

외연적 적분 기법을 적용한 Fully Flexible Cell 분자 동역학 시뮬레이션

Explicit time integration algorithm for fully flexible cell simulation

박시동* · 조맹효**

Park, Shi-Dong · Cho, Maenghyo

ABSTRACT

Fully flexible cell preserves Hamiltonian in structure, so the symplectic time integrator is applied to the equations of motion. Primarily, generalized leapfrog time integration (GLF) is applicable, but the equations of motion by GLF have some of implicit formulas. The implicit formulas give rise to a complicate calculation for coding and need an iteration process. In this paper, the time integration formulas are obtained for the fully flexible cell molecular dynamics simulation by using the splitting time integration. It separates flexible¹⁾ cell Hamiltonian into terms corresponding to each of Hamiltonian term, so the simple and completely explicit recursion formula was obtained. The explicit formulas are easy to implementation for coding and may be reduced the integration time because they are not need iteration process. We are going to compare the resulting splitting time integration with the implicit generalized leapfrog time integration.

Keywords: *splitting time integrator, symplectic integration, molecular dynamics, Flexible cell.*

1. 서론

분자동역학이란 물질의 분자들의 상호 작용력을 통한 거동을 계산함으로써 통계적인 바탕을 통해 시스템의 특성을 해석하는 방법 중의 하나이다. 그러나 물질을 이루는 전체 원자 개수를 통하여 전산 모사를 하는 것은 현재 컴퓨터의 성능으로는 아직도 가능하지 않으므로 앙상블 전산모사를 수행하여 거시적 성질을 예측하고 있다. 또한 이방성 재료의 응력에 따른 기계적인 성질을 파악하기 위해서는 앙상블의 셀 형상 변화를 고려한 N σ T 앙상블 전산 모사가 필요하다.

Hernandez⁽¹⁾는 Souza and Martins⁽²⁾의 NPH 앙상블과 Nose-Poincare 해밀토니안⁽³⁾을 결합하여 N σ T 해밀토니안을 유도하였으며, 이는 정준 심플렉틱 구조를 유지하므로 심플렉틱(symplectic) 시간 적분의 적용이 가능하다. 그러나 Nose-Poincare 해밀토니안의 경우 정온기(thermostat)와 정압기(barostat)의 공액변수가 결합되어 있으므로 외연적(explicit) 시간 적분 알고리즘의 존재가 명확하지 않다. 그래서 Hernandez는 일반화된 리프로그 시간적분 방법을 통해 내제적(implicit) 식을 적용하였다.

Nose⁽⁴⁾는 Nose-Poincare thermostat 을 시간 확장자(time propagator) 을 이용한 향상된 심플렉틱 시간적

* 학생회원 · 서울대학교 기계항공공학부 석사과정 E-mail: psd20@snu.ac.kr

** 정회원 · 서울대학교 기계항공공학부 부교수 E-mail: mhcho@snu.ac.kr

분법(improved time integrator)을 제안하였다. 이는 각각의 해밀토니안 항에 해당하는 올바른 시간 확장자(time propagator)를 분할한다면 간단하고 외연적(explicit)인 새로운 식을 얻을 수 있음을 보여주었다.

본 논문의 연구 목표는 $N\sigma T$ 해밀토니안에 대해 Nose의 향상된 심플렉틱 적분(improved symplectic integration) 방법을 적용하여 간단하며 time-reversibility를 만족하는 외연적(explicit) 알고리즘을 개발하는 것이다. 3장에서는 외연적(explicit) 알고리즘을 통해 인장응력과 전단응력 하에서의 전산 모사 결과를 보이고 본 논문의 방법에서 제시하는 외연적 방법의 결과와 일반화된 내재적(implicit) 립프로그 방법을 통한 전산 모사 결과와 비교, 분석하였다.

2. 방법론

2.1. $N\sigma T$ 해밀토니안

Nose 해밀토니안의 Poincare 변환에 의한 확장된 해밀토니안은 다음과 같다.

$$\tilde{H} = (H - H_0)s \tag{1}$$

이 변환을 통해 다음과 같은 $N\sigma T$ 해밀토니안이 유도된다.

$$\tilde{H} = s \left[\sum_i \frac{P_{is} P_i^\alpha}{2m_i s^2} + U(q_i, G) + \frac{P_\beta^\alpha P_\alpha^\beta}{2M_G \det G} + P_{ext} \sqrt{\det G} + \frac{1}{2} \sigma_{ext}^{\beta\alpha} G_{\alpha\beta} + \frac{P_s^2}{2M_s} + gk_B T_{ext} \ln s - H_0 \right] \tag{2}$$

s 는 정온기(thermostat)의 위치 변수이며, P_s 는 s 의 공액 모멘텀(conjugate momentum)이다. $G_{\alpha\beta}$ 는 전산 모사 셀 벡터를 이용한 메트릭 텐서이며, $P_{\alpha\beta}$ 는 $G_{\alpha\beta}$ 의 공액 모멘텀(conjugate momentum)이다. $\sigma_{ext}^{\beta\alpha}$ 는 반 변 격자 좌표계(contravariant lattice coordinate)의 외부 응력 성분을 나타내며, P_{ext} 와 T_{ext} 는 각각 외부 압력과 외부 온도를 나타낸다. H_0 는 초기 해밀토니안이다.

2.2. 향상된 심플렉틱 적분을 이용한 적분식

위상공간 $\Gamma = (q_1, q_2, \dots, q_N, p_1, p_2, \dots, p_N, s, p_s)$ 에서 임의의 변수에 대한 시간 t 에서 $t + \Delta t$ 까지의 변화는 다음과 같이 기술된다.

$$A(t + \Delta t) = P(t, \Delta t)A(t) \tag{3}$$

시간 확장자 $P(t, \Delta t)$ 와 그 작용소 D_H 는 다음과 같이 정의된다.

$$P(t, \Delta t) = \exp[D_H \Delta t] = \frac{dA}{dt} \tag{4}$$

$$D_H = \sum_i \dot{\Gamma}_i \frac{\partial}{\partial \Gamma_i} \tag{5}$$

시간 확장자는 일반적으로 그 계산이 매우 어렵다. 그러나 심플렉틱 적분 알고리즘에서는 분할된 시간 확장자의 중첩으로 쉽게 계산이 가능하다

$$P(t, \Delta t) = \exp[D_H \Delta t] \approx \exp\left[D_H, \frac{\Delta t}{2}\right] \exp\left[D_H, \frac{\Delta t}{2}\right] \exp\left[D_H, \frac{\Delta t}{2}\right] \exp\left[D_H, \frac{\Delta t}{2}\right] \exp\left[D_H, \Delta t\right] \exp\left[D_H, \frac{\Delta t}{2}\right] \exp\left[D_H, \frac{\Delta t}{2}\right] \exp\left[D_H, \frac{\Delta t}{2}\right] \exp\left[D_H, \frac{\Delta t}{2}\right] \exp\left[D_H, \frac{\Delta t}{2}\right] \tag{6}$$

이렇게 분할된 H 의 중첩에 의한 방법으로 2차 적분식을 얻을 수 있다.⁽⁵⁾ $N\sigma T$ 해밀토니안 시스템에서는 H 를 다음과 같이 분할하는 것이 적절하다.

$$H = H_1 + H_2 + H_3 + H_4 + H_5,$$

$$H_1 = sU(q_i, G), H_2 = s \left[\sum_i \frac{P_i^\alpha P_i^\alpha}{2m_i s^2} + gk_B T_{ext} \ln s - H_0 \right], H_3 = s \frac{P_\beta^\alpha P_\alpha^\beta}{2M_G \det G}, H_4 = s \left[P_{ext} \sqrt{\det G} + \frac{1}{2} \sigma_{ext}^{\beta\alpha} G_{\alpha\beta} \right], H_5 = s \frac{P_s^2}{2M_s} \quad (7)$$

위에서 분할한 각 해밀토니안의 항 중 H_1, H_2, H_4 항 작용자의 외연적(explicit) 형태는 다음과 같다

$$D_{H_1} = \sum_i \dot{\Gamma} \frac{\partial}{\partial \Gamma} = \sum_i \left(\frac{\partial H_2}{\partial q_i^\alpha} \frac{\partial}{\partial p_{i\alpha}} \right) - \frac{\partial H_2}{\partial G_{\alpha\beta}} \frac{\partial}{\partial p^{\alpha\beta}} - \frac{\partial H_2}{\partial s} \frac{\partial}{\partial p_s} = -s \left(\sum_i \frac{\partial U}{\partial q_i^\alpha} \frac{\partial}{\partial p_{i\alpha}} + \frac{\partial U}{\partial G_{\alpha\beta}} \frac{\partial}{\partial p^{\alpha\beta}} \right) - U \frac{\partial}{\partial p_s} \quad (8)$$

$$D_{H_2} = \sum_i \dot{\Gamma} \frac{\partial}{\partial \Gamma} = \sum_i \left(\dot{q}_i^\alpha \frac{\partial}{\partial q_i^\alpha} + \dot{p}_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial p_{i\alpha}} \right) + \dot{s} \frac{\partial}{\partial s} + \dot{p}_s \frac{\partial}{\partial p_s} + \dot{p}^{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial p^{\alpha\beta}} + \dot{G} \frac{\partial}{\partial G}$$

$$= \sum_i \left(\frac{\partial H_2}{\partial p_{i\alpha}} \frac{\partial}{\partial q_i^\alpha} - \frac{\partial H_2}{\partial q_i^\alpha} \frac{\partial}{\partial p_{i\alpha}} \right) + \frac{\partial H_2}{\partial p_s} \frac{\partial}{\partial s} - \frac{\partial H_2}{\partial s} \frac{\partial}{\partial p_s} + \frac{\partial H_2}{\partial p_{\alpha\beta}} \frac{\partial}{\partial G} - \frac{\partial H_2}{\partial G_{\alpha\beta}} \frac{\partial}{\partial p^{\alpha\beta}}$$

$$= \sum_i \frac{P_i^\alpha}{m_i s} \frac{\partial}{\partial q_i^\alpha} + s \sum_i \frac{P_i^\alpha P_i^\alpha}{2m_i s^2} \frac{\partial}{\partial p^{\alpha\beta}} - \left(-\sum_i \frac{P_{i\alpha} P_i^\alpha}{m_i s^2} + gk_B T \ln s - H_0 + gk_B T \right) \frac{\partial}{\partial p_s} \quad (9)$$

$$D_{H_4} = \sum_i \dot{\Gamma} \frac{\partial}{\partial \Gamma} = -\frac{\partial H_4}{\partial G_{\alpha\beta}} \frac{\partial}{\partial p^{\alpha\beta}} - \frac{\partial H_4}{\partial s} \frac{\partial}{\partial p_s}$$

$$= -s \left[\frac{1}{2} P_{ext} \sqrt{\det G} G^{\beta\alpha} + \frac{1}{2} \sigma_{ext}^{\beta\alpha} \right] \frac{\partial}{\partial p^{\alpha\beta}} - \left(P_{ext} \sqrt{\det G} + \frac{1}{2} \sigma_{ext}^{\beta\alpha} G_{\alpha\beta} \right) \frac{\partial}{\partial p_s} \quad (10)$$

위 세 항들은 공역 변수(conjugate pair)의 결합이 없기 때문에 각 변수의 계산에서 Δt 의 제곱항 이상이 모두 사라지게 된다. 따라서 시간 적분 계산을 간단하게 할 수 있다. 또한 H_3 의 P_s 경우의 역수에 의한 계산과 H_3 의 보존을 이용하여, 적분 계산을 수행할 수 있다.⁽⁴⁾ 그러나 H_5 의 경우 공역 변수(conjugate pair) 결합 항이 있으므로 시간 확장자의 테일러 전개에 의한 계산이 필요하다. 위상 공간에서 일반적으로 다음과 같은 식이 성립된다

$$\frac{du}{dt} = [u, H]$$

$$u(t) = u_0 + t[u, H]_0 + \frac{t^2}{2!} [[u, H], H]_0 + \frac{t^3}{3!} [[[u, H], H], H]_0 \dots \quad (11)$$

u 는 임의의 변수를 나타내고, H 는 보존되는 해밀토니안을 나타낸다. 위 식을 H_5 의 각 변수에 Δt 로 적용하면 위상공간에서의 각 변수 계산이 된다. H_5 항의 테일러 전개에 의한 식을 Δt 제곱항 까지만 나타내면 다음과 같다.

$$G(t + \Delta t) = G(\Delta t) + [G, H] \Delta t + [[G, H], H] \Delta t^2 \dots$$

$$= G_{\alpha\beta} + s \frac{P_{\alpha\beta}}{M_G \det G} \Delta t + \left(\frac{s}{M_G \det G} \right)^2 \left(G_{\beta\lambda} P^{\omega\lambda} P_{\alpha\omega} + G_{\alpha\gamma} P^{\eta\omega} P_{\beta\omega} \right. \\ \left. - G_{\alpha\zeta} G_{\beta\omega} P_\eta^\zeta P_\gamma^\omega G^{\omega\zeta} + G_{\alpha\zeta} G_{\beta\omega} P^{\omega\zeta} G_{\omega\mu} P^{\mu\zeta} \right) \Delta t^2 \dots \quad (12)$$

$$P(t + \Delta t) = P(t) + [P, H] \Delta t + [[P, H], H] \Delta t^2 \dots$$

$$= P^{\alpha\beta} + \frac{s}{M_G \det G} \left(P_\gamma^\lambda P_\lambda^\gamma G^{\alpha\beta} - P^{\beta\lambda} G_{\lambda\mu} P^{\mu\alpha} \right) \Delta t$$

$$+ \left(\frac{s}{M_G \det G} \right)^2 \left(-P_\gamma^\lambda P_\lambda^\gamma G^{\omega\beta} P_{\zeta\omega}^\alpha - P^{\beta\zeta} P^{\omega\alpha} P_{\zeta\omega}^\alpha + G_{\omega\mu} P^{\mu\alpha} P_\gamma^\lambda P_\lambda^\gamma G^{\omega\beta} + P^{\beta\lambda} G_{\lambda\mu} P_\gamma^\lambda P_\lambda^\gamma G^{\alpha\mu} \right. \\ \left. - P_{\zeta\omega}^\alpha G^{\alpha\beta} P_\gamma^\lambda P_\lambda^\gamma G^{\omega\zeta} - G_{\omega\mu} P^{\mu\alpha} P^{\omega\lambda} G_{\lambda\mu} P^{\mu\beta} - P^{\beta\psi} G_{\psi\zeta} P^{\alpha\zeta} G_{\lambda\mu} P^{\mu\zeta} + P_{\zeta\omega}^\alpha G^{\alpha\beta} P^{\omega\lambda} G_{\lambda\mu} P^{\mu\zeta} \right) \Delta t^2 \dots \quad (13)$$

$$P_s(t+\Delta t) = P_s(\Delta t) + [P_s, H]\Delta t + [[P_s, H], H]\Delta t^2 \dots = P_s(\Delta t) + \frac{P_\gamma^\lambda P_\lambda^\gamma}{M_G \det G} \Delta t \quad (14)$$

$G_{\alpha\beta}$ 와 $P^{\alpha\beta}$ 에서 Δt 제곱 이상의 항이 계속 존재하게 된다. 그러나 Δt 의 단위가 매우 작으므로 3차항 이상에 의한 변화량은 크지 않다. 또한 스텝 당의 변화폭이 커지더라도 몇 십만 스텝의 적분을 통하여 거시적인 특성을 파악할 수 있다면, 계산 시스템의 전산자원의 확보를 위해 Δt 의 세제곱 이상의 항을 생략하는 것이 적절한 선택이다. 분할된 각 헤밀토니안 항의 적분은 아래와 같다. 밀의 적분 식들과 식 (6)을 종합하면 최종 적분식을 다음과 같이 얻어낼 수 있다.

$$H_5 \quad \left[\begin{array}{l} s^{n+1} = s^n \left(\frac{p_s^n \Delta t}{2Q} \right)^2 \quad p_s^{n+1} = p_s^n / \left(\frac{p_s^n \Delta t}{2Q} \right) \end{array} \right] \quad (15)$$

$$H_4 \quad \left[\begin{array}{l} (p^{\alpha\beta})^{n+1} = (p^{\alpha\beta})^n - s^n \left[\frac{1}{2} P_{ext} \sqrt{\det G^n} (G^{\beta\alpha})^n + \frac{1}{2} \sigma_{ext}^{\beta\alpha} \right] \frac{\Delta t}{2} \quad / \quad p_s^{n+1} = p_s^n - \left(P_{ext} \sqrt{\det G^n} + \frac{1}{2} \sigma_{ext}^{\beta\alpha} (G_{\alpha\beta})^n \right) \frac{\Delta t}{2} \end{array} \right] \quad (16)$$

$$H_3 \quad \left[\begin{array}{l} (G_{\alpha\beta})^{n+1} = (G_{\alpha\beta})^n + s^n \frac{(p^{\alpha\beta})^n}{M_G \det G^n} \Delta t \quad / \quad p_s^{n+1} = p_s^n + \frac{P_\gamma^\lambda P_\lambda^\gamma}{M_G \det G^n} \Delta t \\ (p^{\alpha\beta})^{n+1} = (p^{\alpha\beta})^n + \frac{s^n}{M_G \det G^n} (P_\gamma^\lambda P_\lambda^\gamma G^{\alpha\beta} - p^{\beta\lambda} G_{\lambda\mu} p^{\mu\alpha}) \Delta t \end{array} \right] \quad (17)$$

$$H_2 \quad \left[\begin{array}{l} (q_i^\alpha)^{n+1} = (q_i^\alpha)^n + \frac{(p_i^\alpha)^n}{m_i s^n} \Delta t \quad / \quad (p^{\alpha\beta})^{n+1} = (p^{\alpha\beta})^n + s^n \frac{P_i^\alpha P_i^\alpha}{2m_i (s^n)^2} \Delta t \\ p_s^{n+1} = p_s^n - \left(- \sum_i \frac{P_i^\alpha P_i^\alpha}{m_i (s^n)^2} + g k_B T \ln s^n - H_0 + g k_B T \right) \Delta t \end{array} \right] \quad (18)$$

$$H_1 \quad \left[\begin{array}{l} (p_i^\alpha)^{n+1} = (p_i^\alpha)^n - s^n \left. \frac{\partial U}{\partial q_i^\alpha} \right|_n \frac{\Delta t}{2} \quad (p^{\alpha\beta})^{n+1} = (p^{\alpha\beta})^n - s^n \left. \frac{\partial U}{\partial G_{\alpha\beta}} \right|_n \frac{\Delta t}{2} \\ p_s^{n+1} = p_s^n - U \Big|_{q_i^\alpha = n, G_{\alpha\beta} = n} \frac{\Delta t}{2} \end{array} \right] \quad (19)$$

3. 전산 모사 결과

3.1. 알고리즘의 확인

시뮬레이션은 구리 원자를 6*6*6 의 864개를 F.C.C 구조로 두고 초기 단위 셀의 격자길이는 3.62Å로 하였다. X, Y, Z,방향에 대해 주기 경계조건(Periodic Boundary Condition)을 부가하였으며, $N\sigma T$ 시뮬레이션을 위해 임의의 전단파 인장 조건을 부가하였다. 또한 구리 원자 간의 상호작용은 L-J potential 을 이용하였으며, 초기 속도는 비리얼 이론에 따라 300K에 맞는 속도와 방향을 임의로 부여하였다. 외부 압력은 0.1MPa 대기압 상태로 하여 시뮬레이션 하였다.

헤밀토니안 운동 방정식에는 2개의 가상질량이 포함되는데 시뮬레이션 셀의 운동과 관련된 상수인 M 은 0.001로 설정하였고 Q는 0.1로 설정하였다. 이 두 변수는 각각 셀의 진동주기 및 진폭 그리고 온도 제어들

위한 Thermostat 자유도의 진동주기 및 진폭에 영향을 미친다.

그림 1.은 4,000 스텝 동안의 해밀토니안 에너지의 변화와 온도 변화를 보여준다. 한 스텝은 0.5 펨토초이고 다른 에너지의 진동에 비해 해밀토니안은 0 으로 거의 진동 없이 유지되는 것을 볼 수 있다. 또한 온도의 경우 진폭의 변화가 크긴 하지만 일정하게 유지되는 것을 알 수 있다. 온도의 평균값은 300.7K 로 초기 설정 값이 300K 와 차이가 거의 없음을 알 수 있다. 그림 2.는 분자동역학의 기반이 되는 통계적 방법에서 중요한 온도에 따른 원자들의 맥스웰 볼츠만 속도 분포를 나타낸다.

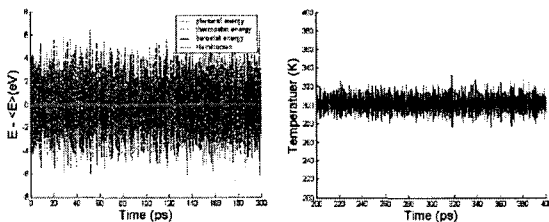


그림 1. 구리의 해밀토니안 변화와 온도 변화

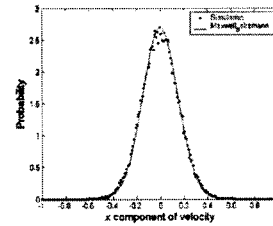


그림 2. x 방향의 맥스웰 볼츠만 속도 분포

양상불 시뮬레이션은 에르고딕 가설을 기반으로 한다. Ergodic 가설이란, 시스템 전체의 평균을 취하는 대신 일부분의 충분히 많이 반복한 결과의 평균이 같음을 뜻한다. 이러한 Ergodic 가설을 위해서는 $\langle \frac{E^2}{M^2} \rangle = kT$ 를 만족해야 한다. kT 의 무차원화된 값은 0.06611 이고 4000스텝 동안의 $\langle \frac{E^2}{M^2} \rangle$ 의 값은 0.06583 이었다. 따라서 Ergodic 가설을 충분히 만족시킨다고 할 수 있다.

위의 결과들을 보고 판단하였을 때 분할 적분 기법을 이용한 외연적(explicit) 알고리즘은 통계적으로 올바르다고 판단할 수 있다. 또한 원자간의 포텐셜 계산을 줄일 수 있었으므로 보다 빠른 시뮬레이션이 가능한 신뢰성 있는 알고리즘이라고 할 수 있다.

시뮬레이션은 cpu 3.0Gb , ram 1Gb인 PC에서 수행되었다. 같은 성능 상에서 각 적분을 통한 계산 시간을 비교해 보면 다음과 같다.

표 1 스텝당 시뮬레이션 시간 비교

Integration	splitting	GLF
Time per one step	0.57s	0.96s

3.2. 인장 및 전단 시뮬레이션

인장 실험의 기본 조건은 위와 같다. 단, 40,000스텝 후에 [100] 방향으로 25 MPa 씩 인장응력을 증가시켰다. 총 480,000 스텝을 수행하였다. 그림 3.은 응력(Stress)의 변화에 변형률(Stain)의 변화를 보여주는 그래프이다. 파란색 다이아몬드 지점은 40,000 스텝 동안의 평균값이며, 최대값과 최소값을 십자 표시로 나타내었다. 이를 150 MPa의 응력까지의 변형률 값을 최소자승법을 이용하여 인장 계수(Elastic Modulus)를 구하고, 이 값을 일반화된 림프로그(Generalize Leapfrog)의 결과와 다른 데이터들과 비교하였다. 표 2. 예시는 구리에 대한 splitting 방법과 다른 방법들에 의한 결과를 보여준다. 본 전산모사의 결과와 다른 데이터들이 서로 잘 일치하는 것을 알 수 있다.

전단 시뮬레이션의 조건은 위와 같다. 단 4,000스텝 후에 (010)[001]방향으로 전단응력을 500 MPa씩 증가시키며 수행하였다. 그림 4.는 전단응력의 변화에 따른 전단 변형률의 변화를 나타낸 그래프이다. 역시 최소자승법으로 구한 전단계수의 값은 47.72GPa.으로 거시적인 실험결과와 비슷한 수치를 보인다.

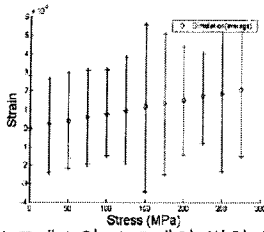


그림 3. 스트레스와 스트레인 변화 곡선

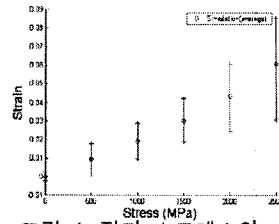


그림 4. 전단 스트레스와 스트레인 변화 곡선

표 2 전단 계수 비교

Young's Modulus	Present study	GLF	Chang et AL ⁽⁶⁾	Lebedv et Al ⁽⁷⁾
E(GPa)	131.27	125.017	138.8	122.9

3. 결론

본 연구는 $N\sigma T$ 양상블 전산모사의 새로운 시간 적분 기법을 적용하여 그 효율성과 신뢰성을 확보하고자 하였다. 새로운 적분 기법을 통해 외연적(explicit)인 적분식을 제시하였으며, 통계적 기반에 적합한 결과를 보여주었다. H_3 에서 생략 Δt 된 의 세 제공 항 이상의 항들 때문에 본 연구의 외연적 방법과 동일한 해 밀도니안을 가지는 일반화된 립프로그(Generalized Leapfrog)방법에 의한 결과와 미세한 차이를 보이지만, 그 차이는 거시적인 관점에서 충분히 수용할 만한 차이였다. 게다가 일반화된 립프로그(Generalized Leapfrog)방법에 비해 약 절반 정도로 계산 시간이 단축되며 time reversibility가 보장되기 때문에 많은 수의 원자 개수와 긴 시간 동안의 모사가 필요한 분자동역학 전산 모사에는 외연적(explicit)인 적분방법이 더욱 적합한 방법이라 할 수 있다.

참고문헌

- E. Hernandez (2001) Metric-tensor flexible-cell algorithm for isothermal-isobaric molecular dynamics simulation, *J. Chem. phys.*, Vol.115, No.22, pp.10282-10290
- I. Souza and J. L. Martins (1997) Metric tensor as the dynamical variable for variable-cell-shape molecular dynamics *Phys. Rev. B*, Vol. 55, pp.8733-8742
- S. D. Bond, B. J. Leimkuhler, and B. B. Laird (1999) The Nosé-Poincaré Method for Constant Temperature Molecular Dynamics *J. Comput. Phys.* Vol.151, pp.114-134
- S. Nosé (2000) An Improved Symplectic Integrator for Nose-Poincare Thermostat, *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol.70, No. 1, January, 2001 pp. 75-77
- Robert I. McLachlan and G.Reinout W.Quispel (2002) Splitting methods, *Acta Numerica(2002)* pp. 341-434.
- W.J. Chang, T.H. Fang (2003) Influence of temperature on tensile and fatigue behavior of nanoscale copper using molecular dynamics simulation, *J. Phys. Chem. Solids*, Vol.64, pp.1279-1283
- A.B. Lebedev, Y.A. Burenkov, A.E. Romanov, V.I. Kopylov, V.P. Filonenko, V.G. Gryaznov (1995) Softening of the elastic modulus in submicrocrystalline copper, *Mater. Sci. Engrng A*, Vol.203, pp.165-170