

완화시간분포를 계산하는 간단한 수치해법

조광수, 안경현, 이승종
서울대학교 응용화학부

A Simple Numerical Method for the Calculation of Relaxation Time Distribution

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

1. 서론

선형점탄성에서 완화시간분포를 알면 완화탄성율, 동적 점탄성율 등 다양한 정보를 알 수 있기 때문에 중요한 정보이지만 실험으로 직접 측정되는 물리량이 아니며 완화탄성율이나 동적 점탄성율의 실험 결과로부터 얻는 것도 많은 수학적 어려움이 있다. 최근에 Regularization을 이용한 방법으로 연속함수로써 완화시간분포를 계산하는 방법들이 개발되어진 바 있다. 동적점탄성 실험결과로부터 완화시간분포를 연속함수로써 계산할 수 있는 간단한 수치해법을 연구하였다.

2. 본론

동적 점탄성율과 완화시간분포 사이에는 다음과 같은 관계가 성립된다.

$$G(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} H(\tau)K(\tau\omega)d(\log \tau)$$

$$K(\tau\omega) \equiv \frac{(\tau\omega)^n}{1 + (\tau\omega)^2}$$

위식에서 G가 저장탄성율일 경우 Kernel K의 n은 2이고 손실탄성율일 경우엔 n은 1이다. 손실탄성율에서 Kernel은 $\tau\omega = 1$ 일 경우 가장 큰 값을 가지고 그렇지 않을 경우 작은 값을 가지므로 특정 주파수 ω_0 에서의 주어진 완화시간분포로부터 얻어지는 손실탄성율과 실험으로부터 얻은 손실탄성율 사이의 차이 $dG(\omega_0)$ 는 주로 $\tau = 1/\omega_0$ 에서의 $H(\tau)$ 에 의존하므로 $dG(\omega_0)$ 가 양일 경우엔 $H(\tau)$ 를 낮추어 주고 음일 경우엔 높여 준다면 실험결과에 맞는 완화시간분포를 구할 수 있게 된다. 문제는 얼마나 높여주고 낮추어 주느냐 이다. 본 연구에서는 다음과 같은 Mapping을 이용하였다.

$$H^{(n+1)}(\tau) = f\{dG(1/\tau)\} \times H^{(n)}(\tau)$$

여기서

$$f\{dG(1/\tau)\} = 1 + |dG(1/\tau)| \text{ for } dG(1/\tau) \geq 0$$

$$f\{dG(1/\tau)\} = \frac{1}{1 + |dG(1/\tau)|} \text{ for } dG(1/\tau) \leq 0$$

초기 완화시간분포 $H^{(0)}(\tau)$ 를 저장탄성율 데이터 중 최대값을 크기로 하는 Random Distribution으로 하여 실험결과와 $H^{(n)}(\tau)$ 으로부터 얻어지는 동적탄성율에 대한 결정계수 (Coefficient of Determination)이 일정수준 이상일 경우 반복계산을 멈추는 계산방법으로 완화시간분포를 구할 경우 다양한 초기 조건에 대한 $H^{(n)}(\tau)$ 의 평균을 $H(\tau)$ 로 정하였다.

아래의 그림은 주어진 완화시간분포 (실선)으로부터 구한 동적점탄성율을 실험데이터로 가정하여 7가지의 Random Distribution들을 초기조건으로 하여 구한 평균 (원)과 10가지 초기조건에 대한 평균 (삼각형)을 비교한 것이다. 초기분포의 개수를 높일수록 원래의 완화시간분포에 가까워짐을 알 수 있다.

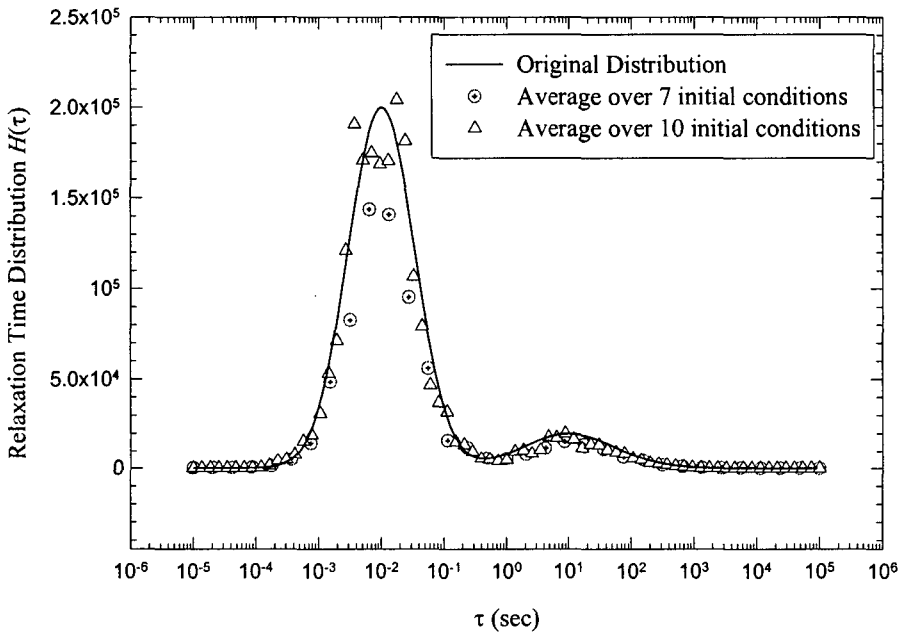


Fig. 1 The calculated and the original distributions of relaxation times