폭발적 여과 전이에 대한 보편적 이해

DOI: 10.3938/PhiT.22.035

조영설·강병남

Understanding of Explosive Percolation Transitions in a Unified Framework

Young Sul CHO and Byungnam KAHNG

A percolation transition is the emergence of a spanning cluster between two opposite sides of a system and is known to be a prototypical example of a non-equilibrium phase transition in a disordered system. This topic was introduced in the mathematical literature in 1957 and has been studied intensively in mathematics and physics since. The percolation transition is known to be a continuous transition. In the mean-field limit, the percolation transition may be regarded as the emergence of a giant cluster in a random graph. In 2009, a new model of the explosive percolation transition was introduced, in which the growth of a larger cluster is suppressed, with the system then being able to undergo an abrupt phase transition. However, the order of the explosive percolation transition has not been clarified yet. Here, we introduce a stochastic model that enables us to understand the mechanism underneath the explosive percolation transition and to clarify its order in a unified framework covering from low dimensions to the mean-field limit.

여과 전이(percolation transition)는 유클리드 공간에서 격자점 또는 연결선에 도체와 부도체가 p와 $1-p$의 확률로 존재할 때 p가 임계점 p_c보다 큰 경우에 서로 반대편의 끝을 연결하는 도체로 연결된 클러스터가 생성되는 것을 의미한다.[1] 이때 물질은 부도체에서 도체로 상전이를 일으킨다. 이와 같은 여과 전이 모형은 컴퓨터 시뮬레이션 상에서는 도체를 나타내는 occupied bond를 하나씩 무작위로 붙여가면서 서로 반대편의 가장자리를 연결하는 클러스터가 만들어지면 여과 전이가 일어나는 것으로 생각할 수 있다. 이와 같은 시뮬레이션을 수행하는 과정을 자세히 들여다보면 초기에는 작은 클러스터만 생성되지만 시간이 흐르면서 클러스터들이 생성, 성장 및 합병(merging)하는 현상이 일어나게 된다.

여과 전이는 다른 열역학 평형계 모형의 상전이 현상과 같이 보편적 성질을 가지고 있다. 즉 site percolation과 bond percolation 임계현상은 차이가 없고 또 격자의 모양에 무관하다. 그러나 클러스터가 놓여있는 공간 차원은 임계현상에 영향을 미친다. Upper critical dimension이 6차원이라 알려져 있으며 이 차원을 넘어서는 임계현상은 차원에 무관하게 된다. 공간 차원이 무한대가 되면 격자 구조는 의미가 없어지고 평균장 이론이 적용된다. 이 경우에는 여과 전이는 '반대편 양쪽을 연결하는 클러스터가 형성되는지 여부'보다는 '거시적 스케일의 클러스터가 형성되는지 여부'로 개념이 바뀌게 된다. 이 관점은 전염병의 전파, 사회 네트워크에서 의견의 형성 등을 연구할 때 이용되고 있다.[2,3]

평균장 이론이 적용되는 경우 여과 전이에 대한 모델로 에르되스-레니가 소개한 무작위 그래프(random graph) 모델이 있다.[4] 이 모델은 먼저 N개의 노드들이 모두 고립된 초기 상태로부터, 매 시간마다 한 쌍의 노드들을 무작위하게 골라 연결선(link)을 붙이는 식으로 성장한다. 붙여진 링크 수가 증가함에 따라 클러스터들이 성장하는데, 임계점을 도달하면 거시적 스케일의 대형 클러스터가 형성된다. 임계점을 넘어서 좀 더 링크를 붙여나가면 대형 클러스터의 크기는 점점 더 연속적으로 성장을 하게 된다. 즉 여과 전이는 연속 상전이이다. 이에 대한 임계지수 값도 평균장이론에 따르는 임계지수 값과 같다.

여과 전이에 대한 연구는 오랫동안 연구되어온 주제이며 불연속 여과 전이의 가능성에 대한 호기심이 계속해서 발생하게 되었고 원래의 모형을 변형한 모형에서 불연속 여과 전이를 일으키는 예도 있었다. 2009년 Achlioptas (수학자, 컴퓨터 공학자), D'Souza (물리학자), Spencer (수학자)는 수학 커뮤니티

저자약력

조영설 군은 서울대학교 물리·천문학부 석박사통합과정에 있는 대학원생으로 연구재단을 통해 미래기초과학핵심리더양성사업 펠로쉽을 받고 있다. (koreafire@hanmail.net)

강병남 교수는 보스턴 대학에서 박사학위를 받았으며, 이후 캘리포니아 버클리 대학 연구원, 건국대학교 교수를 거쳐 현재 서울대학교 물리·천문학부에서 재직 중이다. (bkahng@snu.ac.kr)

REFERENCES

[1] D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory*, ed. 2 (Taylor & Francis, London, 1994).

[2] R. Pastor-Satorras and A. Vespignani, Phys. Rev. Lett. **86**, 3200 (2001).

[3] M. Girvan and M. E. J. Newman, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **99**, 7821 (2002).

[4] P. Erdös and A. Rényi, Publ. Math. Inst. Hungar. Acad. Sci **5**, 17 (1960).

에서 잘 알려진 Achlioptas process를 무작위 그래프 모형에 적용시키는 작업을 수행하였다.[5-7] 이 모형은 무작위 그래프의 진화 과정 중에서 임의의 한 쌍의 노드를 선택하는 것이 아니라 두 쌍의 노드를 선택하여 각각에 대하여 가상적으로 링크를 붙일 때 얻어지는 클러스터의 크기들을 구하고 서로 비교하여 작은 경우에만 실제로 링크를 붙여가는 모형이다. 즉 더 큰 클러스터가 만들어지는 것을 억제시키고 작은 클러스터가 만들어지도록 유도한 모형이다. Science지에 발표된 그들의 결과는 다음과 같다. 임계점은 늦어지고 임계점에서 폭발적으로 대형 클러스터가 형성된다는 것이다. 이러한 결과로부터 '폭발적 여과 전이'라는 이름이 유래했다. 이러한 발견은 많은 관심을 끌었고, 동기화 문제, 인터넷 전송 문제 등에서도 비슷한 연구가 진행되었다.[8-18]

폭발적 여과 전이가 시스템 사이즈가 무한대로 가는 열역학 극한에서 진정으로 불연속 전이인지 아니면 연속 전이로 귀착되는지에 대한 의문이 대두되었다.[9-12] 유한한 시스템 사이즈의 수치적 결과만 가지고는 폭발적 여과 전이 현상이 연속인지 불연속인지에 대한 판단이 될 수 없을 정도로, 폭발적 여과 전이의 성질은 여러 가지 물리량에 대한 성질과, 모형의 세부적인 룰에 따라 변하는 것을 알 수 있었다.[13-16] 평균장 영역이 아닌 유클리드 공간에서의 폭발적 여과 전이도 연속인지 불연속인지도 아직 밝혀지지 않았다. 수치 분석에 따르면, 저차원의 유클리드 공간에서는 불연속 전이의 특징을 보이는 듯하였다. 따라서 폭발적 여과 전이에 대한 이론적인 규명이 필요한 상황이었다.

연결 클러스터의 형성을 억제하는 모델

본 연구에서는 Achlioptas process의 기본적인 아이디어를 살리면서 많은 사람들이 연구에 집착하였던 모형을 과감히 폐지하고 새로운 관점에서 폭발적 여과 전이에 대한 연구를 수행하고자 하였다.[19] 우선 여과 전이의 기본적인 아이디어를 살리기 위해 저차원의 유클리디언 공간에서 Achlioptas process의 아이디어를 살리는 여과 전이 모형을 고안했다. 서두에서 서술한 바와 같이 매 시간마다 무작위로 도체 연결선을 붙이는 과정을 일반화하여 m개의 도체 연결선 후보를 뽑고 그 중에서 유클리드 공간의 마주보는 두 면 사이를 연결하는 클러스터를 형성시키는 도체 연결선 후보는 배제시키고 나머지 후보에서 랜덤하게 골라 연결선을 붙이는 과정을 반복하는 모델을 만들었다. 이 모형을 spanning cluster avoiding (SCA) 모델이라고 부르기로 하였다. 우리는 이러한 SCA 모델에서 보이는 폭발적 여과 전이 현상을 해석적인 방법을 이용하여 상전이 성질을 구할 수 있었다. 또한 이 결과를 이용하여 upper critical dimension 이상에서 상전이 현상을 이해할 수 있었다.

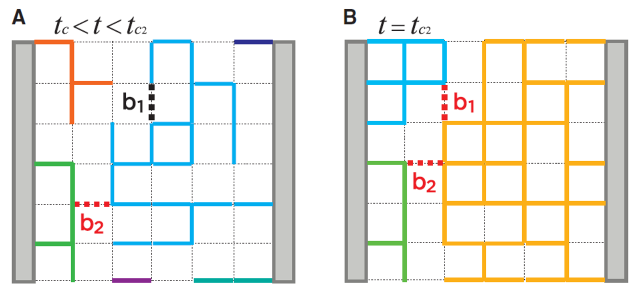

Fig. 1. (a) Schematic diagram of SCA model at $t_c < t < t_{c2}$. (b) Schematic diagram of SCA model at $t = t_{c2}$. Quoted from Ref. [19].

SCA 모델은 유클리드 공간에서 정의되는 모델이다. d차원 공간에서 링크가 하나도 없는 상태에서 시작하는데, 총 $N_b = dN = dL^d$개의 채워지지 않은 링크 공간이 존재한다. 이 모델에서는 다리본드(bridge bond)라는 개념이 사용되는데, 다리본드는 연결되었을 때 시스템의 서로 반대편 양면을 연결하는 클러스터를 형성시키는 본드를 의미한다. 이 모델은 링크가 붙여지면서 성장하는데, 붙여진 링크 수는 $\ell = tN_b$으로 표기된다. 여기서 t는 시간을 나타낸다. 이때 링크는 다음과 같은 규칙을 따라서 붙여진다. 매 시간 m개의 링크 후보를 고른 뒤에, 그 중에 다리본드가 아닌 링크가 하나라도 있으면, 그러한 본드들 중 하나를 무작위하게 골라서 연결시킨다. 하지만 어떤 순간에 모든 본드들이 다리본드일 경우가 있는데 이때는 이 링크들 중 하나를 무작위하게 골라서 연결시킨다. 이 순간에 비로소

REFERENCES

[5] D. Achlioptas, R. M. D'Souza and J. Spencer, Science **323**, 1453 (2009).
[6] Y. Azar, A. Z. Broder, A. R. Karlin and E. Upfal, SIAM J. Comput. **29**, 180 (1999).
[7] M. Mitzenmacher, IEEE Trans. Parallel Distrib. Syst. **12**, 1094 (2001).
[8] R. M. Ziff, Phys. Rev. Lett. **103**, 045701 (2009).
[9] R. A. da Costa, S. N. Dorogovtsev, A. V. Goltsev and J. F. F. Mendes, Phys. Rev. Lett. **105**, 255701 (2010).
[10] O. Riordan and L. Warnke, Science **333**, 322 (2011).
[11] P. Grassberger, C. Christensen, G. Bizhani, S.-W. Son and M. Paczuski, Phys. Rev. Lett. **106**, 225701 (2011).
[12] H. K. Lee, B. J. Kim and H. Park, Phys. Rev. E **84**, 020101(R) (2011).
[13] W. Choi, S.-H. Yook and Y. Kim, Phys. Rev. E **84**, 020102 (2011).
[14] Y. S. Cho and B. Kahng, Phys. Rev. Lett. **107**, 275703 (2011).
[15] N. A. M. Araújo and H. J. Herrmann, Phys. Rev. Lett. **105**, 035701 (2010).
[16] J. Nagler, A. Levina and M. Timme, Nat. Phys. **7**, 265 (2011).
[17] K. J. Schrenk, N. A. M. Araújo, J. S. Andrade Jr. and H. J. Herrmann, Sci. Rep. **2**, 348 (2012).
[18] J. Gómez-Gardeñes, S. Gómez, A. Arenas and Y. Moreno, Phys. Rev. Lett. **106**, 128701 (2011).
[19] Y. S. Cho, S. Hwang, H. J. Herrmann and B. Kahng, Science **339**, 1185 (2013).

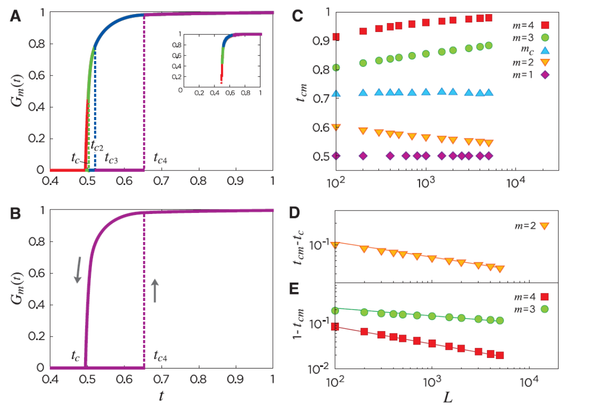

Fig. 2. Simulation data of SCA model. (a) $G_m(t)$ vs t. (b) Hysteresis curve of $G_m(t)$ vs t. (c) t_{cm} vs L. (d) $t_{cm}-t_c$ vs L. (e) $1-t_{cm}$ vs L. Quoted from Ref. [19].

연결하는 여과 클러스터가 형성되는데, 이때 달린 링크 수를 $\ell_{cm}=N_b t_{cm}$으로 표기한다 (그림 1).

SCA 모델에서의 상전이 유형

SCA 모델에서의 질서매개변수(order parameter) $G_m(t)$는 전체 노드들 중 연결하는 클러스터에 속하는 노드들의 비율을 의미한다. 따라서 $t<t_{cm}$일 때는 $G_m(t)=0$이고, $t>t_{cm}$일 때는 $G_m(t)>0$이다. 먼저 우리는 SCA 모델에서 시뮬레이션 연산을 수행하였다. $m=1$일 때, 이 모델은 유클리드 공간에서 무작위하게 성장하는 문제와 같아진다. 하지만 $m>1$일 때, 연결하는 클러스터가 형성되는 것을 억제하는 효과가 추가되면서 $t_{c1}=t_c<t<t_{cm}$에서는 연결하는 클러스터가 형성되지 않아서 $G_m(t)=0$이다가 $t>t_{cm}$에서 $G_m(t)>0$의 값을 갖게 된다. 또한 $t>t_{cm}$일 때, $G_m(t)$는 $G_1(t)$ 곡선을 따르게 되는데, 연결하는 클러스터가 생긴 이후에는 별도의 억제 조건을 받지 않기 때문이다. 따라서 t_{cm}에서 $G_m(t_{cm})$ 만큼의 유한한 불연속을 보이는 것을 알 수 있다. 역과정의 경우, $G_m(t)$는 $G_1(t)$를 따라 t_c까지 돌아간다. 따라서 SCA 모델은 hysteresis curve를 형성한다. 마지막으로 $t_{cm}(L)$의 m, L 의존성을 확인하였는데, 특정 m_c가 존재하고, $m>m_c$의 경우, $t_{cm}(L)$은 L이 커짐에 따라 커졌으며, $m<m_c$의 경우, $t_{cm}(L)$은 L이 커짐에 따라 감소하는 것을 확인하였다. 본 연구에서는 확률적인 방법을 통하여 $t_{cm}(L)$에 대한 식을 해석적으로 구할 수 있었고 시뮬레이션 결과와 비교해 보니 잘 맞는 것을 확인하였다 (그림 2).

다음은 $t_{cm}(L)$의 해석적 결과를 소개하고자 한다. 우리는 t_c에서 성장을 시작했을 때, 연결하는 클러스터가 생길 확률이 가장 높은 t를 구함으로써 t_{cm}을 유도하였다. 결과는 주어진 공간 차원에서 $m_c=d/(d-d_{BB})$을 만족하는 m_c가 존재하며, $m<m_c$일 때, $t_{cm}-t_c\sim N^{-1/\overline{\upsilon_<}}$으로 주어지고, $m>m_c$일 때, $1-t_{cm}\sim N^{-1/\overline{\upsilon_>}}$으로 주어진다. 또한 $m=m_c$일 때, $t_c<t_{cmc}$는 N 의존성이 없다. 여기에서 d_{BB}는 다리 본드들의 프랙탈 차원을 의미하고, 지수는 각각

$$\overline{\upsilon_<}=[1-(m/m_c)]/(m\zeta+1),\quad \overline{\upsilon_>}=[(m/m_c)-1]/(m-1)$$

으로 구해진다. 따라서 $m\geq m_c$일 때, SCA 모델은 불연속 여과 상전이를 보이고, $m<m_c$일 때, 연속 상전이를 보이는 것을 알 수 있다. 여기에서 중요한 것은 $d<d_c=6$일 때, $d_{BB}<d$이며, $d\geq d_c=6$일 때, $d=d_{BB}$을 만족한다는 것이다.[17] 따라서 6차원이 자연스럽게 upper critical dimension이 된다. 6차원 이상에서는 평균장 영역으로 취급할 수 있다. 따라서 평균장 영역에서 $m_c\to\infty$인 것을 의미한다. 이 결과는 무작위 그래프 위에서의 폭발적인 여과 전이에서 곱 규칙 혹은 합 규칙의 경우 $m_c\to\infty$인 것과 일치한다. 평균장 극한의 이론적 결과가 무작위 그래프 위에서의 여과 전이로 묘사될 수 있다는 점을 이용하면, SCA 모델의 유한 차원에서의 결과가 폭발적인 여과 문제에서의 상전이를 일반적인 차원에서 이해하는데 도움을 줄 수 있을 것이라고 생각할 수 있다.

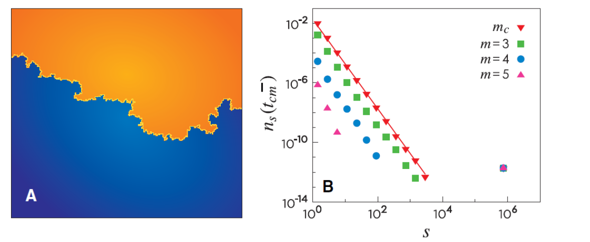

Fig. 3. Simulation data of SCA model. (a) Plot of the giant and second largest clusters just before the percolation threshold t_{cm}^- for $m=4$. (b) Cluster-size distribution n_s vs s at t_{cm}^-. Quoted from Ref. [19].

곱 규칙에서의 폭발적 여과 전이 유형

우리는 SCA 모델에서의 결과를 통해 Achlioptas, D'Souza와 Spencer가 소개한 곱 룰(product rule)에서의 여과 전이 문제를 이해하기 위해서 SCA 모델의 경우 여과하는 클러스터가 생기기 직전의 클러스터들의 스냅샷을 찍어 보았다. 그리고 $m>m_c$의 경우, 전체 시스템이 두 개의 꽉 찬 클러스터로 쪼개지는 것을 확인하였다 (그림 3). 우리는 불연속 여과 전이가 전이 직전의 클러스터의 꽉 찬 정도와 관련이 있을 것이라고 생각하였다.

곱 룰 모델에서는 여과 전이 문제를 대형 클러스터의 등장이라는 관점에서 접근한다. 이 모델의 성장 규칙은 다음과 같다. 처음에 d차원 유클리드 공간에서 링크가 하나도 없는 상태에서 시작한다. 그리고 매순간 m개의 링크 후보를 고르며, m 개의 후보 중 연결시키는 두 클러스터의 곱이 가장 작은

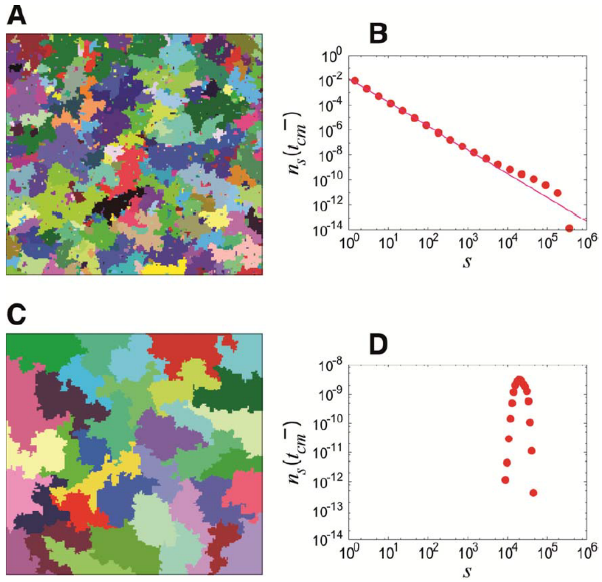

Fig. 4. Simulation data of product rule. Snapshot of clusters at t_{cm}^{-} for $m=2$ (a) and $m=30$ (c). $n_s(t_{\mathrm{cm}}^{-})$ vs s for $m=2$ (b) and $m=30$ (d). Quoted from Ref. [19].

링크 후보를 골라서 연결시킨다. 그럼 큰 클러스터의 성장이 억제되며, 대형 클러스터가 연기된 임계점에서 폭발적으로 생긴다. 우리는 먼저 시스템 사이즈 N을 고정시켜 놓고, m을 바꾸어 가면서 전이 직전의 클러스터 구조의 스냅샷을 찍어 보았다. 그 결과 m이 작은 영역에서는 클러스터들이 꽉 찬 형태를 띠지 않았지만 큰 영역에서는 클러스터들이 꽉 찬 형태를 띠는 것을 확인할 수 있었다. 다음은 클러스터 크기 분포를 측정하였는데, m이 작은 영역에서는 작은 클러스터와 큰 클러스터가 공존하는 모습을 보였으며, m이 큰 영역에서는 큰 클러스터들만 존재하며 크기가 비슷한 것을 확인할 수 있었다 (그림 4). 마지막으로 전이 직전에 클러스터의 총 개수 $N_{cl}(t_{cm}^{-})$가 시스템 사이즈 N에 어떻게 의존하는지 관찰하였다. 마찬가지로 주어진 시스템 사이즈 N에 대해서 클러스터의 총 개수의 경향성이 바뀌는 m_c가 존재하였다. 또한 $m_c \sim \ln N$의 공식을 따르는 것을 확인하였다 (그림 5).

m_c가 왜 $m_c \sim \ln N$으로 주어지고, m_c 전후로 바뀌는 성질이 상전이의 종류와 어떻게 연결되는지 설명하기 위해 모델의 성장 과정을 두 과정으로 나누어 보았다. 첫 번째 과정은 임계점 전의 임의의 시간부터 임계점 바로 전까지 클러스터들이 결합하는 과정이다. 그 임의시간에서는 큰 클러스터와 작은 클러스터가 공존하고 있는 상태를 생각한다면, $m_c > \ln N$을 만족할 때, 작은 클러스터들이 큰 클러스터와 결합하는 과정이 지배적으로 발생하며, 결합 직전에 큰 클러스터만 남게 된다. 반면에 $m_c < \ln N$인 경우는 임계점 직전까지에도 큰 클러스터와 작은 클러스터가 공존하게 된다. 따라서 $m_c \sim \ln N$이 유도된다. 두 번째 과정은 꽉 찬 큰 클러스터들만 남았을 때, 순식간

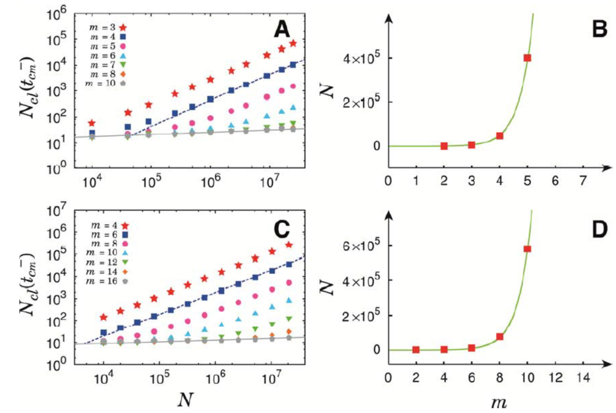

Fig. 5. Simulation data of product rule. $N_{cl}(t_{cm}^{-})$ vs s in two dimensional lattices (a) and random graphs (c). m_c vs N in two dimensional lattices (b) and random graphs (d). Quoted from Ref. [19].

에 결합해서 불연속 여과 전이를 일으키는 과정이다. 클러스터 분포(그림 4)에서 확인했을 때 알 수 있듯이, $m > m_c$의 경우, 큰 클러스터들의 크기는 매우 비슷하다. 따라서 결합 중에 클러스터들의 크기는 동일하다는 가정을 쓸 수 있다. 초기 조건을 t_{cm}^{-}에서 클러스터의 총 개수 $N_{cl}(t_{cm}^{-}) \sim N^{\alpha}(\alpha < 1)$으로 잡으면, 간단한 계산을 통해 불연속 여과 전이를 유도할 수 있다. 그리고 시뮬레이션 결과와 비교해서 잘 맞는 것을 확인하였다. 마지막으로 곱 룰의 경우 공간 차원에 관계없이 $m_c \sim \ln N$와 같이 평균장 영역의 결론을 보이는 것을 알 수 있는데 그 이유는 곱 룰의 경우 큰 클러스터들의 결합을 관여하는 링크가 경계면에 존재하는 링크뿐 아니라 큰 클러스터들의 내부에 속하는 링크도 포함되기 때문이다. 두 종류의 링크의 총 개수는 공간 차원에 관계없이 $O(N)$이기 때문에 낮은 차원에서도 평균장 영역의 행동을 보인다.

요약 및 향후 전망

이 연구에서는 큰 클러스터의 성장을 억제시키는 모델 대신에 시스템의 반대편을 연결하는 클러스터의 생성을 억제시키는 모델을 제시하여 기존의 폭발적인 여과 전이 문제의 명확한 이해를 가능하게 하였다. 또한 곱 룰 및 합 룰 모델뿐만 아니라 많은 불연속 여과 전이 모델들에 숨어 있는 메커니즘을 통일적으로 설명할 수 있는 방법을 소개하였다. 마지막으로 SCA 모델은 반대편 양면을 연결하는 클러스터와 같이 실제 실험과 연관성 있는 질서 변수를 다루었기 때문에 앞으로 이 분야의 현실적인 응용 가능성을 찾는데 큰 역할을 담당할 것으로 기대된다. 또한 폭발적 여과 전이 모형이 비평형계 dynamic 모형에서 일어나는 상전이 현상에 대한 것인데 이 분야에서 상전이 보편성에 대한 연구는 아직 초기 단계이므로 본 연구에서 개발한 방법을 통하여 후속적인 연구가 이어질 것으로 기대한다.