식에 기초한 분자의 위치를 나타내는 미분 방정식을 시간에 대하여 적분하여 각 시간에서의 최소 포텐셜 에너지를 유지할 수 있는 분자들의 위치를 구하는 방법이다. 분자 이론에 의하면 분자간에 작용하는 힘이나 에너지는 포텐셜 함수로 표현될 수 있다. 두 개의 분자를 고려할 때, 분자 사이의 거리가 충분히 가까워지면 두 분자사이에는 서로 미는 힘이 작용하게 되고, 거리가 멀어지게 되면 서로 당기는 힘이 작용한다. 본 논문에서는 분자사이의 거리로 표현되는 Lennard-Jones 포텐셜 에너지 모델을 사용하였다. 두 개의 분자 i, j의 위치를 각각 $\boldsymbol{r}_i$, $\boldsymbol{r}_j$로 표시 할 수 있다고 하면, Lennard-Jones 분자 모델을 사용한 포텐셜 에너지는 다음과 같이 주어진다.

$$\phi(r_{ij}) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{6}\right] \tag{1}$$

여기에서 $\boldsymbol{r}_{ij}=\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j$ $r_{ij}\equiv|\boldsymbol{r}_{ij}|$이며, σ는 포텐셜 에너지가 최소가 되는 분자간의 거리를 나타내며, ε은 실험적으로 얻어지는 최소 에너지를 나타낸다. 두 분자사이에 작용하는 힘은 다음과 같다.

$$\boldsymbol{f} = -\nabla\phi(r) \tag{2}$$

따라서 임의의 분자 j가 분자 i에 미치는 힘은 식(1)을 식(2)에 대입하여 다음과 같이 얻을 수 있다.

$$\boldsymbol{f}_{ij} = \left(\frac{48\varepsilon}{\sigma^2}\right)\left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{14} - \frac{1}{2}\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{8}\right]\boldsymbol{r}_{ij} \tag{3}$$

식(3)에서의 상호 작용력 $\boldsymbol{f}_{ij}$에 대하여 모든 분자를 고려하여 합을 구하면 i번째 분자에 작용하는 모든 분자들의 작용력을 다음과 같이 구할 수 있다.

$$m_i\ \boldsymbol{a} = m_i\frac{d^2\boldsymbol{r}_i}{dt^2} = \boldsymbol{F}_i = \sum_{j=1,\,j\neq i}^{N}\boldsymbol{f}_{ij} \tag{4}$$

여기서 $\boldsymbol{F}_i$는 i번째 분자에 작용하는 다른 모든 분자들의 작용력을 합한 것이며, $\boldsymbol{a}$는 가속도, m_i는 i번째 분자의 질량이다. i번째 분자의 위치는 식(4)에 있는 Newton 운동방정식을 수치적으로 풀어서 얻을 수 있다. 이 모델에서는 각 시간 단계마다 Newton 운동방정식에서 계산된 상호작용력으로부터 분자들의 새로운 위치가 결정된다. 각각의 시간 단계에서 분자들의 위치를 결정하기 위해서 힘의 계산이 필요한데 이것을 계산하는데 많은 시간이 요구된다. 즉 N개의 분자에 대해서는 약 $O(N^2)$의 계산이 필요하다.

한편 재료 시뮬레이션에서는 사용되는 분자 수에 따라 크기 효과(size effect)가 발생한다. 이와 같은 크기 의존성을 최소화하기 위하여 무차원화된 시간과 거리를 사용하였다. 무차원화된 거리 R은 다음과 같이 정의된다.

$$\boldsymbol{R}_{ij} \equiv \frac{\boldsymbol{r}_{ij}}{\sigma} \tag{5}$$

무차원화된 시간 T는 다음과 같이 정의된다.

$$T \equiv \frac{t}{\sqrt{m\sigma^2/\varepsilon}} \tag{6}$$

식(3)을 식(4)에 대입하고 식(5), (6)을 사용하여 무차원화시키면 식(4)는 최종적으로 다음과 같이 무차원화된 식으로 변환된다.

$$\frac{d^2\boldsymbol{R}_i}{dT^2} = 48\sum_{j\neq i}^{N}\left(R_{ij}^{-14} - \frac{1}{2}R_{ij}^{-8}\right)\boldsymbol{R}_{ij} \tag{7}$$

식(7)에서 보는 바와 같이 해를 구해야할 방정식의 수는 분자의 개수와 동일하여 너무 많기 때문에

해석적으로는 해를 구하기는 불가능하므로, 수치해석을 사용하여야 한다. 방정식의 해를 구하기 위하여 여기에서는 안정성과 정확성이 입증된 leapfrog 알고리듬을 사용하였다.

$$\boldsymbol{v}_{i,1/2} = \boldsymbol{v}_{i,0} + \frac{\triangle T}{2}\ \boldsymbol{a}_{i,0} \tag{8}$$

$$\boldsymbol{v}_{i,k+1/2} = \boldsymbol{v}_{i,k-1/2} + (\triangle T)\ \boldsymbol{a}_{i,k} \tag{9}$$

$$\boldsymbol{R}_{i,k+1} = \boldsymbol{R}_{i,k} + (\triangle T)\ \boldsymbol{v}_{i,k+1/2} \tag{10}$$

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

분자 동역학의 문제점

분자 동역학 기법을 사용하여 재료의 미시적인 거동을 모사하기 위해서는 최소한의 분자수를 고려해도 100개 이상을 사용하여야 한다. 사용되는 분자수가 적을 경우에는 크기 효과(size effect)가 크게 나타나서 전반적인 특성을 오히려 파악하기 어렵게된다. 여기에서 제시한 100개의 개념은 절대적인 수치가 아니라 일반적인 수치 모사를 위한 최소한의 크기를 제시한 것이다. 100개의 분자를 사용하여 가로와 세로의 비가 같은 2차원 사각형 형태의 시편을 만든다고 생각하면 각 변에 10개씩의 원자를 배치할 수 있다. 일반적으로 금속재료를 구성하고 있는 원자간의 거리는 대략 0.3nm이므로 각 변에 10개씩의 분자를 배치한다고 해도 그 크기는 각각 3nm×3nm 에 불과하게 된다. 이만한 크기는 실제 재료를 모사하기에는 너무 작다.

이에 대한 해결책은 두 가지로 제시할 수 있다. 첫 번째 해결책은 적절한 단위길이(reference length)를 정하여 그 길이로 무차원화 시키는 방법이 있다. 이렇게 함으로써 상대적으로 적은 수의 분자를 사용하여 재료에 대한 컴퓨터 시뮬레이션을 실행하는 것이 가능하게 된다. 무차원화를 시킨 후에 시뮬레이션을 수행할 경우에 가장 문제가 되는 것은 경계조건이다. 따라서 경계조건에 대하여서는 분자로 구성된 가상 시편의 경계부분을 주기경계조건(periodic boundary condition)을 사용함으로 실제 내부의 반응을 모사 하는 기법을 사용한다. 그러나 이 방법의 단점은 경계에서의 분자 거동을 계산할 수가 없게 되어서 자유계면이 있는 균열의 진전현상이나 재료의 파괴현상 등 계면이 관련된 시뮬레이션을 수행하는 것이 불가능하게 된다는 점이다.

두 번째 해결책으로는 재료 시뮬레이션에 사용되는 분자의 개수를 가능한 많이 사용함으로써 실제 재료의 성질과 그에 따른 경계조건을 만족시키는 것이 가장 이상적이라고 할 수 있다. 그러나 분자 동역학 기법의 특성상 분자수의 증가는 곧 계산량의 기하급수적인 증가로 이어지게 된다. 시뮬레이션에 사용하는 분자의 개수를 N 이라고 할 때의 매 시간 스텝당의 계산량은 대략 $O(N^2)$의 크기가 된다. 최근의 선진국에서의 연구 결과를 보면 분자의 개수는 이미 10^5을 넘어서서 10^9이상의 계산에 도전하고 있다. 계산량을 대략적으로 계산해 보면 $O(10^9)$의 계산량은 대략적으로 하나의 분자에 대한 다른 분자들의 작용력을 한번 계산하는데 1초가 걸리는 컴퓨터에서는 수행하는데 약 31년이 걸리게 되며 이것은 현재로서는 비현실적인 수치이다.

병렬연산의 필요성

이러한 방대한 계산량을 고려할 때 분자 동역학을 사용한 재료 시뮬레이션은 계산 집약적인 방법으로서 강력한 수치 프로세서와 확장된 메모리 그리고 대용량의 저장공간을 필요로 한다. 또한 계산 효율성의 극대화를 이루기 위해서는 일반적으로 사용되는 순차적(sequential programming) 프로그래밍 기법을 사용하는 것은 불합리하다. 따라서 분자 동역학을 이용한 재료 시뮬레이션에는 병렬 프로그래밍 기법과 병렬 프로그램을 수행시킬 수 있는 계산 환경을 갖추는 것이 가장 중요한 요소가 된다. 재료 시뮬레이션에 대한 연구 경향을 살펴보면 극히 최근까지도 대부분의 병렬 프로그램은 슈퍼컴퓨터나 전용 병렬 컴퓨터에서만 수행이 가능하였고, 그 비용은 컴퓨터 시스템의 성능의 향상에 비례하여 상대적으로 높아지는 경향을 보여왔다.

병렬 프로그래밍 기법이 기존의 순차적 프로그

래밍 기법에 비하여 우수한 점은 각 분자에 대한 계산을 적절하게 분배하여 동시에 계산이 가능하다는 점이다. 분자 동역학을 이용한 재료 시뮬레이션을 수행할 때 개별 분자에 대한 계산이 다 끝날 때까지 기다려야 하는 순차적 방식에 비하여 다수의 분자에 대한 계산을 분산하여 동시에 처리하는 병렬계산 방식이 보다 효율적인 것은 실제 수행시간을 비교해 보면 명확하게 드러난다. 그 이유는 분자동역학 모사에 있어서 각각의 분자에 대한 계산을 여러 개의 프로세서에 나누어 할당함으로써 효율적인 계산이 가능해지기 때문이다. 다양한 재료에 대한 파괴 시뮬레이션이 SP1, Intel Paragon, CM-2, CM-5, Cray T3D, IBM RS/6000 SP, CRAY C90 과 같은 고성능 병렬컴퓨터에서 수행되었다. 본 연구에서는 효율적으로 병렬화 하기 위한 방법을 제시하고자 한다.

분자동역학 프로그램의 병렬화

분자동역학의 순차 알고리듬에서 각 분자들의 위치를 결정하기 위한 가속도 계산은 N개의 분자에 대해서 약 $O(N^2)$의 계산이 필요하므로 전체 프로그램에서 가장 큰 비중을 차지하게 된다. 또한 가속도 계산은 각각의 분자들에 대해서 서로 독립적으로 수행되므로 병렬성이 뛰어나다고 할 수 있다. 따라서 본 연구에서는 각 분자들의 가속도 계산을 병렬화하였다.

각 노드에 분자수를 분할하는 방법은 각각의 노드에서 전체 분자동역학 시뮬레이션 과정 중 한 단계의 계산 시간을 측정하여 그 노드의 성능을 결정하였으며, 측정된 성능에 비례하는 분자들의 가속도 계산을 할당하였다. 이렇게 각 노드에서 계산된 분자들의 가속도는 MPI 함수를 이용하여 종합되어 분자들의 속도와 위치를 결정하게 된다.

Fig. 1에서 볼 수 있듯이 N개의 분자에 대한 가속도 계산을 각각의 노드에 분산하여 수행하고 그 결과를 종합하여 각 분자의 속도와 위치를 계산하였다.

병렬 연산을 위한 PC 클러스터

PC 클러스터란 다수의 PC를 고속네트워크로 연결하고, 적절한 운영체제와 소프트웨어를 설치하여 하나의 고성능 컴퓨터로 활용하는 기술을 의미한다. 각각의 PC는 노드라고 한다. 즉 노드란 하나 또는 그 이상의 마이크로 프로세서, 메모리, 디스크 드라이브를 가지는 계산 요소를 뜻한다. 최초의 클러스터링 프로젝트로서는 1994년 초에 미국의 NASA의 Goddard Space Flight Center에서 Donald Becker에 의해 시작된 Beowulf 프로젝트를 들 수 있다. 최초의 Beowulf 16 노드 클러스터는 우주 과학 프로젝트를 위해서 제작하였으며, 곧 여러 연구실과 대학으로 빠르게 확산되어 갔다. NASA에서 차음으로 개발된 전통적인 Beowulf 시스템은 리눅스를 운영체제로 하는 PC들로 구성되며, 병렬 프로그램 수행시에 나누어진 계산 단위 사이의 상호 신호교환을 위해서는 표준 MPI(message passing interface) 프로토콜을 준수하는 것이 일반적이다. PC 클러스터는 상용의 워크스테이션이나 고성능 슈퍼컴퓨터에 비하여 가격대비 성능이 뛰어남으로 계산 집약적 응용프로그램, 과학적 가시화 프로그램, 대규모

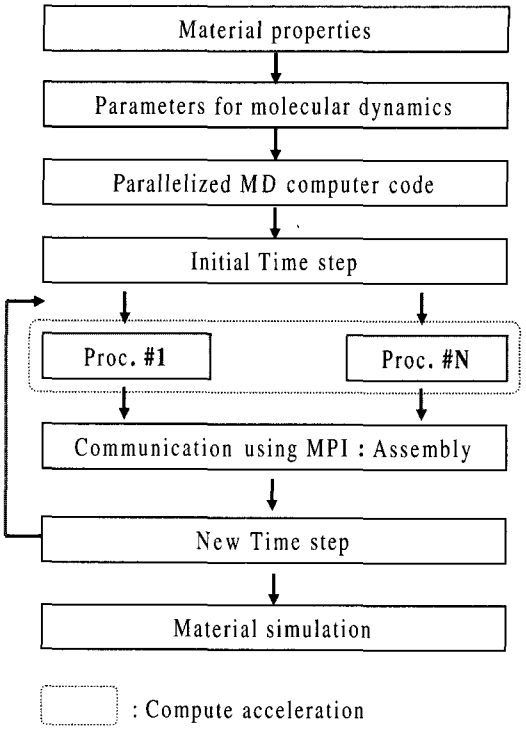


Fig. 1 Flow chart of parallel molecular dynamics simulation using MPI library

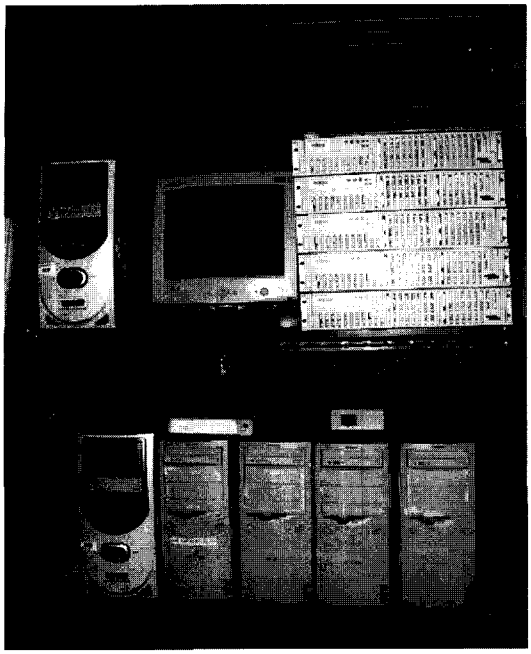


Fig. 2 A PC cluster with Linux operating system

데이터 관리 프로그램 등에 사용될 수 있으며 그 전망은 극히 밝다고 말할 수 있을 것이다.

본 연구실에서는 Fig. 2에서 보이는 바와 같이 모두 11대의 PC를 TCP/IP 기반의 패스트 이더넷 (Fast Ethernet) 네트웍 인터페이스로 묶어서 하나의 PC 클러스터로 제작하였다. 클러스터의 운영체제로서는 안정성과 성능이 잘 알려져 있는 리눅스를 사용하였으며, 각각의 PC를 연결시키기 위하여 fast ethernet network card를 장착하고 switching hub로 연결하였다.

재료 거동에 대한 컴퓨터 시뮬레이션

모서리 균열이 있는 시편

첫 번째 재료 파괴에 대한 분자동역학 시뮬레이션은 Fig. 3에서처럼 한 개의 모서리 균열(single edge crack)이 있는 시편을 인장 시험할 때 발생하는 재료 거동을 모사 하였다. 시편의 형상은 높이 대 너비의 비가 2.1 이고, 초기 균열 길이 대 시편의 너비가 0.25 이며, 시편의 두께 대 너비가 0.23 이다. 가상인장시험을 수행함에 있어서 시편의 인

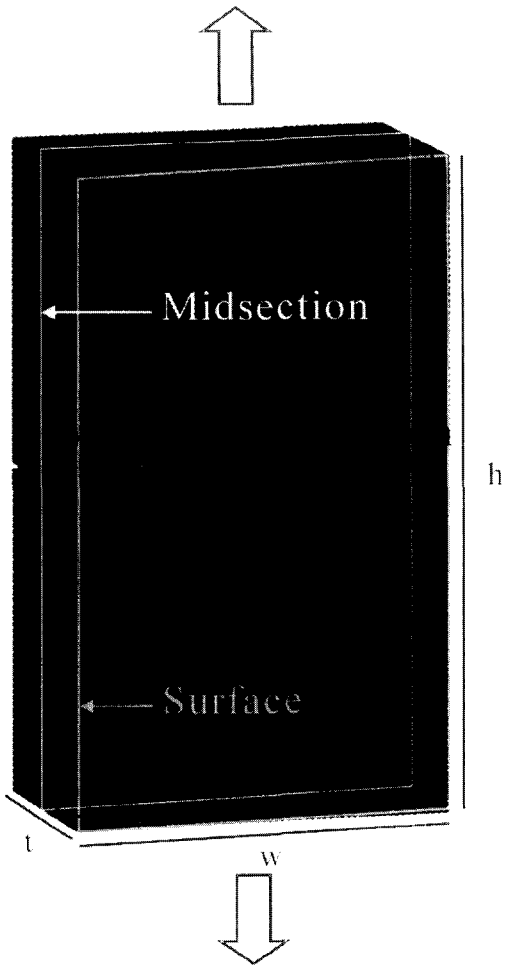
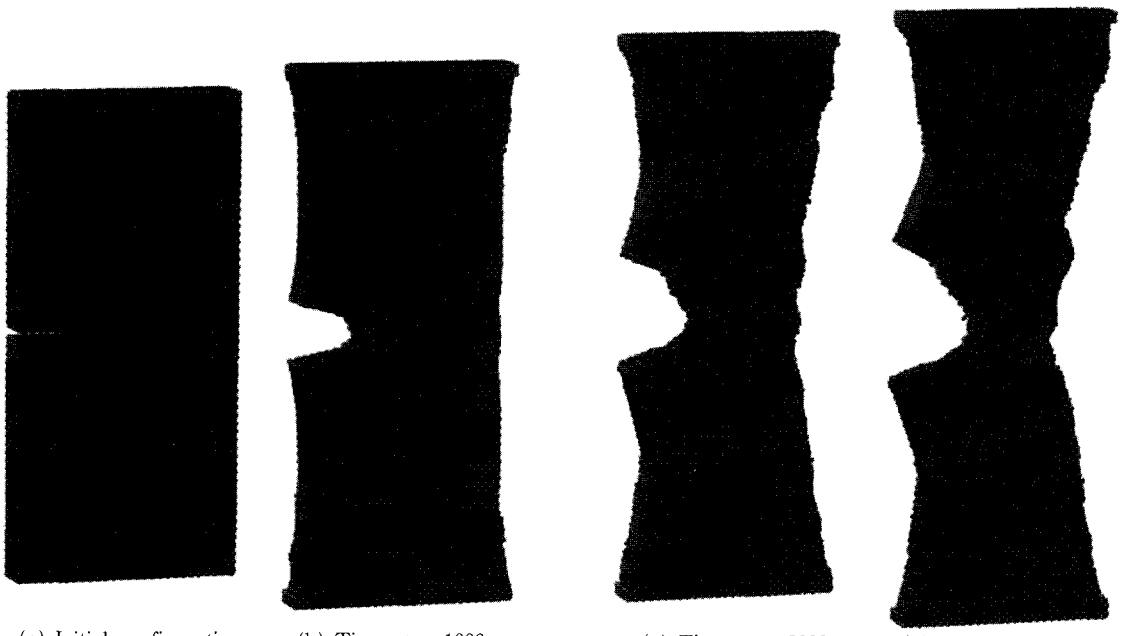


Fig. 3 Initial configuration of a rectangular specimen containing a single edge crack

장속도는 0.5로 일정하게 유지하고 시간 간격($\triangle T$)은 0.01로 하였다. 분자 수 42,770개를 사용하여 구성한 시편에 대한 균열 성장을 나타내는 시뮬레이션 결과는 Fig. 4(a)-(d)에 나타내었으며, 균열의 진전과 확장과정을 시간 간격의 수가 1000, 2000, 그리고 3000 스텝이 지난 후의 결과를 그림으로 나타낸 것이다. 재료 파괴에 대한 시뮬레이션을 통해서 인장 시험이 진행될수록 균열이 커지며 재료가 파괴되는 과정에 들어간 것을 볼 수 있었다. 병렬프로그램을 2-노드에서 수행함으로써 전체 계산과정을 각각의 노드에 배분하여 수행하게 된 결과로 각 노드에 할당되는 계산량을 1/2로 줄일 수 있었다.



(a) Initial configuration (b) Time step=1000 (c) Time step=2000 (d) Time step=3000

Fig. 4 Fracture simulation of a rectangular specimen containing a single edge crack subjected to tension force at the ends

시편의 크기에 따른 2-노드 성능을 분석하기 위해서 분자 수를 각각 2970, 7336, 14670, 26796, 42770개의 5 단계로 구분하여 각각 계산을 수행하였다. 본 논문에서는 각각의 분자 수를 가지는 시편에 대해서 1-노드 시스템과 2-노드 시스템에서의 계산 시간과 효율을 계산하였다. 분자 수의 증가에 따라서 최소 25%에서 최대 49%의 시간 절감을 얻을 수 있었다. 즉 시편을 구성하는 분자의 개수가 증가함에 따라 1-노드 시스템 보다 2-노드를 사용한 경우에 예상했던 대로 더 좋은 성능을 나타냄을 알 수 있었다. 본 연구에서 사용된 클러스터는 각 노드의 성능이 서로 다르기 때문에 속도 향상인자(speedup factor)를 다음과 같이 정의하여 사용하였다.

$$S=\frac{t_1}{t_p} \tag{11}$$

여기서, t_1은 구성 1에서의 실행시간을 나타내며, t_p는 다수의 노드(multi-node), 즉 구성 2나 구성 3에서의 실행시간을 의미한다.

PC 클러스터의 성능 비교

두 번째 시뮬레이션에서는 6-노드 클러스터를 구성 1, 구성 2, 구성 3의 3가지의 다른 구성을 사용하여 계산을 수행하였다. 계산에 사용된 3가지의 다른 클러스터의 구성은 다음과 같다.

- 구성 1 (2-노드) : 펜티엄 III 667MHz×2
- 구성 2 (3-노드) : 구성 1+펜티엄III 733MHz
- 구성 3 (6-노드) : 구성 2+펜티엄III 800MHz×3

각각의 노드에는 패스트 이더넷 NIC(Network Interface Controllers)이 설치되어 있고 패스트 스위칭 허브를 통하여 연결되어 있다.

클러스터를 구성하고 있는 각각의 노드에서의 계산 시간, 동기화 시간, 통신 시간을 upshot 프로그램을 이용하여 Fig. 5에 그래프로 나타내었다. 그림에서 보이는 것은 전체 연산에 사용된 시간을 각 노드에서의 계산 시간과 노드간의 통신 대기 시간 그리고 각 노드에 흩어져 있는 계산 결과를 다시 하나로 묶는데 걸리는 시간을 나타낸 것이다.

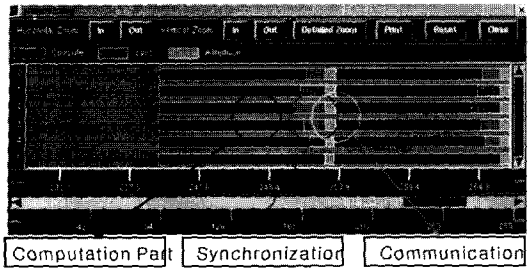


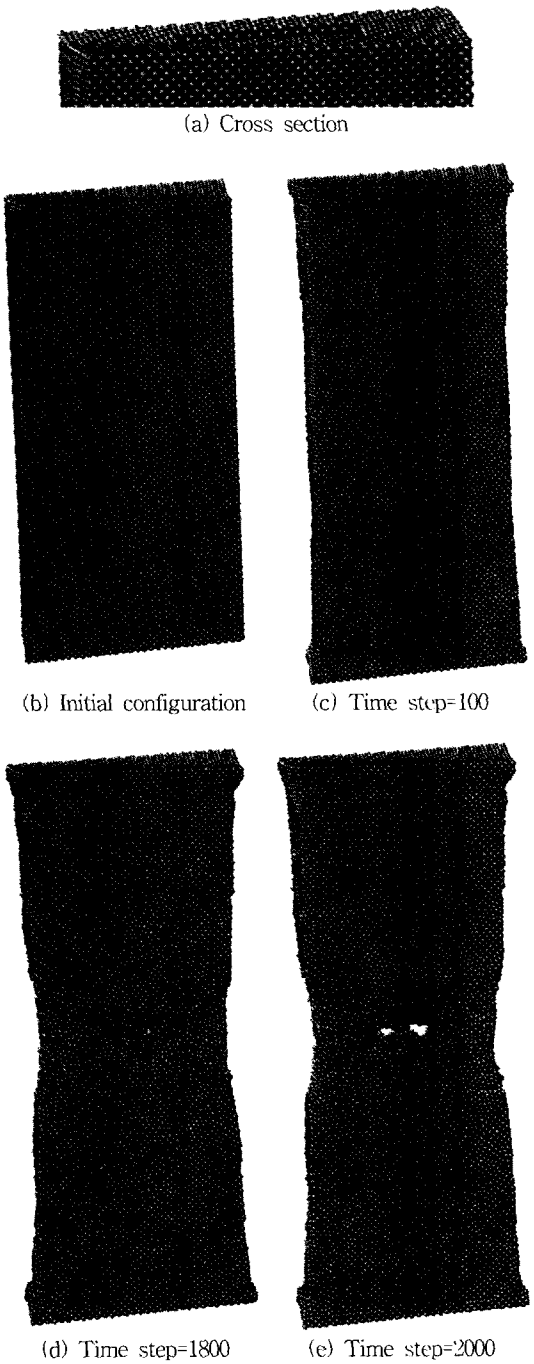
Fig. 5 A graph showing the total elapsed time divided into three different parts, which are the time for computation, synchronization, and communication

이 그래프를 분석함으로써 작성된 병렬프로그램의 적합성과 구성된 클러스터의 성능 변화를 사용자가 알 수 있고 최고의 성능이 나올 수 있도록 클러스터 환경을 최적화시키는데 적절한 정보를 얻을 수 있었다.

관통 균열이 있는 시편

본 연구에서는 Fig. 6(a)에서처럼 내부에 균열이 존재하는 관통 균열이 있는 시편을 인장 시험할 때 발생하는 재료의 거동을 시뮬레이션 하였다. 인장시험을 수행함에 있어서 시편의 인장속도는 0.5로 일정하게 유지하고 시간 간격은 0.01로 하였다. 시편의 구성에 사용된 분자 수의 증가에 따른 PC 클러스터 시스템의 성능을 분석하기 위해서 분자 수를 각각 548, 1,886, 4,524, 9,488, 25,674, 54,124로 구분하여 파괴 시뮬레이션을 수행하였다. 분자 수 54,124개의 시편에 대한 균열 성장을 나타내는 모사 결과는 Fig. 6(b)-(e)에 나타내었다.

Fig. 7에서는 9,488개의 분자를 사용하여 구성 1, 구성 2, 구성 3에서의 전체 실행 시간, 속도향상요소, 그리고 노드간의 상호 통신시간을 나타내었다. 일반적으로 x축을 노드 수로 표시하지만 본 연구에서 사용한 클러스터는 각 노드의 성능이 서로 다르기 때문에 x축을 노드 수로 나타내는 대신에 구성 1의 성능을 기준으로 구성 2, 구성 3의 상대적인 성능비로 표시하였다. 또한 구성 1, 구성 2, 구성 3의 성능은 전체 분자동역학 시뮬레이션 과정 중에서 한 단계의 계산 시간을 측정하여 결정



(a) Cross section

(b) Initial configuration (c) Time step=100

(d) Time step=1800 (e) Time step=2000

Fig. 6 Fracture simulation of a rectangular specimen containing a center crack subjected to tension force at the ends

하였다. 이것은 분자동역학 시뮬레이션이 같은 계산량을 가지는 여러 단계로 이루어지기 때문에 가능

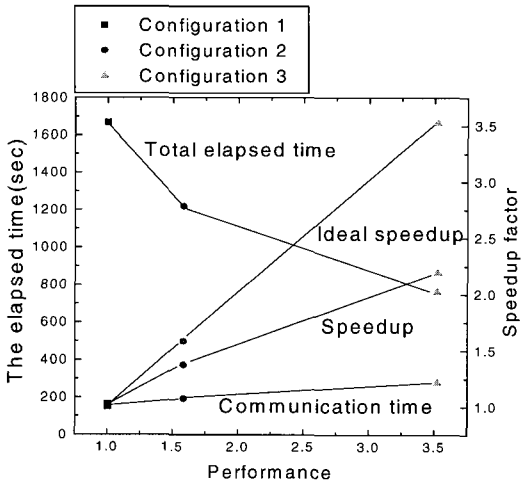


Fig. 7 The elapsed time and communication time versus the performance for three different configurations. The configuration 1, 2 and 3 denote a two-node, three-node, and six-node system, respectively

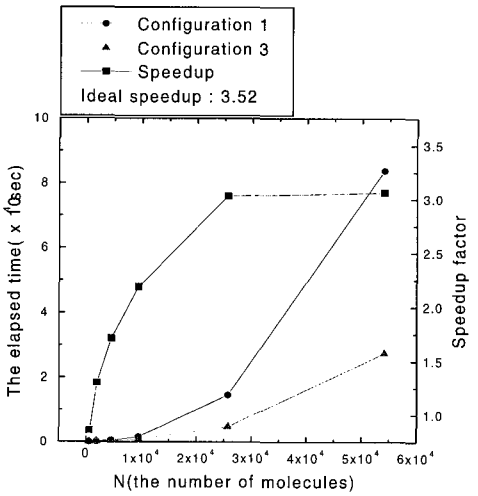


Fig. 8 The elapsed time versus the number of molecules N for two different system configurations(two-node and six-node system). The speedup factor showing performance improvement of the cluster

하였다. 이렇게 해서 얻은 성능비는 구성 1을 1로 보았을 때, 구성 2는 1.58, 구성 3은 3.52이다.

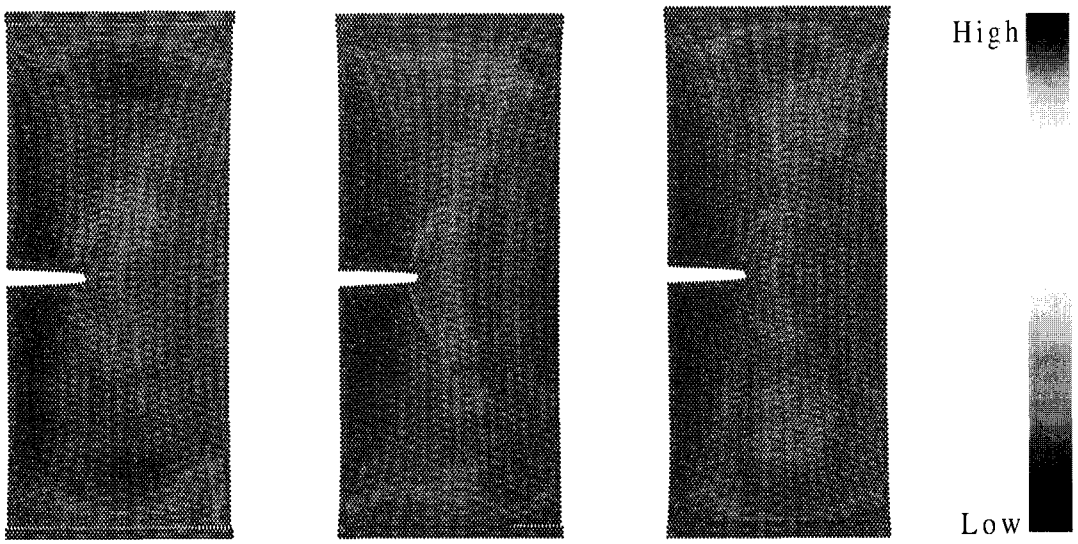
일반적으로 클러스터에 있는 노드의 수가 증가할수록 성능이 향상되는 것으로 기대되지만, 노드 수의 증가에 따라 연산 수행 중에 노드간 통신량의 증가로 인하여 전체적인 효율이 상대적으로 떨어지는 것으로 알려져 있다. 본 연구 결과도 Fig. 7에서 볼 수 있듯이 노드 수가 증가 할수록 전체 계산 시간은 단축되지만 노드간 통신량의 증가로 인하여 실제 속도향상요소와 이상적인 속도향상요소 간의 차가 증가함으로써 전체적인 효율이 감소하는 것을 알 수 있었다.

따라서 대규모의 클러스터를 구축하기 위해서는 노드 수의 증가와 통신속도의 향상이 반드시 동반되어 고려되어야 함을 확인 할 수 있었다.

Fig. 8에서는 시뮬레이션에 사용되는 분자의 개수, 즉 풀고자 하는 문제의 크기와 클러스터의 효율과의 관계를 나타내고 있다. 상대적으로 적은 수의 분자를 사용한 경우에는 노드 수가 6개인 클러스터(구성 3)의 속도향상요소가 1보다 작아서 오히려 효율 상으로는 적은 수의 노드를 사용한(구성 1) 경우보다 떨어지는 것을 알 수 있다. 그러나 시뮬레이션에 사용되는 분자수가 커질수록 상대적으로 노드 수가 많은 클러스터(구성 3)의 속도향상요소는 이상적인 속도향상요소 3.52에 근접하게되어 대규모의 시뮬레이션을 수행하는 경우에 노드 수가 다수인 클러스터의 사용이 필수적인 것을 알 수 있다. 즉 다수의 노드로 구성된 클러스터는 노드간의 통신시간도 증가되겠지만 그 증가로 인한 성능의 감소보다는 노드 수의 증가로 인한 성능의 향상이 더욱 커지게 되어 결과적으로 전반적인 클러스터의 연산능력이 향상되는 것이다.

1,000,000개의 분자를 사용한 재료 시뮬레이션

이번에는 본 연구실에서 구성한 클러스터를 사용하여 약 1,000,000개의 분자를 사용하여 모서리 균열의 진전에 대한 컴퓨터 시뮬레이션을 수행하였다. 여기서는 한 개의 모서리 균열(single edge crack)이 있는 시편을 약 0.3%인장 하였을 때 발생하는 재료 거동을 모사 하였다. 시편의 형상은 높이 대 너비의 비가 1.7이고, 초기 균열 길이 대 시편의 너비가 0.35이며, 시편의 두께 대 너비가 0.63이다. 가상인장시험을 수행함에 있어서 시편의 인장속도는 0.05로 일정하게 유지하고 시간 간격($\triangle T$)은 0.01로 하였다. 분자 수 1,008,700개를 사용하여 구



(a) Surface (b) Half midsection (c) Midsection

Fig. 9 Plastic zones, appearing as light regions, in a cracked plate at (a) the surface, (b) half midsection and (c) midsection of the specimen

성한 시편에 대한 시뮬레이션 결과는 Fig. 9(a)-(c)에 나타내었다. Fig. 9(a)-(c)는 각각 시편의 측면, 중심 단면과 측면의 중간 단면, 중심 단면에 발생하는 소성 영역을 나타낸다. 소성 영역에 대한 그림은 포텐셜 에너지의 높낮이를 다양한 색으로 표시하였으며 에너지의 높낮이는 소성 변형된 부분과 일치되는 것을 볼 수 있었다. 즉 소성 변형된 부분에서 미시적인 분자의 이동이 연속적으로 일어나는 것 현상을 확인할 수 있었으며 이러한 현상들을 실험이 아닌 컴퓨터 시뮬레이션을 통해 모사할 수 있다는 것이 바로 분자 동역학을 사용한 재료 시뮬레이션의 가장 큰 장점이라고 말할 수 있을 것이다.

재료 시뮬레이션에 대한 전망

앞에서 살펴본 바와 같이 재료에 대한 컴퓨터 시뮬레이션은 산업의 발전에 중요한 의미를 가진다. 새로운 재료를 발견하는 것뿐만 아니라 기존에 널리 사용되고 있는 재료에 대한 다양한 거동을 이해하고 예측하기 위해서는 미시적인 해석방법이 필수적이다. 또한 최근에 다양한 분야에서 계발되고 있는 나노 재료에 대한 관심이 증대되고 있다. 이러한 요구에 부응하기 위해서는 적절한 미시적 해석방법을 사용하여 재료에 대한 컴퓨터 시뮬레이션이 가능하도록 많은 연구가 진행되어야 할 것이다. 분자 동역학 기법은 재료에 대한 미시적인 해석을 가능하게 하는 탁월한 방법인 반면에 내재되어 있는 막대한 계산량으로 인하여 실제적인 적용이 어려운 상황이다. 그러나 컴퓨터 기술의 발전이 하루가 다르게 급변하고 있으므로, 머지 않아서 현재의 컴퓨터 기술의 한계로 다가갈 수 없었던 진정한 의미에서의 재료의 분자단위에서의 해석이 가능해 질 것이라고 생각한다. 따라서 현재로서는 재료에 대한 제한된 컴퓨터 시뮬레이션을 보다 정확하고, 안정적이며 신뢰성 있는 해석 방법으로 자리를 잡을 수 있도록 하기 위해서 부단한 연구와 노력이 필요하다고 생각한다.