완화시간분포를 계산하는 간단한 수치해법

조광수, 안경현, 이승종
서울대학교 응용화학부

A Simple Numerical Method for Relaxation Time Distribution

Kwang Soo Cho, Kyung Hyun Ahn, and Seung Jong Lee
School of Chemical Engineering, Seoul National University

서론

완화시간분포로부터 완화탄성률, 동적점탄성율 등 모든 선형점탄성물질 함수를 계산할 수 있어 매우 유용하지만 직접 측정할 수 있는 방법이 없다. 따라서 많은 연구자들이 이를 구하는 방법을 제안했는데 이는 결국 ill-posed inverse problem을 푸는 것이 된다. 가장 많은 연구자들이 채택한 방법은 Tikhonov Regularization을 이용한 것이지만 본 연구에서는 Regularization이 아닌 보다 간단한 수치해법을 개발하였다. 이 간단한 수치해법은 놀랍게도 기존의 Regularization Method가 주는 해와 동등 이상의 정밀한 해를 제공한다.

본론

동적점탄성율 $G'(\omega)$과 $G''(\omega)$는 다음과 같이 구해진다.

$$G'(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty} H(\tau)\frac{\tau^2\omega^2}{1+\tau^2\omega^2}\,d\log\tau$$
$$G''(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty} H(\tau)\frac{\tau\omega}{1+\tau^2\omega^2}\,d\log\tau \tag{1}$$

완화시간분포 $H(\tau)$를 실험 Data $G(\omega)$를 구하기 위해서 다음과 같은 Nonlinear Iterative Mapping의 사용을 제안한다.

$$H^{(n+1)}(\tau)=H^{(n)}(\tau)\exp\left[\Delta\log G_{(n)}(\tau^{-1})\right] \tag{2}$$

여기서

$$\Delta\log G_{(n)}(\tau^{-1})\equiv\log G'_{data}(\tau^{-1})-\log\left[\int_{-\infty}^{\infty} H^{(n)}(\tau)\frac{\tau^2\omega^2}{1+\tau^2\omega^2}\,d\log\tau\right]$$
$$+\log G''_{data}(\tau^{-1})-\log\left[\int_{-\infty}^{\infty} H^{(n)}(\tau)\frac{\tau\omega}{1+\tau^2\omega^2}\,d\log\tau\right] \tag{3}$$

식 (3)에서 $G'_{data}(\tau^{-1})$ 와 $G''_{data}(\tau^{-1})$ 은 실험 결과로 얻어지는 동적점탄성율의 $\omega=\tau^{-1}$ 이 되는 주파수에 대한 보간값을 사용한 것이다. 초기 조건을 $H^{(0)}(\tau)$ 라 하면 M 번의 Iteration을 하며 얻어지는 $H^{(n)}(\tau)$ 중에서 다음과 같은 오차가 최소화 된 것을 해로 정한다.

$$
\begin{aligned}
E\left[H^{(n)}(\tau)\right] \equiv & \sum_{i=1}\left\{\log G'_{data}(\omega_i)-\log\left[\int_{-\infty}^{\infty} H^{(n)}(\tau)\frac{\tau^2\omega_i^2}{1+\tau^2\omega_i^2}d\log\tau\right]\right\}^2 \\
& +\sum_{i=1}\left\{\log G''_{data}(\omega_i)-\log\left[\int_{-\infty}^{\infty} H^{(n)}(\tau)\frac{\tau\omega_i}{1+\tau^2\omega_i^2}d\log\tau\right]\right\}^2
\end{aligned}
\tag{4}
$$

식 (2)에 의해서 구해지는 $H^{(n)}(\tau)$ 는 초기조건 $H^{(0)}(\tau)$가 모든 τ에 대해서 음이 아니면 항상 음이 아니게 된다. 따라서 완화시간분포에 대한 별도의 제약조건 $H(\tau)\geq 0$ 을 사용하지 않아도 된다.

식 (2)에 의해 얻어지는 $H^{(n)}(\tau)$ 는 초기 조건으로 주어지는 $H^{(0)}(\tau)$ 가 Smooth function인 경우 Modulus Data에 오차가 미미하면 계속 Smooth function으로 남지만 그렇지 않을 경우 Noisy 한 형태의 함수가 된다. 하지만 $H^{(0)}(\tau)$ 를 Random distribution으로 주면 얻어지는 결과도 $H^{(0)}(\tau)$의 Noisy한 형태를 물려받지만 N개의 다른 Random distribution들에 대해서 구한 $H^{(n)}(\tau)$들을 평균들은 N을 늘릴수록 Exact Distribution에 가까워지며 Smooth해지는 경향을 보인다. 또한 다른 Random distribution들을 초기조건으로 할 경우라도 식 (2)의 과정에 적당한 Smoothing 과정을 도입하면 같은 결과를 보여준다.

결론

동적점탄성율 Data로부터 완화시간을 구하는 간단한 알고리듬을 개발하였으며 이 알고리듬은 Nonlinear Regularization과 동등한 결과를 준다. 이 알고리듬은 초기조건에 무관하게 주어진 데이터로부터 최적의 완화시간분포를 구해주며 Regularization Method들과는 달리 Smooth Solution을 위한 부가적인 항이나 Solution이 음이 아니라는 조건을 만족시키기 위한 부가적인 제한식이 필요하지 않다.

Fig. 1 Relaxation time distribution [a] and simulated data of dynamic moduli [b] which are contaminated by 3% random error.

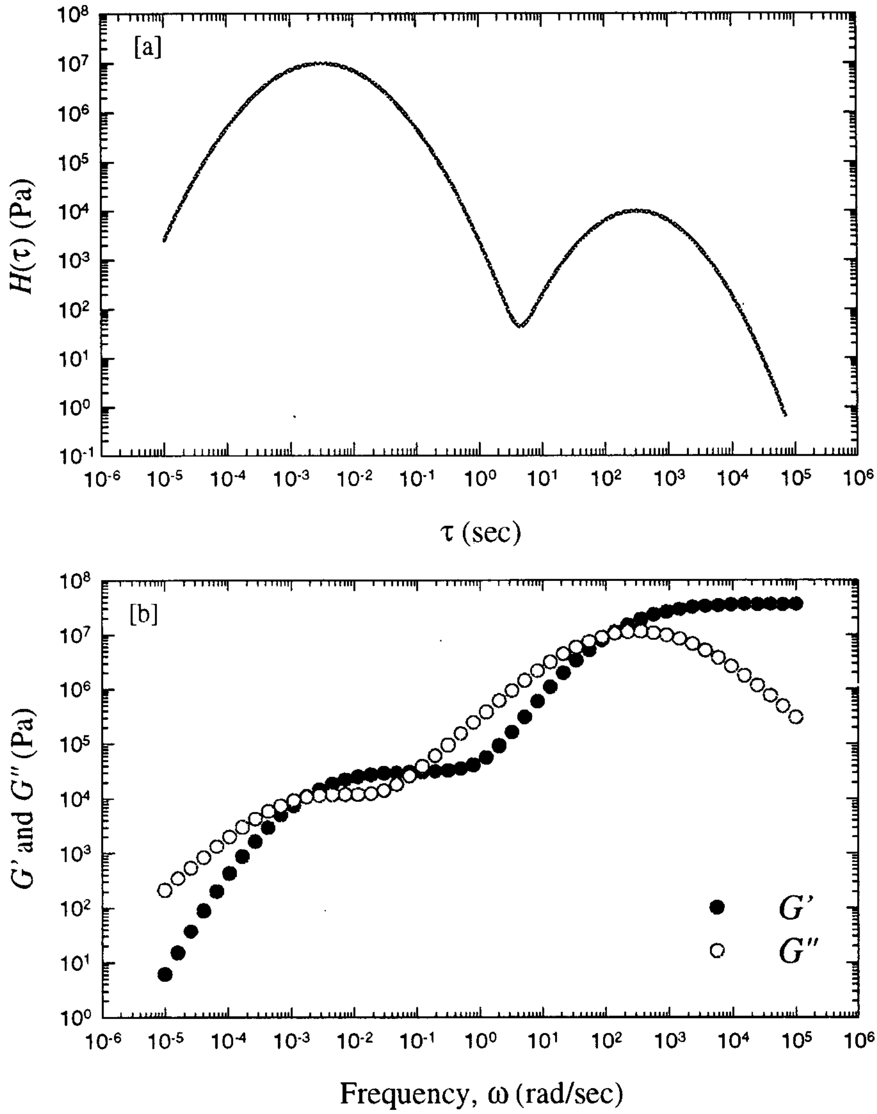

Fig. 2. Effect of initial conditions. R1N represents the random distribution with H_0, the maximum value of the loss modulus in Fig. 1[a], R8N represents the average over the 8 different random distribution, G"1N represents the inverted loss modulus, and given RTD represents the exact relaxation time distribution of Fig. 1[a]. All solutions are the ones with the maximum coefficient of determination among 50 iterations.