

폭발적 여과전이 메커니즘 규명

물은 섭씨 100도에서 수증기로 변한다. 이러한 현상을 상전이 현상이라고 한다. 온도가 올라가면서 상(phase)이 변하는 이유는 물 분자 사이에 서로 간의 영향을 미치는 거리가 멀어지기 때문이다. 상전이 현상의 또 하나의 예로 우리 주변에 있는 못 같이 철로 된 물질들이 우리가 살고 있는 온도에서는 자기적 성질을 띠지 않지만 온도가 내려가면 스스로 자석이 된다. 이와 같이 온도가 변함에 따라 상이 변하는 현상을 열적 상전이가 현상이라고 한다.

여과전이이란?

여과전이(percolation transition)는 2차원 또는 3차원과 같은 유클리드 공간에서 격자점 또는 연결선에 도체와 부도체가

체가 p 와 $1-p$ 의 비율로 존재할 때 p 가 임계점이라고 부르는 P_c 보다 큰 경우에서 서로 반대편을 연결하는 도체로 연결된 클러스터가 생성되는 것을 의미한다. 이때 물질은 부도체에서 도체로 상전이를 일으킨다. 이러한 상전이는 도체의 비율이 증가함에 따라 도체 클러스터로 반대편을 잇는 길이 열리는 기하학적인 상전이라는 점에서 열적 상전리와 다르다. 그러나 임계점에 접근하면서 클러스터가 커져서 상관길이 길어진다는 점에서는 같다.

컴퓨터 시뮬레이션 상에서는 도체를 나타내는 연결선을 하나씩 무작위로 붙여가면서 서로 반대편의 가장자리를 연결하는 클러스터가 만들어지면 여과전이 일어난다는 것으로 생각할 수 있다.



글 강병남

서울대학교
물리·천문학과 교수
bkahng@snu.ac.kr

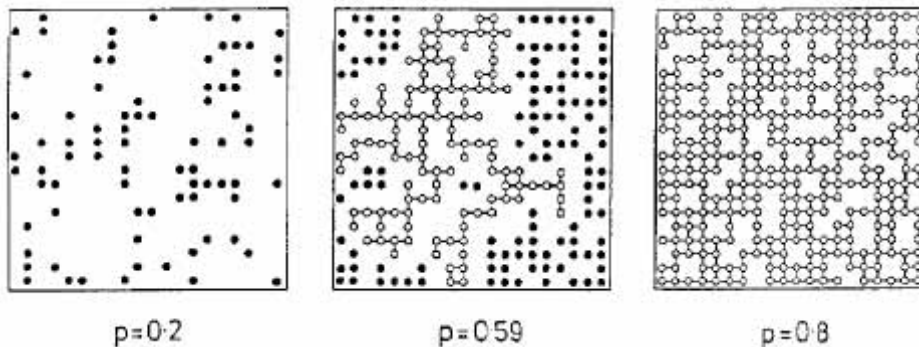
글쓴이는 보스턴 대학에서 박사학위를 받았으며 캘리포니아 버클리 대학에서 연구원, 건국대학교 교수 등을 지냈다.



글 조영설

서울대학교 대학원
박사과정

글쓴이는 서울대학교 물리·천문학부를 졸업했으며, 현재 동대학원 박사 과정에 재학 중이다.



▶ 그림 1. 간단한 여과전이 모형의 한 예. 바둑판 모양의 격자 위에 동그라미를 p 의 확률로 무작위하게 채워나가면, 어떤 임계 비율 이상으로 동그라미가 채워졌을 때, 반대편의 가장자리를 연결하는 클러스터가 형성되게 된다(그림에서의 흰색 동그라미).

이와 같은 시뮬레이션을 수행하는 과정을 자세히 들여다보면 초기에는 작은 클러스터가 생성되지만 시간이 흐르면서 클러스터들은 생성·성장과 합병 현상이 일어나게 된다.

무한대 차원, 거시적 크기의 클러스터 형성

여과전이는 다른 열역학 평형계 모형의 상전이 현상과 같이 보편적 성질을 가지고 있다. 예를 들어 site percolation과 bond percolation은 임계현상의 성질 차이가 없고 또 격자의 모양에 무관하다. 그러나 클러스터가 놓여있는 공간 차원에서는 임계현상에 의존하게 된다. 1982년 상전이 현상에 대한 이론으로 노벨상을 받은 재규격화 이론에 따르면 상위임계차원이라는 것이 존재하는데 공간의 차원이 상위임계차원보다 작은 경우 임계현상이 공간 차원에 의존하지만 그 이상인 경우 공간 차원에 의존하지 않는 평균장 이론으로 규명될 수 있다고 알려져 있다. 자기화에 대한 모형의 경우 상위임계차원이 4차원이라는 것과 여과전이의 경우 6차원이라고 알려져 있다.

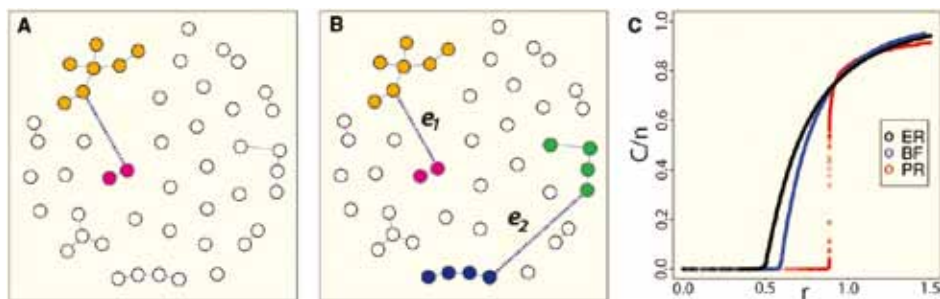
중학교에서 배운 바둑판 모양의 2차원 직교좌표를 생각해 보자. 원점에서 이웃해 있는 격자점 수는 (1,0), (0,1), (-1,0), (0,-1) 4개가 존재한다. 3차원에서는 6개가 존재하며 일반적으로 d 차원에서는 $2d$ 개가 존재하게 된다. 한편 2차원 바둑판의 가로와 세로의 크기가 각각 L 인 시스템에서의 격자점의 개수 N 은 L^2 이며 일반적으로 d 차원인 경우 $N=L^d$ 가 된다. 공간차원이 무한대인 경우 이웃의 개수나 시스템

의 격자점의 크기는 모두 무한대가 되기 때문에 위치의 개념은 의미가 없어지게 되며 따라서 격자구조는 무시할 수 있게 된다.

앞에서 언급한 바와 같이 여과 전이는 도체가 무작위하게 채워졌을 때, 시스템의 반대편을 연결하는 클러스터(이를 spanning cluster라 함)가 형성되는 것을 뜻한다. 그러나 공간차원이 무한대가 되면 공간 개념이 애매해지고 따라서 반대편이라는 것 또한 정의가 잘 되지 않는다. 따라서 무한대 차원에서는 거시적인 크기의 클러스터가 형성되는 것을 여과전이가 일어나는 것으로 간주하게 된다. 이 관점은 전염병의 전파, 사회 네트워크에서 의견 형성 등을 연구할 때 이용되고 있다.

임계점에서 폭발적 대형 클러스터 형성

상위임계차원 이상에서는 상전이 현상이 차원에 무관하기 때문에 무한대 차원에서의 모형을 사용하는 것이 편리하다. 이 경우 에르되스-레니가 소개한 무작위 그래프 모델이 있다. 이 모델은 먼저 N 개의 노드들이 모두 고립된 초기 상태에서부터 매 시간 한 쌍의 노드들을 무작위하게 골라 연결선을 붙이는 식으로 성장한다. 붙여진 연결선 수가 증가함에 따라 클러스터들이 성장하는데, 임계점에 도달하면 거시적 스케일의 대형 클러스터가 연속적으로 형성된다. 즉 여기에서의 여과전이는 연속 상전이이다. 이에 대한 임계지수 값도 평균장이론에 따르는 임계지수 값과 같다. 임계점을 넘어 연결선이 더 붙여지면 대형



▶▶ 그림 2. 에르되스 레니 모델 (A) 과 클러스터의 성장 억제 모형 (B) 모식도. B에서와 같이 두 연결선 후보가 형성시키는 클러스터 크기를 비교해서 작은 값을 가지는 연결선을 붙이게 되면, 큰 클러스터가 만들어지는 것이 억제되고, 그 결과 C에서와 같이 대형 클러스터가 늦춰진 임계점에서 폭발적으로 등장하게 된다 (PR). Achlioptas et al. Science (2009).

클러스터가 성장한다.

여과전이에 대한 연구는 오랫동안 연구되어온 주제이며 불연속 여과전이의 가능성에 대한 호기심이 계속해서 발생하게 되었다. 원래의 모형을 변형한 모형에서 불연속 여과전이를 일으키는 예도 있었지만 특이한 상황의 모형이어서 일반적인 관점에서 불연속 상전이가 일어나는 경우에 대해 의문이 대두되고 있었다. 그러한 상황에서 2009년 Achlioptas(수학자, 컴퓨터공학자), D'Souza(물리학자), Spencer(수학자)는 수학계에서 잘 알려진 Achlioptas process를 무작위 그래프 모형에 적용시키는 작업을 수행하였다. 이 모형(PR 모형)에서는 무작위 그래프의 진화 과정 중에서 임의의 한 쌍의 노드를 선택하는 것이 아니라 두 쌍의 노드를 선택하여 각각에 대하여 가상적으로 연결선을 붙일 때 얻어지는 클러스터의 크기들을 구하고 서로 비교하여 작은 경우에만 실제로 연결선을 붙여가는 식으로 성장한다. 즉 큰 클러스터가 만들어지는 것을 억제시키고 작은 클러스터가 만들어지도록 유도한 모형이다.

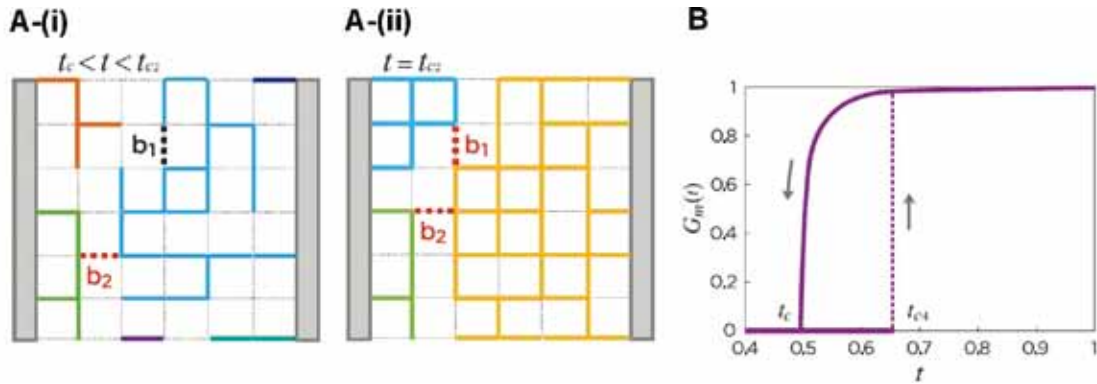
사이언스지에 발표된 그들의 결과는 다음과 같다. 임계점은 늦춰지고, 또한 임계점에서 폭발적으로 대형 클러스터가 형성된다는 것이다. 이러한 결과로부터 '폭발적 여과전이'라는 이름이 유래했다. 즉 클러스터가 성장을 하고자 하는 시스템에 외부에서 성장을 억압하는 제한이 가해지는 경우 궁극적으로는 대규모의 집단이 형성되지만 폭발적으로 형성된다는 것을 의미한다. 이러한 발견은 많은 관심을 끌었고,

동기화 문제, 인터넷 전송 문제 등에서도 비슷한 연구가 진행되었다.

폭발적 여과전이가 시스템 크기가 무한대로 가는 극한(이를 열역학 극한이라 칭함)에서 진정으로 불연속 전이인지 아니면 연속 전이로 귀착되는지에 대한 의문이 대두되었다. 그러나 다른 상전이와는 달리 유한한 시스템 사이즈의 수치적 결과를 가지고 열역학 극한에서 연속인지 불연속인지에 대한 판단이 될 수 없을 정도로 애매한 결과를 보이기 때문에 학계에서는 논란의 대상이 되어 왔다. 평균장 영역이 아닌 유클리드 공간에서의 폭발적 여과전이라도 연속인지 불연속인지도 아직 밝혀지지 않았다. 수치 분석에 따르면, 저차원의 유클리드 공간에서는 불연속 전이의 특징을 보이는 듯하였다. 따라서 폭발적 여과전이에 대한 이론적인 규명이 필요한 상황이었다.

PR모형의 상전이 현상을 SCA 모델 통해 규명

최근 필자가 수행한 연구에서는 Achlioptas process의 기본적인 아이디어를 살리면서 많은 사람들이 연구에 집착했던 모형을 과감히 폐지하고 새로운 관점에서 폭발적 여과전이에 대한 연구를 수행하고자 하였다. 우선 여과전이의 기본적인 아이디어를 살리기 위해 저차원의 유클리드 공간에서 Achlioptas process의 아이디어를 살리는 여과전이 모형을 고안했다. 서두에서 서술한 바와 같이 매시간 무작위로 도체 연결선을 붙이는 과정을 일반화하여 m 개의 도체 연결선 후보를 뽑았다. 그 중에서 유클리드 공간



▶▶ 그림 3. SCA 모형의 모식도 (A) 와 이 모델에서의 불연속 여과전이 (B). B에서 불연속 상전이의 특성인 hysteresis curve가 관측된다. Cho et al. Science (2013).

의 마주보는 두 면 사이를 연결하는 클러스터를 형성시키는 도체 연결선 후보는 배제시키고 나머지 후보에서 무작위로 골라 연결선을 붙이는 과정을 반복하는 모델을 만들었다. 즉 마주보는 두 면의 연결을 억압하는 효과를 도입하여 이러한 억압이 있는 환경에서 연결 클러스터가 어떤 과정을 밟으면 형성되는지를 보고자 하였다. 이 모형을 spanning cluster avoiding (SCA) 모델이라고 부르기로 하였다. 우리는 이러한 SCA 모델에서 보이는 폭발적 여과전이 현상을 해석적인 방법을 이용하여 이해할 수 있었다. 또한 이 결과를 이용하여 상위임계차원 이상에서 상전이 현상을 이해할 수 있었다.

SCA 모형의 해석적인 결과는 다음과 같다. 어떤 주어진 공간 차원 d 에 대해 임계 연결선 후보 개수 m_c 가 존재하고 $m > m_c$ 인 경우에는 여과 클러스터가 불연속적으로 등장하며, $m < m_c$ 일 때는 연속적으로 등장한다. 또한 $d \geq 6$ 인 평균장 영역에서는 임계 연결선 후보 개수가 무한대로 발산하는데, 이 결과는 기존의 무한대 차원에서의 PR 모형의 결과와 일치한다. 따라서 우리는 다양한 차원에서의 PR 모형의 상전이 현상을 SCA 모델을 통해 규명하고자 시도하였다.

새 모델로 폭발적 여과전이의 불연속성 증명

SCA 모형의 경우, $m > m_c$ 인 경우 여과 클러스터가 형성되기 직전에 클러스터가 짝 찬 모습을 보인

다. 따라서 우리는 클러스터의 짝 찬 형태가 불연속 상전이와 연관이 되어있을 것으로 예측하고, 2차원에서 PR 모형에 대해 연결선 후보 개수를 조절하면서 클러스터의 형태를 관찰하였다. 신기하게도 PR 모형에서도 어떤 임계 연결선 후보가 존재하며, 이보다 연결선 후보의 개수가 많으면, 클러스터가 짝 찬 형태를 유지하고 불연속 전이가 발생했다.

우리는 클러스터의 짝 찬 형태와 불연속 여과전이 현상과의 관계를 설명하기 위해 간단한 해석적 계산을 수행했는데, 그 결과는 시뮬레이션 결과와 일치하였다. 또한 이러한 관계는 다양한 불연속 여과전이 모델들의 불연속성을 성공적으로 설명할 수 있었다. 마지막으로 PR 모형에서는 공간 차원의 종류와 관계없이 노드 개수 N 에 대해 $m_c \sim \ln N$ 의 관계를 가지는 것을 발견했는데, 이것은 PR 모형에서는 모든 차원에서 평균장 영역의 행동을 보이는 것을 의미한다.

결론적으로 우리 연구팀은 그동안 논란이 되어왔던 폭발적 여과전이의 불연속성을 새로운 모델을 도입해서 증명하였다. 현재 비평형 시스템에서의 불연속 전이가 많이 발견되었는데, 이 모델의 결과는 이러한 불연속전이들에 숨어있는 보편적인 역학을 이해하는데 기틀이 될 수 있을 것이라고 기대한다. 또한 SCA 모형은 마주보는 면을 연결하는 클러스터라는 물리적으로 의미 있는 질서 변수를 다루었기 때문에 불연속 여과전이의 물리적인 의미를 찾는 데 큰 역할을 담당할 수 있을 것이다.