# 에르고딕성(Ergodicity) 검증을 통한 분자동역학(MD)의 근원적 타당성 탐구

## 1. 서론

본 연구는 분자동역학(Molecular Dynamics, MD)의 근원적 타당성을 검증하기 위해 통계역학의 핵심 개념인 에르고딕성(Ergodicity)을 실험적으로 탐구한다. 에르고딕성은 충분히 긴 시간 동안 하나의 계(system)를 관찰한 시간평균(time average)이 같은 조건에서 여러 초기조건으로 얻은 앙상블 평균(ensemble average)과 같아지는 성질을 의미한다. 따라서 이 성질이 성립한다면, 하나의 긴 시뮬레이션 궤적만으로도 전체 시스템의 평균적 특성을 대표할 수 있게 된다.

## 2. 연구 목적

1) MD 시뮬레이션에서 시간평균과 앙상블 평균의 일치 여부(에르고딕성)를 검증한다.
2) 어떤 물리량이 에르고딕성 검증에 가장 민감하게 반응하는지를 규명한다.
3) 비에르고딕성(Non-ergodicity) 상황에서 이를 개선하기 위한 방법(예: 향상된 샘플링 기법)을 고찰한다.

## 3. 이론적 배경

분자동역학(MD)은 뉴턴의 운동법칙(F = ma)에 기반하여 각 원자에 작용하는 힘을 계산하고, 시간에 따른 위치와 속도를 수치적으로 적분하는 방식으로 분자의 움직임을 추적한다. 이때 시스템의 물리적 성질은 개별 원자의 순간 상태가 아니라, 충분한 시간 평균 또는 앙상블 평균으로 정의된다. 따라서 에르고딕성은 MD의 타당성을 뒷받침하는 핵심 개념이다.

## 4. 연구 방법

① 시스템 구성: Lennard-Jones(LJ) 입자 또는 아르곤(Ar) 100~500개로 구성된 단순 결정 구조.
② 시뮬레이션 조건: NVE(에너지 보존) 앙상블, Δt = 1 fs, 총 시뮬레이션 시간 1 ns 이상.
③ 초기조건 설정: 동일한 구조에서 서로 다른 초기 속도 분포(seed)를 부여하여 여러 시뮬레이션 수행.
④ 분석 물리량: 총 에너지, 온도, 속도 분포, 평균제곱변위(MSD), 자기상관함수(VACF) 등.
⑤ 분석 방법: 시간평균과 앙상블 평균을 비교하여 통계적으로 일치하는지 검정(KS test, KL divergence 등).

## 5. 에르고딕성 판단 기준

시간평균과 앙상블 평균이 통계적으로 유의한 차이를 보이지 않으면(예: p > 0.05), 에르고딕성이 성립한다고 판단한다. 반대로 차이가 존재하거나, 자기상관함수가 장시간 잔류하면 비에르고딕성으로 간주한다.

## 6. 비에르고딕성 발생 원인 및 대처

비에르고딕성은 높은 에너지 장벽, 불충분한 샘플링, 복잡한 자유도로 인해 발생할 수 있다. 이를 완화하기 위해 여러 초기조건을 통한 앙상블 확장, 강화 샘플링(metadynamics, umbrella sampling) 또는 시뮬레이션 시간 확장을 활용할 수 있다.

## 7. 기대 결과 및 의의

본 탐구를 통해 분자동역학 시뮬레이션이 왜 하나의 궤적으로도 전체 시스템의 평균 거동을 대표할 수 있는지를 직접 검증할 수 있다. 이는 MD의 물리적·통계적 근거를 실험적으로 확립하는 연구로서, 시뮬레이션 결과의 신뢰도를 강화하는 의미를 가진다.

## 8. 참고 문헌

[1] 시뮬레이션으로 해석하는 나노 세계의 역학, KENTECH R&E Vol.4 (2025)
[2] Piaggi, P. M., Valsson, O., & Parrinello, M. (2017). Physical Review Letters, 119(1):015701.
[3] Hollingsworth, S. A., & Dror, R. O. (2018). Neuron, 99(6):1129–1143.
[4] Markus J. Buehler (2007). MIT OCW: From nano to macro – Introduction to atomistic modeling techniques.