

<해설>

Turing, Turing 불안정성 그리고 수리생물학과 연소

김종수**

Turing, Turing Instability, Computational Biology and Combustion

J. S. Kim

ABSTRACT

The present paper is concerned with the development of the computational biology in the past half century and its relationship with combustion. The modern computational biology is considered to be initiated by the work of Alan Turing on the morphogenesis in 1952. This paper first touches the life and scientific achievement of Alan Turing and his theory on the morphogenesis based on the reactive-diffusive instability, called the Turing instability. The theory of Turing instability was later extended to the nonlinear realm of the reactive-diffusive systems, which is discussed in the framework of the excitable media by using the Oregonator model. Then, combustion analogies of the Turing instability and excitable media are discussed for the cellular instability, pattern forming combustion phenomena and flame edge. Finally, the recent efforts on numerical simulations of biological systems, employing the detailed bio-chemical kinetic mechanism is discussed along with the possibility of applying the numerical combustion techniques to the computational cell biology.

Key Words: Turing, Turing instability, Excitable media, Reactive-diffusive system

1. 서론

최근 열유체공학 전문가들 사이에서 생물학 그 가운데에서도 특히 수리생물학에 대한 관심이 크게 증가하고 있다. 이는 열유체공학의 침체로 새로운 연구분야를 개척하기 위한 노력의 하나로써 생물학에 기존의 전산유체역학 기법을 적용할 수 있는 가능성을 시험하기 위한 노력으로 볼 수 있을 것이다.

그러나 이런 움직임의 상당 부분은 거품으로 보는 것이 타당할 것이다. 수리생물학에서 가장 핵심적인 연구내용은 세포에서 진행되는 다양한 화학작용의 동적변화를 모사할 수 있는 해석기법을 개발하는 것이다. 그러나 기존의 전산유체역

학은 화학반응이 포함된 물리적 현상을 모사하기에 적합하지 않기 때문에, 수리생물학의 중심분야에서 파생된 부차적인 전달현상에 연구를 국한할 수밖에 없는 문제점을 갖고 있다.

이와 같은 관점에서 연소공학은 다른 열유체공학 분야와 비교하여 매우 다른 입장에 있다고 볼 수 있다. 즉, 생물 시스템이 연소시스템과 마찬가지로 확산-반응 시스템이기 때문에 연소공학에서 개발되었던 많은 이론적 결과와 기법이 생물학에도 적용될 수 있기 때문이다. 따라서 본 논문에서는 수리생물학의 근간을 이루는 근본적인 이론상의 개념을 소개하고 이러한 개념과 연소공학과의 연관관계를 알아보려 한다.

수리생물학을 이야기할 때, 그의 창시자로서 Alan Turing을 언급하지 않을 수 없다. Turing은 Morphogenesis의 근간이 되는 Turing 불안정성을 제안하여 생물 형태가 발생하는 과정에 확산-반응의 물리적 메커니즘의 중요성을 최초로

* 한국과학기술연구원, 환경공정연구부

† 연락처 : kimjs@kist.re.kr

간과하였다[1]. 이로부터 확산-반응 시스템에서 발생할 수 있는 다양한 비선형 물리적/수학적 연구분야가 파생되어 나왔다. 따라서 본 논문의 2절에서는 먼저 Turing의 생애와 업적에 대해서 간단히 알아본 후에, 3절에서 열유체분야와 보다 밀접한 관련이 있는 Morphogenesis의 근간이 되는 Turing 가설을 소개하고 이로부터 파생된 다양한 비선형 역학적 개념을 알아본다. 또한 4절에서는 이러한 개념이 연소공학에 어떻게 적용되고 있으며, 5절에서는 최근의 수리생물학의 발전 방향을 알아보고 수리생물학과 접목될 수 있는 방안을 제시하고자 한다.

2. Turing의 생애와 연구업적

Alan Mathison Turing(1912-1954)은 20세기의 전반기에 영국에서 활동하던 대수학자이다. 동시대의 다른 과학자와 비교하여, 대중적인 주목을 받지는 못하였지만, 그의 영향은 현대과학의 곳곳에 남아있다. 그는 현대 디지털 컴퓨터의 원형이라 할 수 있는 Turing Machine의 개념을 확립하였으며, 2차대전 중에서는 독일군의 암호를 해독하는데 선도적 역할을 수행하였다. 또한 20세기의 후반기가 시작되는 시점인 1952년에는 현대 수리생물학의 근간이 되는 Morphogenesis에 대한 이론을 발표하였다. 즉, Turing은 21세기 초반에 가장 주목을 받고있는 연구분야들인 디지털 컴퓨팅, 암호학 및 수리생물학 분야의 태동에 결정적 기여를 한 과학자로 볼 수 있다.

그러나 본 저자는 대수학에 대한 전문지식이 없으므로, Turing의 디지털 컴퓨팅과 암호학 분야의 연구에 대한 소개는 일반론적인 수준에 머물 것이다. 그러나 동역학적 특성이 강한 Turing 불안정성에 대해서는 보다 구체적인 내용이 소개될 예정이다. 또한 Turing의 생애와 업적에 대한 보다 구체적인 자료는 인터넷의 자료를 검색하거나[2], 그의 전기를 참조할 수 있다[3].

2.1 초기의 연구업적 : Turing Machine

Alan Mathison Turing은 1912년 런던에서 태어났으며, 어려서부터 과학에 대한 재능과 흥미를 보였다. 본격적인 과학자로서의 경력은 Cambridge 대학의 King College에서 수학을 전공하면서 시작되었다. 특히 Princeton 대학의 박사학위 과정에서는 현대적 디지털 컴퓨터의 모체라고 할 수 있는 Turing Machine의 개념에 대한 논문을 발표하게 된다.

Turing Machine의 기본적인 개념은 다음과 같이 요약될 수 있다. Turing Machine은 0과 1로 구성된 수열을 테이프에 읽어들이 수 있다. 여기에서 0과 1의 조합은 일정한 작업을 수행할 수



Fig. 1 Turing의 사진 (1951년 촬영)

있는 단계를 서술하게 되어있다. 또한 전체적인 작업은 위와 같은 단계를 순차적으로 수행함으로써 결과를 획득하게 되어있다. 이와 같은 기계의 구동방식은 현대적 컴퓨터에서는 당연한 것으로 생각되었지만 당시에는 획기적인 새로운 아이디어로 인식되었다고 한다. 특히 초기의 컴퓨터들이 특수한 연산만을 수행하도록 개발된 반면, Turing Machine은 작업을 여러 개의 단순한 명령단위로 분해하여 수행함으로써 보다 다양한 역할을 수행하게 할 수 있다는 점에서 현대적 디지털 컴퓨터에 보다 가깝다고 할 수 있겠다.

훗날, 이와 같은 Turing Machine의 개념은 보다 확장되어, 기계를 통한 인공지능의 구축이 가능하다고 주장하였다. 인공지능의 구현여부는 현재까지도 가장 사람들의 궁금증을 사로잡고 있는 연구분야의 하나이며, 가능성 못지 않게 불가능하다고 주장하는 사람들도 상당히 많은 상태이다. 인공지능에 대한 비관론자의 비판내용 가운데 하나가 "어떻게 인공지능의 보유여부를 판단할 수 있는가?"였으며, 이러한 비판에 대해서 인공지능 보유여부를 판단할 수 있는 Turing Test를 제안하였다.

Turing Test는 시험의 대상이 되는 기계와 사람을 심문관(interrogator)과 격리된 상태에서 수행된다. 심문관은 기계와 사람을 구분할 수 없는 상태에서 문자로 다양한 질문을 보낼 수 있으며, 이때 응답내용에서 인간과 기계를 구별할 수 없을 때, 기계의 인공지능을 인정하게 되는 것으로 되어 있다. 아직까지 Turing Test는 인공지능의 보유여부를 결정하는 테스트로 활용되고 있으며, 또한 Turing Test에 활용될 질문내용을 경쟁하는 대회도 개최되고 있는 실정이다.

2.2. 중기의 연구업적 : Codebreaking

1939년 유럽에서 2차대전이 발발하면서부터 그 는 영국정부를 위해 암호해독작업을 수행하게 된다. 당시 독일군은 enigma라고 불리는 암호통신기를 사용하고 있었다. enigma는 입력기 앞에 설치된 plugboard에 3개 (훗날 4개)의 바퀴를 암호키로 설정하게 되어 있어, 통신문을 암호화할 수 있게 설계되었다. 또한 enigma가 탈취되었다더라도, plugboard의 조합을 모를 경우에는 암호화된 통신문을 해독할 수 없게 되어있다.

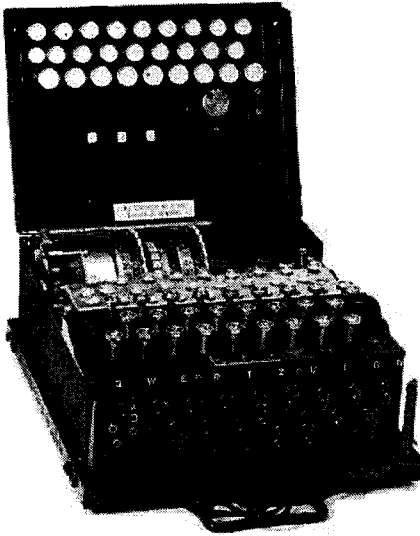


Fig. 91 Enigma의 사진

Enigma의 암호해독을 위한 노력은 2차대전 이전으로까지 거슬러 간다. Poland의 수학자 Marian Rejewski가 초기형태의 enigma를 입수하여 enigma의 비교적 단순한 메시지를 해독할 수 있는 기계인 Polish Bombe를 개발하였다. 2차대전의 발발이후에 Polish Bombe에 대한 연구결과는 영국에 전달되었으며, 영국의 통신성이 암호전문해독을 위해서 운영하던 Bletchley Park에서 Alan Turing과 Gordon Welchman이 진보된 형태의 후기 enigma에 대한 해독기인 British Bombe를 개발하였다. 특히 enigma의 암호해독은 2차대전 중 대서양의 대 U-보트전에서 승리하는데 결정적 역할을 수행한 것으로 평가되고 있다.

Enigma가 일반 군사용 통신문에 활용된 반면, 독일군의 상층부에서는 lorenz라는 암호기계를 활용하고 있었으며, lorenz의 암호해독은 enigma보다 훨씬 어려운 작업이었다. 다행히 lorenz의 송신에러를 통해서 입수된 전문을 활용해서 Tutte가 Lorenz의 기본 작동원리를 파악하였으

며, 곧 Turing은 Turingismus라는 lorenz암호해독의 방법을 고안했다. 이러한 방법으로 암호해독과 관련된 제반 연산 수행할 수 있는 대용량 계산기가 필요하였으며, 이를 수행할 수 있는 전자적 장치인 Colossus가 개발되었다. 최근 영국에서는 단지 Colossus가 전시비밀로서 전후 30년후에나 대중적으로 알려지게 되었을 뿐, 실제 ENIAC 보다 2년 앞서 개발된 세계최초의 전자계산기라고 주장하고 있다.

2.3. 말기의 연구업적 : Morphogenesis

2차대전의 종료후에 Turing은 National Physical Laboratory와 University of Manchester에서 전자계산기의 개발에 관련된 연구를 수행한다. 그러나 그의 인생의 말기에는 (비록 40전후의 젊은 나이이나) 연구 업적보다는 비극적 인생역정이 오히려 세상의 주목을 받게된다. 1951년에는 Royal Society의 Fellow로 선출되는 영광이 있었으나, 1952년에는 동성애금지법에 의해서 기소되어 강제적인 호르몬 치료를 받게되며, 1954년에는 그의 아파트에서 죽은 채로 발견된다.

그의 공식적인 사망원인은 일시적인 화학적 불균형에 의해서 충동적으로 청산가리 음독으로 알려져 있다. 그러나 사망에 이르게 된 원인으로는 동성애와 염세주의적 성향에서 비롯된 자살설에서 자작 화학실험과정에서 발생한 사고설과 영국 정부에 의한 살해라는 음모론까지 매우 다양한 이론이 회자되고 있는 실정이다. 또한 그의 생애에 대한 연극 "Breaking the Code"가 런던과 뉴욕에서 1987년과 1988년에 공연되었으며, 후에 TV 영화로 제작된 바도 있다.¹⁾

Turing의 말기에 나온 주목할 만한 연구결과는 전술된 인공지능에 관한 연구와 "The Chemical Basis of Morphogenesis"이라는 논문에 발표된 생물의 발생과 관련된 연구를 들 수 있다[1]. 그는 생물발생과정을 확산-반응시스템의 고유 불안정성의 축적으로 보고 있는 것이 특징이다. 이후 Turing에 의해 제안된 확산-반응 시스템에 대한 연구는 수리생물학의 출발점이며 비선형역학의 지평을 넓힌 연구로 인식되고 있다. 이에 대한 보다 구체적인 내용을 다음절에 서술하도록 하겠다.

3. Morphogenesis

Turing의 논문 "The Chemical Basis of the Morphogenesis"에 나온 Turing 불안정성의 개념은 현대 수리생물학의 장을 열었다고 할 수 있는 기본을 이루는 개념이다. 즉, 현상적 모델에 기초

1) Turing역은 영화 "Gladiator"에서 Senator Gracchus 역을 맡았던 Sir Derek Jacobi가 맡았음

를 두었던 기존의 이론과 달리 반응과 확산과정이라는 단위 물리적 과정을 고려하였다는 점에서 현대 수리생물학의 시발점으로 평가받고 있는 것이다. 다음에서는 Turing 불안정의 기본 개념을 간단한 모델을 통해서 알아보자[4].

3.1 Turing 불안정성

생물의 발생에서 핵심이 되는 요소는 대칭성-파괴-불안정성 (symmetry breaking instability)이다. 즉 수정란과 같이 균일한 상태의 물질이 복잡한 구조의 생명체로 발생되기 위해서는 균일성을 파괴할 수 있는 공간적 불안정성이 개입되어야 하며, Turing은 이러한 불안정성으로 확산-반응시스템의 고유 불안정성을 제안하였다.

수정란 속에 Morphogene이라는 물체들이 있으며, 이들은 각각 화학반응의 activator (u) 와 inhibitor (v) 로서 역할을 수행하는 것으로 설정될 수 있다. 이때 u 와 v 에 대해 적용할 수 있는 가장 간단한 형태의 보존 관계식이 다음에 주어진다.

$$\begin{aligned} \partial_t u &= D_1 \partial_x^2 u + a_1 u - b_1 v \\ \partial_t v &= D_2 \partial_x^2 v - a_2 v + b_2 u \end{aligned} \quad (1)$$

안정성 해석을 위한 첫 단계로서, 공간적으로 균일한 정상상태를 고려하여야 한다. 그러면 정상상태는

$$\begin{bmatrix} a_1 & -b_1 \\ b_2 & -a_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{u} \\ \bar{v} \end{bmatrix} = 0 \quad (2)$$

로 표현될 수 있으며, 이때 0이 아닌 정상상태의 해를 갖기 위해서는 위의 행렬의 결정요소 (determinant)가 0이 되어야 하는

$$a_1 a_2 = b_1 b_2 \quad (3)$$

조건을 만족시켜야 한다.

안정성의 해석을 위해서 다음과 같은 섭동이 고려될 수 있다.

$$\begin{aligned} u &= \bar{u} + \epsilon u' \exp(\sigma t + ikx) \\ v &= \bar{v} + \epsilon v' \exp(\sigma t + ikx) \end{aligned} \quad (4)$$

위의 섭동식을 지배방정식에 대입하면)

$$\begin{bmatrix} \sigma + D_1 k^2 - a_1 & b_1 \\ b_2 & \sigma + D_2 k^2 + a_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u' \\ v' \end{bmatrix} = 0 \quad (5)$$

의 식을 얻을 수 있다. 여기에서 좌측의 행렬에 대한 결정요소가 0이 되면 해가 존재할 수 있으며, 이 조건으로부터 이산방정식을 얻을 수 있다.

위의 식을 보다 간단하게 풀기 위해서, 여기에서는 중립안정성의 조건 ($\sigma = 0$) 만을 고려하기로 한다. 그러면 중립조건은

$$\begin{aligned} (D_1 k^2 - a_1)(D_2 k^2 + a_2) + b_1 b_2 &= \\ D_1 D_2 k^4 + (a_2 D_1 - a_1 D_2) k^2 &= 0 \end{aligned} \quad (6)$$

이 되며, 위의 식은

$$k_1^2 = 0 \quad k_2^2 = (a_1/D_1 - a_2/D_2) \quad (7)$$

사이에서 중립적 불안정성을 보이게 된다. 따라서 0이 아닌 파동수 k_2 가 양의 실수로 존재하기 위해서는

$$a_1/D_1 > a_2/D_2 \quad (8)$$

의 조건을 만족시켜야 되며, $0 < k < k_2$ 의 범위에서 공간적으로 주기적인 불안정성이 발생할 수 있다. 이때 가장 빠른 진폭의 증가율을 보이는 파동수의 제곱은

$$k^2 = (a_1/D_1 - a_2/D_2)/2$$

로 주어진다.

이러한 조건을 물리적으로 다시 해석하면, D_1/a_1 을 특성활성화 길이의 제곱으로 볼 수 있으며, D_2/a_2 를 특성소화 길이의 제곱으로 볼 수 있다. 따라서 주기적인 확산-반응 시스템은 점화 길이가 소화 길이보다 작은 경우에 발생할 수 있으며, 이를 "국부적 활성화와 거시적 소화 (local activation with later inhibition)"의 원리라고도 한다.

또한 위의 시스템에서 화학반응 사이의 교차연계 (cross coupling)가 강한 경우에는,

$$b_1 b_2 > (a_1 + a_2)^2/4 \quad (9)$$



Fig. 3 Turing 모델의 수치모사결과

(즉, 식 (9)의 조건을 만족시키는 경우에는) 진동 불안정성이 발생하는 것으로 알려지고 있다.

Turing 불안정성은 일면 생물학적 Turing Machine의 개념이라고 볼 수도 있다. 즉, Turing Machine이 각각의 단위명령을 순차적으로 수행하여 작업을 진행하는 것과 같이, 생물학적 발생도 Turing 불안정성의 순차적 진행에 의해서 이루어진다는 유사성이 존재하고 있기 때문이다. 앞의 Fig. 3은 비교적 간단한 2-원소 확산반응시스템의 수치모사를 통해서 얻어진 조개껍질의 형상과 유사한 패턴을 보여주고 있다.

3.2 Belousov-Zhabotinsky 화학반응

확산-반응시스템 가운데에서 가장 인상적인 불안정성을 보이는 시스템이 Belousov-Zhabotinsky (B-Z) 반응이다. B-Z 반응은 1951년에 Belousov가 발견한 진동 불안정성의 특성을 보이는 일종의 자기촉매반응 (auto-catalytic reaction)으로, 반응에 의해서 금속의 이온가가 변할 때 다른 색을 나타내기 때문에 반응의 결과를 시각적으로 직접 관찰할 수 있는 장점이다. 그러나 B-Z 반응에서 진동 불안정성이 발견되었다는 결과가 최초로 발표되었을 당시에는 Belousov의 주장이 전적으로 무시가 되어 공식적인 논문으로 발표되지 못했다. 그러나 비선형역학과 수리생물학에 대한 이해의 증가 및 약 20년 후에 발표된 Zhabotinsky에 의한 재발견에 의해서, 확산-반응시스템을 대표하는 불안정성으로 인정받게 되었다. B-Z 반응의 일반적인 특징은 다음과 같이 요약될 수 있다 [4].

Belousov-Zhabotinsky 반응은 반응시스템의 조건에 따라서 다음의 다섯 종류에 해당하는 시공간적 불안정성을 나타내는 것이 알려지고 있다. 균일하게 혼합된 B-Z 반응계 (stirred) 에서

는 (1) 초기조건에 따라서 반응시스템이 다른 균일한 정상상태를 보일 수 있는 특성이 있다 (bistability). (2) 또한 반응시스템의 다른 조건에서는 시스템이 공간적으로 균일한 상태에서 시간적으로 수분 단위의 주기를 갖고 진동하는 특징도 보일 수 있다 (oscillation).

한편 비혼합 시스템에서는 (unstirred) (3) 한 개의 펄스가 생성되어 원주방향의 밖으로 전파되는 현상이 발생할 수 있다 (propagating pulse). 이와 같이 여기된 상태의 펄스가 전파되어 나가기 위해서는 비선형적 외란이 작용되어야 한다. 여기에서 비선형적 외란에 의해서 시스템이 여기될 수 있는 것을 여기가능 (excitability) 이라고 하며, 이러한 현상이 발생할 수 있는 매체를 여기가능 매체 (excitable media)라고 한다.

(4) 여기 가능한 (excitable) 시스템에서는 펄스가 계속적으로 발생하여 외부로 전파되어 나가는 마치 과녁모양 (target pattern) 형상을 형성할 수도 있다. 이와 같이 펄스를 계속 발생시킬 수 있는 형상의 중심부를 pace maker라 하며, 보통 입자와 같이 지속적인 외란을 가할 수 있는 불순물 (impurity)이 관여되는 것으로 알려지고 있으나, 최근에는 균일한 시스템에서도 과녁형상이 생성될 수도 있는 것으로 알려지고 있다.

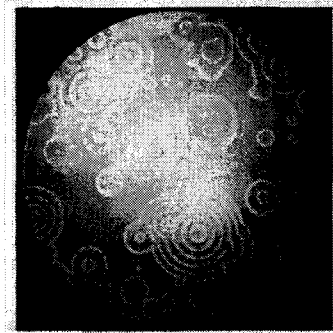


Fig. 4 B-Z 반응에서 관찰된 과녁형상



Fig. 5 B-Z 반응에서 관찰된 스파이럴 형상

(5) 과녁형상에서 전파되는 파동면이 외란에 의해서 두 개로 분리될 경우, 서로 반대방향으로 회전하는 두 개의 대칭적 바람개비 형상 (spiral pattern)이 형성되는 현상도 목격되고 있다. 그러나 여기현상, 과녁형상 및 스파이럴형상은 모두 같은 초기조건에서 외란에 의해서 발생하는 현상들이라는 사실에 주의할 필요가 있으며, 기본적으로 비선형 현상들이다. 앞의 Fig. 4와 5는 B-Z 반응에서 발견된 과녁형상과 스파이럴형상의 사진들이다.

3.3 Oregonator 모델

위에서 설명된 B-Z 반응의 비선형현상에 대한 가장 일반적 이론의 하나가 oregonator 모델이다 [4]. Oregonator 모델은 두 개의 화학종이 2단계에서 걸쳐서 반응하는 2화학종-2단계 반응을 채택하고 있다. 반응의 일반적 성질은 연소의 반응과도 유사한 점이 많다. 즉, activator의 생성과 관련된 반응은 빠르고 보다 비선형성이 큰 반응으로 구성되어 있으며, inhibitor와 관련된 반응은 상대적으로 느리며 비선형성도 크지 않다.

이러한 2화학종-2단계 반응에 대한 지배방정식을 세우면,

$$\begin{aligned} \partial_t u_1 &= D_1 \partial_x^2 u_1 + h(u_1, u_2) / \epsilon \\ \partial_t u_2 &= D_2 \partial_x^2 u_2 + g(u_1, u_2) \end{aligned} \quad (10)$$

로 주어질 수 있다. 여기에서 u_1 은 activator, u_2 는 inhibitor를 나타내며, D_1 과 D_2 는 각각 activator와 inhibitor의 확산계수이다. 또한 activator의 반응물에 나타난 ϵ 은 activator의 반응이 빠르다는 것을 나타내기 위한 작은 확장인자이다. 따라서 ϵ 을 제외한 모든 변수는 $O(1)$ 으로 생각할 수 있다.

위의 oregonator 모델의 특성을 가장 잘 보여줄 수 있는 것이 다음에 나타낸 oregonator의 중립 매니폴드의 그림이다.

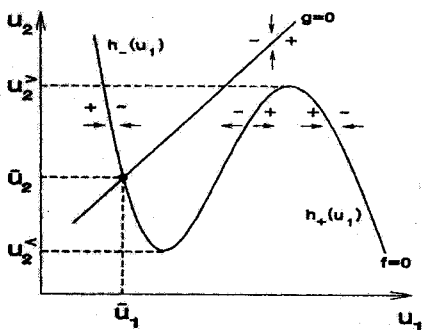


Fig. 6 Oregonator의 중립 매니폴드

2단계 반응 가운데, activator의 생성을 제어하는 $h(u_1, u_2)$ 는 비선형성이 매우 크다. 따라서 연소의 S-곡선과 유사한 역 N-곡선의 중립 매니폴드를 보인다. 여기에서 역 N-곡선의 아랫 부분은 inhibitor의 농도가 상대적으로 낮으므로 activator의 농도가 증가하는 구역이며, 윗 부분은 activator의 농도가 감소하는 부분이다. 따라서 역 N-곡선의 가운데 브랜치(middle branch)는 불안정한 구역이며, 왼쪽과 오른쪽의 중립 매니폴드는 반응의 기저상태 및 여기상태를 나타내고 있다. 한편 inhibitor의 생성을 제어하는 $g(u_1, u_2)$ 는 비선형성이 낮기 때문에 단조적으로 변화하는 특성을 보이고 있다. 여기에서 중립 매니폴드의 윗 부분 (또는 왼쪽 부분)은 inhibitor가 감소되는 영역이며, 아랫부분 (또는 오른쪽 부분)은 inhibitor가 증가되는 영역이다.

위의 중립 매니폴드는 B-Z 시스템의 초기조건에 따라서 시스템의 변화를 제어하는 기본적인 틀을 제공한다. 특히 활성화(activation)반응의 중립 매니폴드와 활성억제(inhibition)반응의 중립 매니폴드와 교차점이 node를 구성하며, node의 특성에 따라서 전체적인 시스템의 동적 특성이 정의될 수 있다. 한편 추가적으로 인지하여야 할 사항은 활성화반응의 반응물이 훨씬 빠르므로, 반응이 비평형상태에 있을 경우, activator의 농도가 먼저 변화한 후에 inhibitor의 농도가 변화하여 평형상태로 접근하는 특성을 보인다.

앞에서 언급된 B-Z 반응시스템에서 관찰된 5가지의 비선형 현상에 대응되는 매니폴드의 구조가 다음에 설명되어 있다. 먼저 bistability의 경우에 해당하는 매니폴드 구조가 Fig. 7에 주어져 있다.

위의 그림과 같이 활성억제(inhibition)반응의 중립 매니폴드의 기울기가 낮은 경우에는 3개의 노드를 갖을 수 있다. 이들 3개의 노드에서 활성화반응의 중간 브랜치에 있는 노드는 불안정한 노드이므로 관찰할 수 있는 정상상태에 해당되지 않는다.

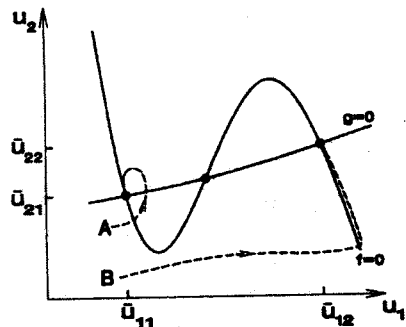


Fig. 7 Bistability 시스템의 매니폴드 구조

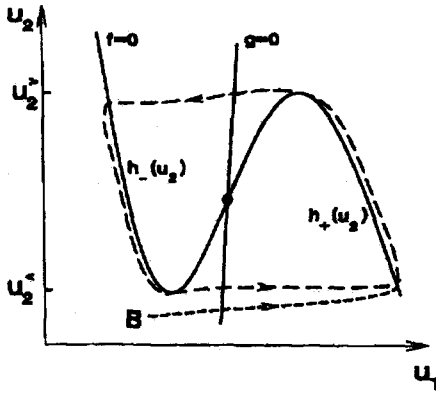


Fig. 8 진동 시스템의 매니폴드 구조

그러나 초기조건 A와 같이 기저상태 노드에서 가까운 초기조건에서는 기저상태로 시스템이 끌리게 된다. 그러나 기저상태에 있는 saddle node bifurcation 조건 (왼쪽에 있는 Turning Point) 보다 초기조건이 먼 경우에는 (즉 inhibitor의 농도가 충분히 낮은 경우), activator의 농도가 급격히 증가하며, activator의 농도가 오른쪽 브랜치에 충분히 가까워지면, inhibitor의 농도가 서서히 증가하여 정상상태에 도달하게 된다. 따라서 초기조건에 따라서 기저상태 또는 여기상태의 정상상태로 시스템이 끌려가는 현상을 나타낼 수 있다.

한편 진동하는 시스템의 매니폴드 구조가 Fig. 8에 주어져 있다. 진동시스템에서는 활성화반응과 활성화억제반응의 중립 매니폴드의 교차점으로 형성된 노드가 오직 하나만 존재하며, 특히 이 노드가 불안정한 가운데 브랜치에 위치하고 있어, 안정적인 정상상태가 존재하지 않는 경우에 발생한다.

먼저 초기조건에 inhibitor의 농도가 매우 낮다고 가정하면, activator의 농도가 급격히 증가해서 활성화반응의 여기상태 중립 매니폴드에 접근할 것이다. 그러나 activator의 높은 농도로 인해서 inhibitor의 농도가 서서히 증가하게 되며, inhibitor의 농도가 여기상태에 존재하는 saddle node bifurcation 조건을 초과하면 활성화반응이 급격히 억제되어 activator의 농도가 기저상태로 급격히 감소한다. 그러나 급격히 감소한 activator의 농도는 재차 inhibitor의 농도를 서서히 감소시킨다. 이와 같이 확산-반응 시스템에 안정된 노드가 존재하지 않는 경우에는, activator와 inhibitor가 순차적으로 증가와 감소를 반복하게 되어, 공간적으로는 균일하지만 시간적으로는 진동하는 특징을 나타낸다.

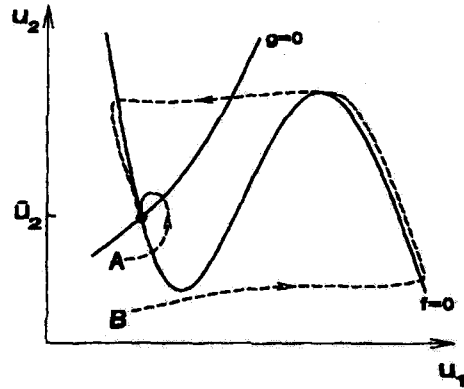


Fig. 9 여기가능 (excitable)시스템의 매니폴드 구조

한편, propagating pulse, 과녁형상 및 스파이럴 형상과 같은 비선형 형상과 관련된 현상들은 B-Z 시스템이 여기가능할 (excitable) 때 발생한다. 여기가능 시스템의 전체적인 매니폴드 구조가 다음의 Fig. 9와 같이 주어질 수 있다.

여기가능 시스템의 매니폴드 구조에서는 기저상태에 단 하나의 안정한 노드가 존재한다. 따라서 초기조건에 포함된 외란이 작아서 안정된 노드에 충분히 가까운 경우에는 기저상태의 정상해로 끌려가게 될 것이다. 그러나 초기조건 외란이 커서 inhibitor의 농도가 기저상태 브랜치에 있는 saddle node bifurcation 조건의 inhibitor 농도보다 작을 경우에는 시스템이 여기상태로 천이할 수 있다. 즉, inhibitor의 농도가 매우 작기 때문에, activator의 농도가 급격히 증가하며, 여기상태에 가까이 다다르면 activator의 농도 변화 매우 작은 상태에서 inhibitor의 농도가 서서히 증가하게 된다. 그러나 inhibitor의 농도가 임계치보다 높게 되면 다시 기저상태로 천이된 후에 inhibitor의 농도가 줄어서 기저상태의 정상해로 돌아오게 된다. 즉 여기가능 시스템에서는 앞의 Fig. 9에서 보여준 경우 B와 같이 충분히 큰 외란에 의해서 여기상태의 pulse가 전파되어 나갈 수 있다.

과녁형상은 여기가능 시스템에서 pulse를 지속적으로 전파시킬 수 있는 충분히 큰 외란을 만들어낼 수 있는 요소가 존재할 때 발견될 수 있다. 이와 같이 충분한 외란을 주기적으로 만들 수 있는 물리적 장치를 pace maker라고 한다. pace maker에는 심장에서와 같이 화학반응의 부가적인 조절장치가 있는 경우에 해당될 수 있지만, 시스템에 먼지 등과 같이 라디칼을 재결합시킬 수 있는 불순물이 (impurity) 포함되었을 때 pace maker의 기능을 수행할 수 있다.

스파이럴 형상은 전파되는 펄스 또는 과녁형상

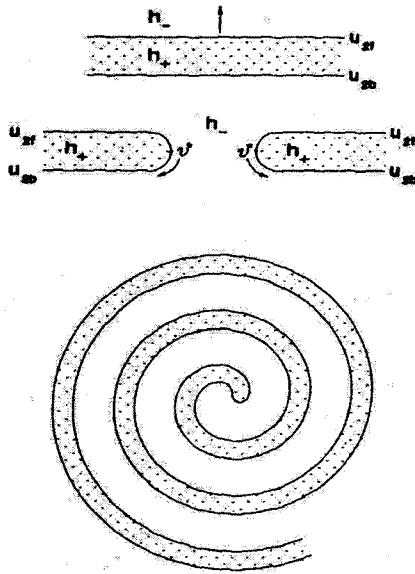


Fig. 10 스파이럴이 형성되는 과정

이 변형되어 발생하는 현상이다. Fig. 10과 같이 전파되고 있는 펄스의 한 부분이 외부적인 요인에 의해서 끊어질 경우, 끊어진 펄스의 선단부의 속도가 균일하지 않기 때문에 말리게 되며, 결과적으로 스파이럴 형상이 생성된다. 또한 스파이럴이 생성될 때에는 끊어진 펄스의 대칭적인 펄스가 존재하므로, Fig. 5에서와 같이 서로 반대 방향으로 회전하는 스파이럴이 한쌍으로 존재하는 것이 일반적이다.

4. 연소와 Turing 불안정성

열-유체공학분야에서 가장 쉽게 만날 수 있는 확산-반응시스템이 연소시스템이다. 연소시스템은 이류의 (advection) 영향이 매우 중요하다는 차이점을 빼고는 생화학 시스템에서 발견되는 확산-반응 시스템의 특징을 그대로 보유하고 있다. 특히 반응물질들 사이의 특성거리의 차이에서 발생하는 Turing 불안정성이 발생하고 있으며, 연소시스템에서는 이를 확산-전도 불안정성이라고 부르고 있다. 그럼 확산-전도 불안정성과 일반적인 Turing 불안정성과의 관계를 다음에 서술하였다.

4.1 확산-전도 불안정성

연소의 확산-전도 불안정성과 다른 확산-반응시스템의 Turing 불안정성에서는 많은 비슷한 점과 다른 점이 있다. 연소 시스템에서의 불안정성은 주로 활성화에너지가 매우 큰 총체적 1단계

화학반응에 대해서 적용되는 활성화 에너지 접근법 (Activation Energy Asymptotics, AEA)를 통해서 연구된 반면, 일반적 확산-반응 시스템에서는 다단계 (주로 2단계) 반응이 고려되고 있다. 또한 연소시스템의 화학반응물은 매우 빠를 뿐만 아니라 온도에 매우 민감한 함수로 주어진다. 따라서 화학반응물의 비선형성이 매우 크기 때문에, 불안정성에 대한 해석이 매우 어렵고, AEA라는 특수하게 고안된 섭동방법이 동원되어야 한다. 그럼에도 불구하고 앞에서 제시된 주기적 불안정성의 조건인 식(8)을 예혼합화염의 온도 (u)와 반응물 (v)에 대해서 적용할 경우, 온도의 확산계수가 반응물의 확산계수보다 작은 경우에 발생하는 (즉, 반응물의 Lewis 수가 1보다 작은 경우에 발생하는) 확산-전도 불안정성이 재현될 수 있다. 물론 이 경우, 화염의 이동에 의해서 유도되는 이류의 영향과 반응의 비선형성 영향에 의해서 주기적 불안정성의 임계조건이 Lewis 수가 정확히 1이 아닌 1보다 약간 작은 값에서 발생하는 차이는 있지만, 유사한 정성적 특성을 보이고 있다.

Fig. 11의 사진에서는 연소시스템에서 Lewis수가 1보다 작은 경우에 발생하는 확산-전도 불안정성의 결과로 형성된 예혼합화염의 cellular pattern을 보여주고 있다.²⁾

이와 같이 확산-전도 불안정의 근본적 특성이 Turing 불안정성과 같이 반응영향이 주변으로 확산되는 범위의 차이 때문에 발생한다는 유사점으로 인해서, 최근에는 Buckmaster의 제안에 의해서 확산-전도불안정성을 Turing 불안정성으로 부르는 것이 연소이론계에서 점차 폭넓게 채택되고 있는 실정이다.

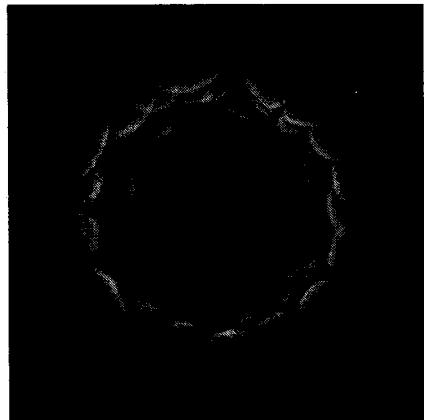


Fig. 11 확산-전도 불안정성에 의한 화염의 cellular 구조

2) 불안정성의 결과로서 Cellular Flame이 형성되므로 Cellular Instability라고도 불림.

4.2 연소시스템에서 발생하는 형상생성

연소시스템에서는 주기적 불안정성인 cellular instability만 발생하는 것이 아니라 Lewis수가 1보다 충분히 큰 경우에는 진동불안정성도 발견되고 있다. 그러나 연소의 진동불안정성과 Turing의 진동불안정성의 근원에는 상당한 차이가 있는 점에 주의할 필요가 있다. 즉, Turing의 확산-반응 모델에서는 진동불안정성이 화학반응의 폭발적 연쇄반응을 제어하기 위한 feedback loop의 교차연계(cross coupling)가 강한 경우에 발생하는 것으로 예측된 반면, 연소의 진동불안정성은 화염의 빠른 열확산에 대한 연료 확산이 충분치 못한 경우, 화염전파속도의 응답지연(response delay)이 생겨서 발생하는 현상이다. 따라서 화염의 진동 확산-전도 불안정성에 기인하는 진동불안정성은 Lewis 수에 의해서 제어되며, 앞의 식 (9)에 주어진 교차연계에 의한 진동불안정성 발생예측과 무관한 현상임을 알 수 있다.

이밖에도 반응물과 생성물의 밀도차이에 의한 Landau-Darrieus 불안정성 및 음향파와 같이 주기적 외란에 의한 불안정성도 발생하고 있다. 이러한 불안정성의 영향에 의해서 다양한 형상생성(pattern formation) 현상이 속속 발견되고 있다. 연소시스템에서 발견된 대표적인 형상생성 현상이 Fig. 12에 제시되어 있다. Pearlman과 Ronney는 아래로 전파하는 Lewis수가 1보다 큰 예혼합화염에서 Fig. 12의 (a)와 (b)와 같이 파넛형상 및 스파이럴 형상을 관찰한 바가 있다 [5]. 또한 Nayagam과 Williams는 Von Karman 와류에 형성시킨 확산화염에서 Fig. 12의 (c)와 같은 매우 안정적인 스파이럴 화염을 관찰하기도 하였다[6].

특히 스파이럴 형상은 동적 매니폴드가 특이점과 가까운 지역에서 발견될 수 있는 매우 특수한 물리적 현상으로서 형상생성과 관련된 많은 물리적 메커니즘들이 동시에 관여되는 특성을 보이고 있다. 따라서 확산-반응 시스템에서 발생하는 형상생성 현상을 이해하는데 가장 핵심적 물리적 현상으로 인식되고 있어, 이론적 해석의 주된 대상으로 채택되고 있다.

형상생성과 관련되어 특별한 관심이 필요한 또 다른 연소분야가 flame edge이다. flame edge는 연소에서 동결된 지역과 연소되고 있는 지역을 연결시켜주는 국부적 구조로서 여기 가능한 매체에서 발생하는 물리적 현상의 하나로도 볼 수 있다. 특히 Nayagam과 Williams의 실험에서 발견된 스파이럴은 연소의 상태가 동결과 연소를 시간차표에서 반복적으로 친이하고 있는 연속적인 propagating pulse (즉, wave train)의 현상을 보이고 있다. 특히, Nayagam과 Williams는 활성화 에너지 접근법을 이용하여 flame edge의 전파

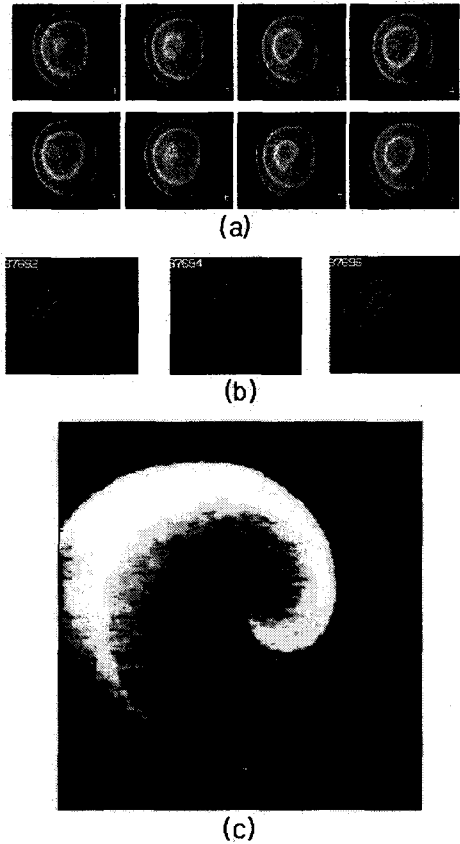


Fig. 12 연소에서 발견된 형상생성 현상
(a) Pearlman과 Ronney가 발견한 파넛형상
(b) Pearlman과 Ronney가 발견한 스파이럴형상 및 (c) Nayagam과 Williams가 발견한 스파이럴형상

속도가 일정한 Lewis수 지역에서 하나 이상의 안정된 속도를 갖을 수 있다는 것을 보였으며, 이를 통해서 스파이럴의 구조를 해석할 수 있는 가능성을 열어주었다 [6]. 특히 그들의 해석은 지금까지 스파이럴이 2단계 화학반응을 통해서 해석된 것과 다르게, 1단계 화학반응을 통해서 해석되고 있다는 점이 특이하다.

5. 21세기의 수리생물학

21세기를 시작하는 현 시점에서 수리생물학분야에 매우 큰 변화의 바람이 불고 있다. 최근까지 수리생물학의 연구가 단순화된 화학반응 모델에 입각한 연구였다면, 이제는 상세화학반응을 이용한 연구가 가능한 단계로 들어가는 있는 상태이다. 즉, 90년대에 이룩한 분자생물학 연구결과의 축적으로 생화학 반응의 기초가 되는 분자구조 (즉, 단백질 구조)를 파악할 수 있게 되었으

며, 또한 이러한 단백질들이 생체시스템 안에서 화학반응을 일으키는 반응경로가 알려지기 시작하여, 대장균 (E-Coli), 이스트, 초파리와 같이 비교적 많은 연구가 수행된 객체에 대해서는 상세 화학반응을 채택한 연구가 수행되고 있다.

그러나 생화학적 반응은 연소의 반응과 중요한 차이점이 있다. 먼저 연소의 화학반응이 매우 빠르고 온도에 민감한 특징을 보이고 있는 반면, 생화학적 반응은 비교적 느리고 매우 작은 온도 범위에서만 작동하고 있다는 점이다.

보다 근본적 차이는 반응경로의 구조가 상당히 다르다는 점이다. 연소시스템에서는 연쇄반응에 의한 반응률이 지수적으로 가속되는 것이 가능하며 이러한 현상을 폭발이라고 부를 수 있다. 또한 경우에 따라서는 폭발현상을 이용한 응용시스템의 개발도 시도되고 있다. 그러나 생물학적 시스템에서는 연쇄반응을 매우 엄격하게 제어하고 있다.³⁾ 따라서 연쇄반응의 제어를 위해서 다양한 feedback loop이 발달하여, 어떤 반응물의 농도가 임계치 이상으로 증가될 경우 feedback loop이 작동하여 더 이상의 증가를 억제하게 된다. 따라서 전체적인 반응경로는 가장 빠른 반응경로를 중심으로 하는 줄기형이 표현되지 않고 매우 복잡한 그물형 (또는 전기회로 형태)의 구조를 보이게 된다.

이와 같이, 각 반응단계의 반응률에 대한 비선형성은 2차 정도의 매우 낮은 비선형성을 나타내지만, 복잡한 반응경로에서 발생하는 비선형성의 영향을 해석하는 것이 생화학적 반응에 대한 이론적 연구 또는 수치모사의 최대의 난관으로 인식되고 있다.

이러한 생화학적 반응에 대한 이론적 해석을 위해서 다양한 수학적 도구가 적용되기 시작하고 있다. 먼저 시스템의 비선형 동적운동의 특성을 파악하기 위한 비선형역학 및 수치해석적 도구가 적용되고 있다. 또한 복잡한 feedback 반응경로의 영향을 파악하기 위해서 제어이론 및 네트워크 이론이 도입되고 있다. 특히 후자는 시스템을 연속체로 보지 않고 입자 (즉 분자)의 조합 및 그들이 포함한 정보의 단속적 교환으로 보는 관점에서 출발하는 것이 고전적 유체역학 이론과 다르다. 이와 같이 생물학적 시스템은 기존의 연속체 역학의 성격과 더불어 입자적 성격도 같이 포함한 매우 복합성이 강한 시스템으로 이를 해석하기 위해서는 다양한 수학적 기법이 필요한 분야이다.

생체시스템에 대한 수치모사기법은 매우 다양한 응용분야가 존재하고 있다. 가장 유력한 응용분야는 신약이 작용하는 반응과정에 대한 수치해

석으로 신약의 효능 및 부작용을 예측하는 분야이다. 이러한 수치실험을 통해서 신약개발에 동반되는 막대한 임상실험의 비용 및 시간을 획기적으로 낮추는 것이 가능할 것이다. 또한 다양한 유해화학물질의 영향을 파악할 수 있는 도구로도 개발되고 있으며, 발효공학과 같이 식량의 생산 및 가공을 위한 응용분야에도 적용이 시도될 수 있다.

6. 결론

지금까지 현대 수리생물학의 근간이 되는 Turing 불안정성을 제시하였던 Turing의 생애와 그의 연구업적에 대해서 간단하게 알아보았으며, 또한 Turing 불안정성의 기본 개념과 그에서 파생된 비선형이론에 대해서도 알아보았다. 또한 이러한 개념이 열-유체역학 분야에서 발견되는 확산-반응시스템과 어떻게 연관되는가를 연소불안정을 중심으로 알아보았다. 특히, 생명공학에 대한 관심이 증가하고 있는 시점에서, 고전적 전산유체역학 및 연소수치모사기법이 상세반응을 포함한 최신 수리생물학 분야에 적용될 수 있는 가능성에 대해서도 간단하게 알아보았다.

이미 앞에서 논의 되었다시피, 수리생물학은 열-유체분야의 연구자가 진출할 수 있는 가능성이 높은 분야로서 향후 많은 연구노력이 투입될 필요성이 매우 크다. 특히 생물학적 시스템은 매우 복잡한 반응경로를 갖고 있으므로, 거의 무한대에 가까운 변이의 조합이 가능하다. 따라서 수치모사가 매우 유용한 도구일지라도, 생체적 변화를 체계적으로 이해하기 위해서는 생물시스템의 동적 특성을 이해하는 것이 핵심적일 수 있다. 이러한 동적 특성을 이해하기 위해서는 생물시스템에서 발생하는 전달 및 반응현상에 대한 보다 체계적인 연구가 필요하다고 할 수 있다. 이러한 연구를 보다 구체적으로 분류한다면, (1) 생물학적 시스템에서 진행되는 전달현상과 관련된 물리적 현상, (2) 확산-반응시스템 고유 물리적 현상 및 (3) 복잡한 화학반응경로에서 기인하는 물리적 현상으로 나눌 수 있을 것이다. 이러한 분야에 대한 체계적인 연구에 보다 많은 관심을 가져주시기를 본 저자는 바라는 바이다.

후 기

본 연구는 한국과학재단의 특정기초연구사업 (2000-1-30400-010-3)에서 지원을 받아 수행되었습니다.

3) 반응물질의 지속적 증가가 전체시스템에 미치는 부정적 영향이 매우 크며, 제어되지 않는 연쇄반응의 대표적인 경우가 암이다.

참고문헌

- [1] Hodges, A., "The Alan Turing Homepage," <http://www.turing.org.uk/turing/>.
- [2] Hodges, A., "Alan Turing: the Engima," Walker and Co., NY, 2000.
- [3] Turing, A. M., "Chemical Basis of the Morphogenesis," *Phil. Trans. R. Soc. B*, Vol. 237, 1952, pp. 37.
- [4] Cross, M. C. and Hohenberg, P. C., "Pattern Formation Outside of Equilibrium," *Rev. Modern Physics*, Vol. 65, 1993, pp. 851.
- [5] Pearlman, H. G. and Ronney, P. D., "Self-Organized Spiral and Circular Waves in Premixed Gas Flames," *Journal of Chemical Physics*, Vol. 101, 1994, pp. 2632.
- [6] Nayagam, V. and Williams, F. A., "Lewis-number Effects on Edge-flame Propagation," *J. Fluid Mech.*, Vol. 458, 2002, pp. 219.