



혁신적 시뮬레이션 소프트웨어

박혜인 _ 민승재 _ 한양대학교 기계공학부/자동차공학과 _ seungjae@hanyang.ac.kr

현재 활용하고 있는 수치 시뮬레이션 소프트웨어는 미국 및 유럽에서 개발한 제품이 주류를 이루고 있으나 사용자에 따라서 만족스럽지 못한 점이 있다. 여기에 초점을 맞춰 동경대학 생산기술연구소 계산과학기술 연구센터가 중심으로 추진한 “혁신적 시뮬레이션 소프트웨어의 연구개발”¹⁾ 프로젝트는 소프트웨어 개발을 통한 일본 경쟁력 향상을 목표로 하고 있다. 개발한 시뮬레이션 소프트웨어는 무상으로 공개하는 한편, 상용 라이선스 부여도 진행하고 있고 프로젝트의 구체적인 성과로 26개의 수치 시뮬레이션 소프트웨어(최종판)를 완성하였다. (표 1 참조, <http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/rss21/index.html>) 활용 영역은 생명과학 분야, 도시안전 분야 등 폭넓게 망라하고 있으나 비정상 유체해석, 유체해석과 구조해석의 연성해석, 나노스케일의 물성예측과 같이 설계 및 제조 분야를 대상으로 개발한 소프트웨어가 주종을 이룬다.

제품개발에 있어서 수치 시뮬레이션을 활용하여 사전 검토함으로써 시제품 제작이나 실험 회수를 줄일 수 있다. 게다가 수치 시뮬레이션을 활용하면 실험을 재현하는 동등한 검증이 가능할 뿐만 아니라 새로운 현상을 발견하는데 도움이 된다. 이러한 시뮬레이션 계산에 사용할 수 있는 컴퓨터의 성능은 매년 증가하

여 T(tera) FLOPS²⁾에서 P(peta) FLOPS 시대로 발전하는 슈퍼컴퓨터뿐 만 아니라 여러 개의 PC를 접속한 PC클러스터에 의한 병렬계산을 수행하는 등 상당한 계산능력을 이용할 수 있다. “혁신적 시뮬레이션 소프트웨어의 연구개발” 프로젝트에 있어서도 특히 (1) PC 클러스터부터 슈퍼컴퓨터에 이르는 다양한 하드웨어 환경에 유연하게 대처할 수 있는 점, (2) 대규모 병렬 처리기능에 따른 실제품의 복잡한 물리현상을 빠르면서도 정확하게 해석할 수 있는 점, 이 두 가지에 중점을 두었다. 또한 민간기업 등이 구체적인 사례를 이용하여 실제로 시뮬레이션 계산을 수행하고 계산결과를 평가 및 검증하는 등 프로젝트에서 개발한 수치 시뮬레이션 소프트웨어의 실용성도 고려하여 개발하였다. 여기서는 자동차, 우주, 반도체 분야의 세가지 사례를 소개하면서 혁신적 시뮬레이션에 의해 얻을 수 있는 효과에 대하여 설명한다.

¹⁾ 2005년도부터 3년간 문부과학성 “차세대 IT기반구축을 위한 연구개발”로 실시한 프로젝트로 사업규모는 3년간 약 31억엔, 연구인원은 120명×3년간.

²⁾ 1초동안 부동소수점 연산실행 가능 회수로 컴퓨터의 성능을 나타내는 지표의 한가지. 즉 1 TFLOPS는 1초동안 1조(10¹²)번 부동소수점 연산을 실행할 수 있다.

표 1. "혁신적 시뮬레이션 소프트웨어의 연구개발" 프로젝트의 성과 (공개 소프트웨어)

그룹	주제	대표시스템	시스템의 특징, 혁신적/신진적 기능	공개소프트웨어
멀티 퍼지스 · 멀티 스케일 연성	나노물성 재료멀티 스케일기능 시뮬레이션	CHASE -3PT	제1원리 가상포텐셜 밴드계산 소프트웨어 제1원리 가상포텐셜 유전응답해석 소프트웨어 자구시뮬레이터 환경에서 초대규모 나노특성해석 Si기판상에서Ge공급에 따른 성장과정의 멀티스케일 시뮬레이션용 프로그램 양자전도특성계산 프로그램 수경매립원자범(MEAM) 파라미터의 데이터베이스	PHASE Ver.7.00 UVSOR Ver.3.10 MonCafe Ver.1.00 ASCOT Ver.3.0 CAMUS-FSIS Ver.2.0 MEAMDB Ver.1.00
	혁신적범용 연성 시뮬레이	REVOCAP	구조, 유체, 자기장, 열의 각 단일현상해석 소프트 웨어의 연성물리량을 상호 접속한 프로그램 연성해석에 대응한 전후처리기능을 보유한 어플리케이션 고속 대규모 병렬 자기장해석이 가능한 프로그램	REVOCAP_Coupler Ver.1.0 REVOCAP_Mesh Ver.1.0 REVOCAP_Visual Ver.1.0 REVOCAP_Magnetic Ver.1.0
	멀티퍼지스, 유체 시뮬레이션	FrontFlow	난류원인의 다양한 복잡현상해석(연소, 혼상, 소음 등) LES(Large Eddy Simulation)에 의한 대규모, 고정도, 고속해석 입력데이터 작성시 일괄처리를 자동화하기 위한 GUI	FrontFlow/red Ver.3.0 FrontFlow/blue Ver.5.1 FrontFlow/bluc GUI Ver.1.0
	고성능컴퓨터 미 들웨어용 구조해 석 시스템을 아 용한 범용 연성 시뮬레이션	FrontSTR, HEC-MW	대규모병렬처리기능을 활용한 복잡구조물의 고정도, 고속해석 FEM해석, 솔버, 가시화 등의 병렬해석용 library군 FrontSTR의 일부분으로 병렬직접법기능을 추가한 프로그램	Hecmw-PC-Cluster Ver.2.00 FrontSTR Ver.2.01 FrontSTR for WIN Ver.2.01 FronSTR Ver.2.01.pds-beta
공통 기반	전체 시스템 최적화 시뮬 레이션 플랫폼	PSE Workbench	혁신적 시뮬레이션 소프트웨어에서 개발한 소프트 웨어들의 통합플랫폼	PSE Workbench Ver.5.1
생명 현상	신약·바이오·신 기반기술 개발을 위한 단백질 반응 전자시뮬레이션	ProteinDF	세계 최대규모의 단백질 전자계산 단백질 해명에 기여할 다기능통합계산	ProteinDF System Ver.1.4 ProteinDF Ver.1.4 ProteinEditor Ver.1.4
	단백질·화학분 질 상호작용 멀티스케일 시뮬레이션	BioStation	단백질-화학물질(의약품보조물질) 상화작용 통합해석·가시화 FMO(Fragment Molecular Orbital)에 의한 거대 분자계 해석	ABINIT-MP Ver.4.1 BioStation Viewer Ver.8.00 BioStation Launcher Ver.1.5 KiBank
	기관·조직·세포 멀티스케일·멀티 퍼지스 시뮬레이션	M-SphyR	의료영상(CT, MRI)을 이용한 혈관 3차원 표면 데이터 구축 대규모 3차원 멀티스케일 혈류해석 혈관벽의 물질전송해석 혈관과 혈관벽의 유체구조 연성해석	M-SphyR Ver.1.0
도시의 안전· 환경 시뮬레이션	도시의 안전·환경 시뮬레이션	EVE SAYFA	피난모델 통합해석 소화, 이류확산, 연소모델을 중심으로 한 대규모 통합해석	EVE SAYFA Ver.1.2



(a) 정상: 연비(시간평균저항), 주행안정성(시간평균양력)



(b) 비정상: 돌풍안정성, 공력소음, 고속안정성

그림 1. 공력특성

처음 소개할 내용은 「FrontFlow」를 사용한 해석사례로 「FrontFlow」의 특징은 LES(Large Eddy Simulation)방법을 적용하여 난류현상을 비정상상태에서 검증할 수 있는 점 외에 수 천개의 CPU를 이용한 대규모병렬계산도 가능하다. 그림 1은 Mazda 자동차가 실시한 차체의 공력특성 평가를 나타낸다. 연비나 주행안정성은 시간별 저항이나 양력값을 보면 알 수 있으므로 정상상태해석으로 충분하지만, 고속 시 직진안정성이나 돌풍 시 안정성, 풍소음 등을 살펴보기 위해서는 비정상상태해석이 필요하다.³ 예를 들어 고속안정성은 종래 차체의 전면부와 후면부의 양력계수(CL)로 평가하는 것이 일반적이지만, 고속주행 시에는 큰 양력이 발생하여 차체가 들리고 중심이 높아지면서 타이어의 접지압력이 작아져서 안정성이 손상된다. 그런데 동일한 양력계수 값을 갖는 차체라도 고속안정성이 다른 경우가 있다. 차 높이가 동일한 경우, 동일한 속도에서 발생하는 양력은 동일한데도 고

속안정성이 좋지 않은 차체는 왜 그런지 후면부를 고속안정성이 우수한 차체보다 높게 한다. 이와 같이 양력계수 값만으로는 고속안정성을 충분히 평가할 수 없다는 것은 알았는데, 이제까지 확립된 대체수단이 없었다. 차체 주위에 발생한 공기의 흐름에 의하여 차체표면 각 부분에 작용하는 압력을 살펴보기 위해서는 차체 형상을 상당히 자세히 모델링하여 난류를 포함한 비정상 유동을 해석할 필요가 있으나 실용 가능한 소프트웨어가 없었기 때문이다. 이러한 요구에 부합하는 소프트웨어로 개발한 것이 혁신적 시뮬레이션 소프트웨어인 「FrontFlow」이다. Mazda는 차체형상에 있어서 그림 2와 같이 윗면과 측면뿐 아니라 아랫면과 엔진룸 내부까지도 포함시켜 상세한 메쉬를 작성하여 차체전체의 해석모델을 작성한 후, 「FrontFlow」로 비정상상태 해석을 수행하였다. 해석결과로 차체표면의 압력분포는 그림 3(a)와 같고 풍동실험 결과와 거의 일치하고 있다. 고속안정성이 낮은 차체에서 나타나는 차체 후상부 압력이 높은 부분, 바닥에 발생하는 2개의 소용돌이, 전면 필러와 미러 후방에 발생하는 소용돌이의 위치 등을 재현할 수 있다. 그림 3(b)의 유속분포도 마찬가지로 실험결과와 잘 일치하고 있으므로 수치시뮬레이션 결과의 신뢰성을 확인할 수 있다. 또한 과도응답에 따른 비정상 유동해석에도 적용하여 차 높이를 높이거나 낮추는 변화과정에서도 고속안정성이 우수한 차체에서는 후방 유동이 크게 요동치지 않는다는 사실을 경험적으로 알 수 있었다.

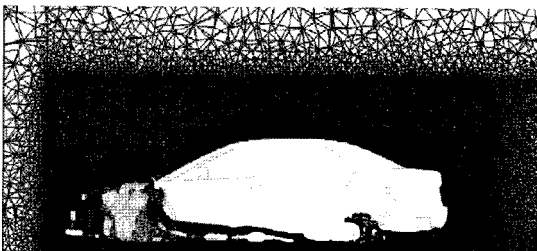


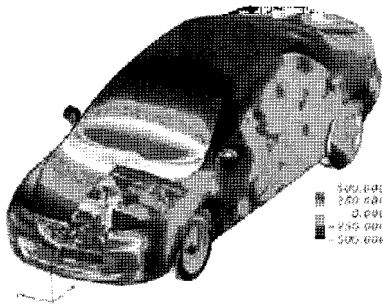
그림 2. 비정상 유동해석에 사용한 해석모델

위래는 차체의 종방향 거동(pitch각 변화)을 검증하고자 했으나 우선 차체를 수평면에 대고 회전시켜 보았다. (yaw각을 변화시킴) 원통형 메쉬 속에 차체를

³ 시간과 함께 온도, 유속, 압력 등이 변화하는 상태(비정상상태)를 계산하는 것이 비정상해석. 정상해석에서는 각 물리량의 시간평균을 구한다. 유동 변화가 급격한 난류의 평가에 있어서 비정상해석은 필수적이다.

배치하고 원통을 회전시킴으로써 차체 움직임의 변화를 표현한다. 그 결과로부터 yaw각이 변할 때 후방 창 뒤쪽에 발생한 소용돌이가 차체로부터 떨어져 나가는 모습을 확인할 수 있었다. Mazda에서는 비정상해석

결과를 분석하면서 고속안정성과 정속성이 우수하고 횡풍에 대해서 안정적인 차체형상을 찾아내고 있다. 향후 pitch각 변화에 따른 과도응답, 노면으로부터 입력변동도: 고려한 공력특성의 수치시뮬레이션에 도전할 예정이다.



(a) 압력분포



(b) 속도분포

그림 3. 차체 주변의 비정상 유동해석 결과

두번째는 JAXA(일본우주항공연구개발기구)의 H-II A 로켓트 엔진 LE_7A에 적용한 사례이다. 종래 로켓트 엔진 개발에는 10년에 걸쳐 10개의 엔진을 시험 제작하여 설계를 검증하였다. 따라서 개발기간뿐만 아니라 가격면에서도 큰 과제이다. 차기 로켓트 엔진인 LE-X에서는 개발기간, 가격 모두 종래보다 대폭적인 효율화가 요구되어 적용가능성을 검증하기 위하여 LE-7A에 시행하였다. 'FrontFlow'를 적용한 것은 그림 4와 같은 LE-7A엔진의 액체수소 터보펌프 및 액체산소 터보펌프이다. 양쪽 모두 비정상유동을 높은 정확도로 해석하는 것이 필요하고 이러한 유체해석 결과(압력변동)를 하중조건으로 하여 구조체의 진동해석을 수행하는 연성해석도 실시하고 있다.

액체수소 터보펌프에는 케이싱에(임펠러 날개 개수 × 회전수)의 주파수 진동이 발생하고 있으므로 제작상의 개체 차이에 의해서 다른 부품이 공진할 가능성도 있다. 실제 공진이 원인이 된 파손이 개발시험에서 발생한 사례가 있고 가격이 대폭 증가하는 원인이 되고 있다. 한편 액체산소 터보펌프에는 유도기에

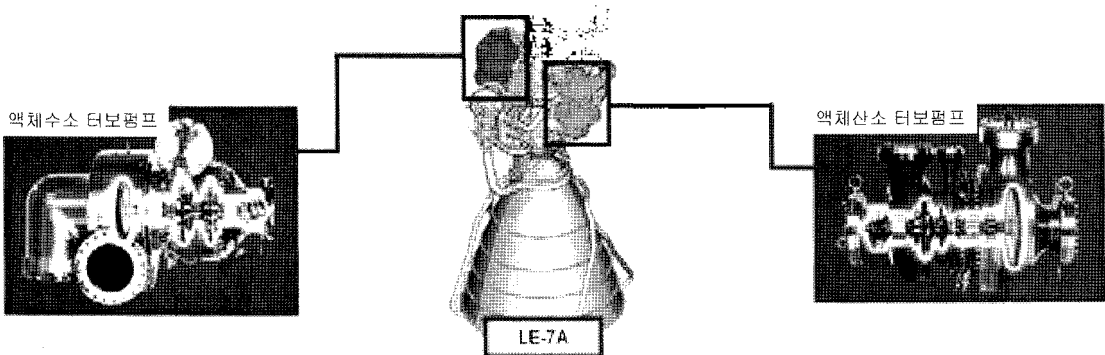


그림 4. LE-7A 구조

서 발생하는 역류소용돌이 캐비테이션이 문제가 되고 있다. 이러한 캐비테이션은 비정상유동이기 때문에 평가가 어렵고 경우에 따라서는 축진동이 지나치게 크게 되므로 수거하여 수리할 필요가 있다. 시행착오에 따른 점진적 개선이 진행되고 있지만, 확실히 발전하기 위해서도 높은 정밀도의 시뮬레이션이 필요하다. 또한 액체수소 터보펌프에는 우선 펌프를 구성하는 유도기와 두개의 임펠러, 이들을 구동하는 터빈을 각

각 해석모델로 작성하고 수치시뮬레이션으로 압력변동을 구한다. 그 결과를 주파수해석하여 예상대로 (임펠러 날개 개수 × 회전수)의 주파수에서 진동최대값을 알 수 있다. 따라서 구조해석과 연성하여 해석해보면 시험에서 얻을 수 있었던 케이싱 진동에 의한 주파수나 기속도와 일치하는 것을 확인할 수 있고 설계 평가에 이용할 수 있는 수준의 정밀도라는 것을 확인할 수 있다. 향후 해석을 선행하여 설계 초기에 불일치 모드를 찾아내어 회피하는 설계도 가능하리라 예상된다. 한편 액체산소 터보펌프에도 마찬가지로 압력변동으로부터 구조해석을 연성시켜 실험결과와 비교하여 설계평가에 이용할 수 있는 수준임을 확인하였다. 게다가 진동의 원인이 된 역류소용돌이 캐비테이션 발생도 그림 5와 같이 시뮬레이션 결과를 통하여 볼 수 있다. 이러한 현상을 수치시뮬레이션으로 파악하면서 설계를 진행함으로써 수리나 폐기와 같은 낭비없이 신뢰성 높은 설계가 가능하게 된다고 보고 있다.

세번째는 나노시뮬레이션 사례이다. 혁신적 시뮬레이션 프로젝트에서는 원자가 나노스케일(수십 또는 수

캐비테이션

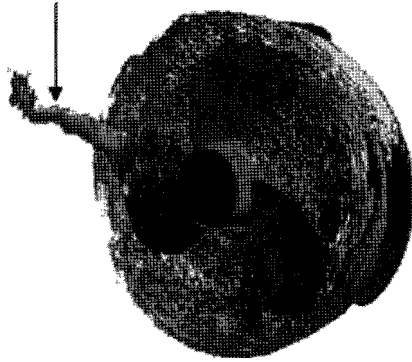
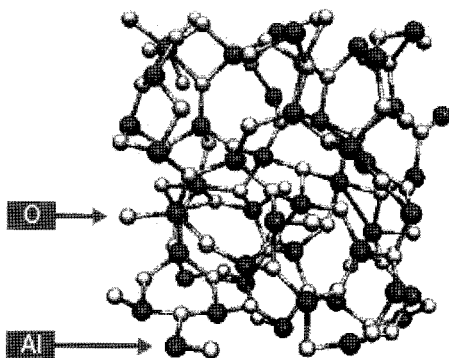
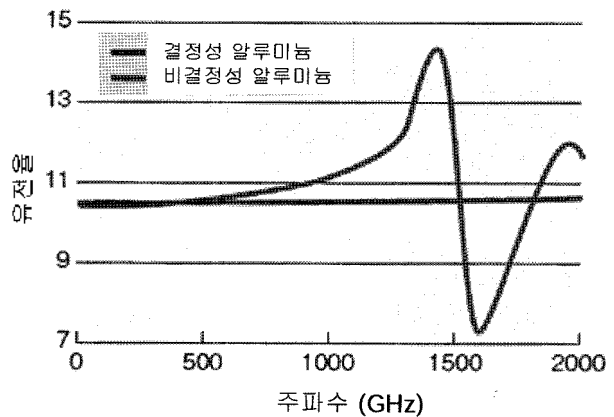


그림 5. 액체산소 터보펌프 해석결과



(a) 비결정 알루미늄(Al_2O_3) 모델 구조



(b) 유전손 비교

그림 6. 알루미늄 결정과 비결정의 유전손

백개)로 정렬된 것과 같은 구조를 다루기 위한 시뮬레이션 소프트웨어를 개발하였다. 예를 들어 차세대 반도체 디바이스 개발에 이용하는 것을 목표로 디바이스를 구성하는 반도체나 절연체, 금속 등의 재료물성을 최적화하고 여러가지 박막구조나 계면구조를 실현하고 첨가하는 불순물 등을 원자수준에서 제어하는 일이 필요하다.

여기서 우선 시뮬레이션에 요구되는 것이 “제1원리 계산”이라고 일컫는 전자상태까지를 고려한 계산방법이다. 이번 프로젝트에서 개발한 소프트웨어「PHASE」에는 이전 수백원자 정도의 크기가 한계인 계산규모를 확대함과 동시에 병렬계산을 활용하여 처리속도를 향상시켰다. 그 계산 예가 그림 6과 같은 유전률이 높은 재료(high-k재료)의 불성예측이다. 이 계산결과에 따라서 그림 6과 같이 THz(1000GHz)이상의 고주파 영역에서 비결정질의 알루미늄은 결정질의 알루미늄과는 다른 성질을 나타내는 것을 알 수 있다. 이러한 계산을 반복함으로써 최적의 재료의 검색이 단기간에

실현 가능하게 된다. 또한 비결정성과 결정성 각각의 알루미늄의 유전율을 계산할 수 있는 소프트웨어「UVSOR」도 혁신적 시뮬레이션 프로젝트를 통하여 새롭게 개발되었다.

나노시뮬레이션에서는 제1원리에 기초한「PHASE」뿐만 아니라 보다 큰 스케일 대상도 해석할 수 있도록 고전적인 분자동력학법과 제1원리를 혼용한「CAMUS」라는 소프트웨어도 개발하였다. 이것들을 조합해서 멀티스케일 해석을 연계시킴으로써 나노 수준의 불성을 집적하여 실제 제품 크기의 특성을 예측할 수 있다.



본 기사는 한양대학교 기계공학부/자동차공학과 민승재 편집위원이 NIKKEI MONOZUKURI 2008년 3월호 연재기사에서 발췌하였으며, 출판사인 Nikkei Business Publications, Inc.의 연락처는 다음과 같다.

Fax: 81-3-5210-8122

URL: <http://techon.nikkeibp.co.jp/Monozukuri>