

반 무한 구조에서의 확산 공정을 위한 몇몇 전달함수의 유리 근사

김주현*** · 이지태***,† · 권상일*,†

*The Ohio State University, William G. Lowrie Department of Chemical and Biomolecular Engineering
151 W. Woodruff Avenue, Columbus, OH 43210, United States

**Texas A&M University, Artie McFerrin Department of Chemical Engineering
200 Spence Street, College Station, TX 77843, United States

***경북대학교 화학공학과

41566 대구광역시 북구 대학로 80

(2026년 1월 3일 접수, 2026년 2월 25일 수정본 접수, 2026년 2월 27일 채택)

Rational Approximations of Some Transfer Functions for Diffusion Processes in the Semi-infinite Geometry

Juhyeon Kim***, Jietae Lee***,† and Joseph Sang-II Kwon*,†

*The Ohio State University, William G. Lowrie Department of Chemical and Biomolecular Engineering,
151 W. Woodruff Avenue, Columbus, OH 43210, United States

**Texas A&M University, Artie McFerrin Department of Chemical Engineering, 200 Spence Street, College Station, TX 77843, United States

***Department of Chemical Engineering, Kyungpook National University, 80, Daehak-ro, Daegu, 41566, Korea

(Received 3 January 2026; Received in revised from 25 February 2026; Accepted 27 February 2026)

요 약

반 무한 구조물 표면으로부터 열 혹은 물질이 확산하는 공정의 동특성을 나타내는 전달함수에는 $\exp(-\sqrt{s})$ 와 \sqrt{s} 같은 Padé 근사가 불가능한 요소들이 있을 수 있다. 이 가운데 $\exp(-\sqrt{s})$ 의 경우 먼저 Padé 근사가 가능한 $1/\cosh(\sqrt{s})$ 함수의 급수로 근사한 후, 이 급수에 Padé 근사를 적용하여 최종적으로 Padé 근사와 유사한 s 의 유리 전달함수를 얻는 방법이 제안되어 있다. 여기서는 이 $1/\cosh(\sqrt{s})$ 함수로 표현된 급수의 수렴을 촉진하는 방법을 제안하고, 여러 Padé 근사가 불가능한 전달함수 요소들의 근사로 확장하는 방법을 다루고자 한다. 이들을 s 의 유리 전달함수로 근사할 수 있으면, 편미분방정식으로 표현되는 공정 동특성 모델을 상미분 형태의 상태방정식으로 근사할 수 있는데, 이는 공정의 모사, 해석 및 제어시스템 설계에 큰 편리를 가져다준다. 본 연구에서는 다양한 형태의 전달함수를 근사하여 계단응답을 각각 모사하였고, 4차 이하의 근사에서 우수한 정확도를 보였다. 이는 특정 주파수 대역에서의 근사 정확도에 초점을 둔 기존 방법과 달리, 시간영역 응답과 정상상태 특성을 동시에 만족시키는 근사라는 점에서 차별성을 갖는다.

Abstract – Transfer functions describing the dynamics of heat or mass diffusion from the surface of a semi-infinite medium may contain terms such as $\exp(-\sqrt{s})$ and \sqrt{s} , which cannot be directly approximated using Padé approximation. For $\exp(-\sqrt{s})$, an approach has been proposed in which it is first expressed as a series involving the function $1/\cosh(\sqrt{s})$, to which Padé approximation can be applied. Then, Padé approximation is applied to this series to obtain a rational transfer function in s . In this study, a method to accelerate the convergence of the series representation based on $1/\cosh(\sqrt{s})$ is proposed and extended to the approximation of various transfer function elements that are not amenable to Padé approximation. Approximating these terms by rational transfer functions enables dynamic models originally formulated as partial differential equations to be represented in ordinary differential equation-based state-space form, facilitating simulation, analysis, and control system design. Step-response simulations demonstrate that satisfactory accuracy can be achieved with approximation orders of four or less while preserving steady-state characteristics and time-domain response accuracy.

Keywords: Padé-like approximation, Rational approximation, Semi-infinite diffusion, Diffusion dynamics, Transfer functions

†To whom correspondence should be addressed.

E-mail: jtlee@knu.ac.kr, kwon.677@osu.edu

This is an Open-Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0>) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

1. Introduction

열이나 물질의 확산이 일어나는 공정의 동적 거동은 확산 거리와 시간의 함수로 나타낼 수 있는데 이는 편미분 방정식으로 표현된다[1-2].

이는 정밀한 동적 거동을 모사할 수 있어 오래 전부터 연구되어 오고 있으며, 최근에는 상미분과 편미분 방정식이 혼합된 공정 모델의 분석과 제어를 위한 연구가 진행되고 있다[3-5]. 편미분 방정식을 통상의 유한차분(finite difference) 방법 등으로 풀이하는 것은 매우 번거로운 일이 된다[2]. 공정의 동특성이 선형인 경우에는, Laplace 변환을 통해 해석하는 방법이 하나의 대안이 될 수 있지만[6-7], Laplace 변환으로 얻은 전달함수에는 다루기 힘든 \sqrt{s} (즉 $s^{0.5}$) 혹은 $\exp(-\sqrt{s})$ 와 같은 항들이 있을 수 있다(여기서 s 는 Laplace 변수를 나타낸다). 이 중 일부는 Padé 근사가 가능하여 이를 이용하면 간단 하면서 정밀한 s 의 유리(rational) 전달함수를 얻을 수 있다[8]. 반면, Padé 근사가 가능하지 않은 경우 다른 근사 방법이 도입되어야 한다. 특히, 반 무한(semi-infinite) 구조를 갖는 확산 공정들에서 이런 Padé 근사가 불가능한 전달함수 요소들이 나타난다. 이를 s 의 유리 전달함수로 근사하면 편미분 방정식을 상미분방정식으로 근사할 수 있다[9]. 다양한 공정에 이를 활용할 수 있는데, 열전달, 촉매 내부 확산, 관형 반응기 내 분산 모델, Warburg 요소 등 전기화학에서의 확산 임피던스 요소 등과 같이 본질적으로 무한차원의 특성을 갖는 공정들의 모사, 해석 및 제어시스템 설계가 용이해진다.

본 연구에서는 편미분 방정식 형태의 전달함수에서 나타나는 $\exp(-\sqrt{s})$ 항의 Padé 근사와 유사한 s 의 유리 전달함수로 근사하는 방법을 다루고자 한다. $\exp(-\sqrt{s})$ 항 자체는 $s=0$ 에서 해석적이지 않아 Padé 근사가 불가능한데, Lee and Kim [10]은 이 항을 우선 $1/\cosh(\sqrt{s})$ 함수의 급수로 먼저 전개하고, 이 $1/\cosh(\sqrt{s})$ 를 다시 s 의 유리함수로 근사하여 최종적으로 s 의 유리 전달함수로 만드는 방법을 제안하고 있다. 여기서는 Lee and Kim의 급수 전개 수렴을 촉진하는 방법과 이를 여러 다른 전달함수 항으로 응용하며, 본 방법을 여러 확산 공정의 전달함수에 적용하여 그 우수성을 밝힌다.

앞의 $\exp(-\sqrt{s})$ 와 더불어 \sqrt{s} 는 분수차원(fractional order) 미분 혹은 적분기의 일종으로 여러 물리화학적 공정의 전달함수에 나타날 수 있다[11-12]. 이를 s 의 유리 전달함수로 근사하기 위한 시도가 여럿 있어 왔는데, Oustaloup[13]의 방법 그리고 이와 유사한 방법들이 제안된 바 있다. 이들은 특정 주파수 영역에서 우수한 결과를 보이는 반면, 해당 주파수 범위를 벗어나면 정상상태 이득이 달라지는 등 근사의 정확도를 보장할 수 없다.

본 연구에서는 이 \sqrt{s} 를 s 의 유리 전달함수로 근사할 수 있는 또 다른 대안 하나를 부수적으로 얻으며, 여러 모사 예를 보여 본 근사 방법의 우수성을 보인다. 실시간 계단응답을 모사한 경우 대부분 4차 이하의 근사에서 만족할 만한 결과를 얻을 수 있었다.

2. Series Expansions with Hyperbolic Trigonometric Functions

확산 공정의 동특성을 나타내는 전달함수에는 \sqrt{s} , $\exp(-\sqrt{s})$, 그리고 이들의 조합을 포함할 수 있다. 이 중 일부는 $s=0$ 에서 해석적이지 않아 Padé 근사가 가능하다[8]. 전달함수 $1/\cosh(\sqrt{s})$, $\sqrt{s}/\sin(\sqrt{s})$ 그리고 $\tanh(\sqrt{s})/\sqrt{s}$ 가 여기에 속하는 데, 이들의 급수 전개 예를 Table 1에 보았다[14-15].

해석적이지 않은 $\exp(-\sqrt{s})$ 를 Padé 형의 유리 전달함수로 근사하기 위하여 먼저 Padé 근사가 가능한 $1/\cosh(\sqrt{s})$ 의 항으로 전개하는 방법이 제안되어 있다. 이 $1/\cosh(\sqrt{s})$ 항에 Padé 근사 방법을 적용하면 전체적으로는 Padé 형태의 s 의 유리 전달함수를 얻을 수

있다[10]. 이는 $2\cosh(\sqrt{s})e^{-\sqrt{s}} = 1 + e^{-2\sqrt{s}}$ 을 반복적으로 적용하여 얻은 다음의 관계식을 이용한다.

$$\begin{aligned} e^{-\sqrt{s}} &= \frac{1}{2\cosh(\sqrt{s})} (1 + e^{-2\sqrt{s}}) \\ &= \frac{1}{2\cosh(\sqrt{s})} \left(1 + \frac{1}{2\cosh(2\sqrt{s})} (1 + e^{-4\sqrt{s}}) \right) \\ &= \frac{1}{2\cosh(\sqrt{s})} \left(1 + \frac{1}{2\cosh(2\sqrt{s})} (1 + \dots + (1 + e^{-2^n \sqrt{s}})) \right) \\ &\approx a_0(1 + a_1(1 + \dots + a_{n-1}(1 + a_n))), \quad a_k = \frac{1}{2\cosh(2^k \sqrt{s})}, k=0,1,\dots,n \end{aligned} \quad (1)$$

여기서 s 는 Laplace 변수이고 복소수 값을 가진다. 이 전달함수의 주파수 응답은 $s = \pm j\omega(j = \sqrt{-1})$ 를 대입하여 계산하는데, 여기서 $\sqrt{s} = \sqrt{\pm j\omega} = \sqrt{\omega/2}(1 \pm j)$ 의 값을 갖는 것으로 한다(여기서 ω 는 주파수를 나타낸다). 이 경우 a_k 의 절대값은 0.5와 같거나 작게 되고, 위 급수는 전 주파수 영역에서 빠르게 수렴한다.

Eq. (1)에서 하나의 항으로 근사하면 ($\exp(-\sqrt{s}) \approx a_0$), 주파수 응답 AR (amplitude ratio)의 상대 오차는 $|\exp(-2\sqrt{j\omega})|$ 이다. $\omega = 10.6$ 인 경우에 대해 상대 오차는 1% 이하가 되며, 이런 높은 주파수에서는 적은 항으로도 충분한 정확도를 얻을 수 있다. 한편, 적은 수의 항으로 근사하는 경우 정상상태 이득($s=0$ 을 대입하였을 때의 전달함수 값)에서 차이가 많이 나게 된다. 예를 들면, 두 항 $a_0(1+a_1)$ 으로 근사하면 이것의 정상상태 이득은 3/4으로 실제 값 1과는 차이가 크다. 실제 $\omega=0$ 에서 수렴 속도가 가장 느리며 이런 낮은 주파수 영역에서의 근사 정확도를 높이기 위해서는 많은 수의 항이 요구된다.

Eq. (1)의 근사는 빠르게 수렴하지만, 유리 다항식 형태를 위해서는 $1/\cosh(n\sqrt{s})$ 함수의 근사가 더 필요하다. Table 1에 있는 근사 식들을 이용하여 전개하면 다음과 같은 식을 얻는다.

$$a_k = \frac{1}{2\cosh(2^k \sqrt{s})} = \frac{0.5}{\cosh(\sqrt{2^{2k}} s)} = \frac{0.5}{\left(\frac{4}{\pi^2} 2^{2k} s + 1\right) \left(\frac{4}{3^2 \pi^2} 2^{2k} s + 1\right) \dots} \quad (2)$$

이 식의 시간상수를 고려하면 높은 주파수 응답은 a_0 가, 낮은 주파수 응답은 큰 k 의 a_k 항이 담당하는데, 이 경우 Eq. (2)의 첫 시간상수와 비교하여 두 번째 시간상수가 1/9배로 첫 시간상수 항 만으로도 우수한 근사가 가능해진다. 즉, 낮은 주파수 영역에서는 일차의 a_k 로 충분할 것이다. 실제 근사에는 Table 1의 Padé 근사를 이용하는데, 많은 경우 다음의 일차 전달함수 형태의 근사로도 충분하다.

$$a_k = \frac{1}{2\cosh(2^k \sqrt{s})} = \frac{0.5}{\cosh(\sqrt{2^{2k}} s)} \approx \frac{0.5}{2^{2k-1} s + 1} \quad (3)$$

높은 주파수에서의 정확한 근사를 위해서는 고주파 영역을 담당하는 a_0 과 a_1 의 근사 차수를 늘리면 된다. 일련의 과정에서 전달함수는 \cosh 등의 쌍곡선 함수를 통해 최종적으로 유리함수의 곱으로 나타내는데, 전달함수의 분모는 Hurwitz 다항식으로 자연스럽게 구성된다. 이는 시스템의 점근적 안정성이 전달함수 표현 단계에서 내재적으로 확보되는 특성을 가진다는 점을 시사한다. 본 논문에서는 이러한 전달함수들의 근사에 대해 계단응답의 정확성에 대한 논의를 진행하며, 여기서 다루는 문제의 구조와 이에 대한 해결 절차를 Fig. 1에 개략적으로 나타내었다.

Table 1. Product and Series Expansions of Several Hyperbolic Trigonometric Functions [15]

	$1/\cosh(\sqrt{s})$	$\sqrt{s}/\sinh(\sqrt{s})$	$\sqrt{s}/\tanh(\sqrt{s})$
Product	$\frac{1}{\left(1+\frac{4}{\pi^2}s\right)\left(1+\frac{4}{3^2\pi^2}s\right)\dots}$	$\frac{1}{\left(1+\frac{1}{\pi^2}s\right)\left(1+\frac{1}{2^2\pi^2}s\right)\dots}$	$\frac{\left(1+\frac{4}{\pi^2}s\right)\left(1+\frac{4}{3^2\pi^2}s\right)\dots}{\left(1+\frac{1}{\pi^2}s\right)\left(1+\frac{1}{2^2\pi^2}s\right)\dots}$
Taylor	$1/\left(1+\frac{s}{2!}+\frac{s^2}{4!}+\dots\right)$	$1/\left(1+\frac{s}{3!}+\frac{s^2}{5!}+\dots\right)$	$1-\frac{s}{3}+\frac{2s^2}{15}-\frac{17s^3}{315}+\dots$
Continued Fraction	$1-\frac{s}{1\cdot 2+s-\frac{1\cdot 2s}{3\cdot 4+s-\dots}}$	$1-\frac{s}{2\cdot 3+s-\frac{2\cdot 3s}{4\cdot 5+s-\dots}}$	$1+\frac{s}{3+\frac{s}{5+\dots}}$
Padé (Order 1)	$1/\left(\frac{1}{2}s+1\right)$	$1/\left(\frac{1}{6}s+1\right)$	$\frac{6s+15}{s+15}$
Padé (Order 2)	$\frac{24}{s^2+12s+24}$	$\frac{120}{s^2+20s+120}$	$\frac{15s^2+420s+945}{s^2+105s+945}$
Padé (Order 3)	$\frac{720}{s^3+30s^2+360s+720}$	$\frac{5040}{s^3+42s^2+840s+5040}$	$\frac{28s^3+3150s^2+62370s+135135}{s^3+378s^2+17325s+135135}$

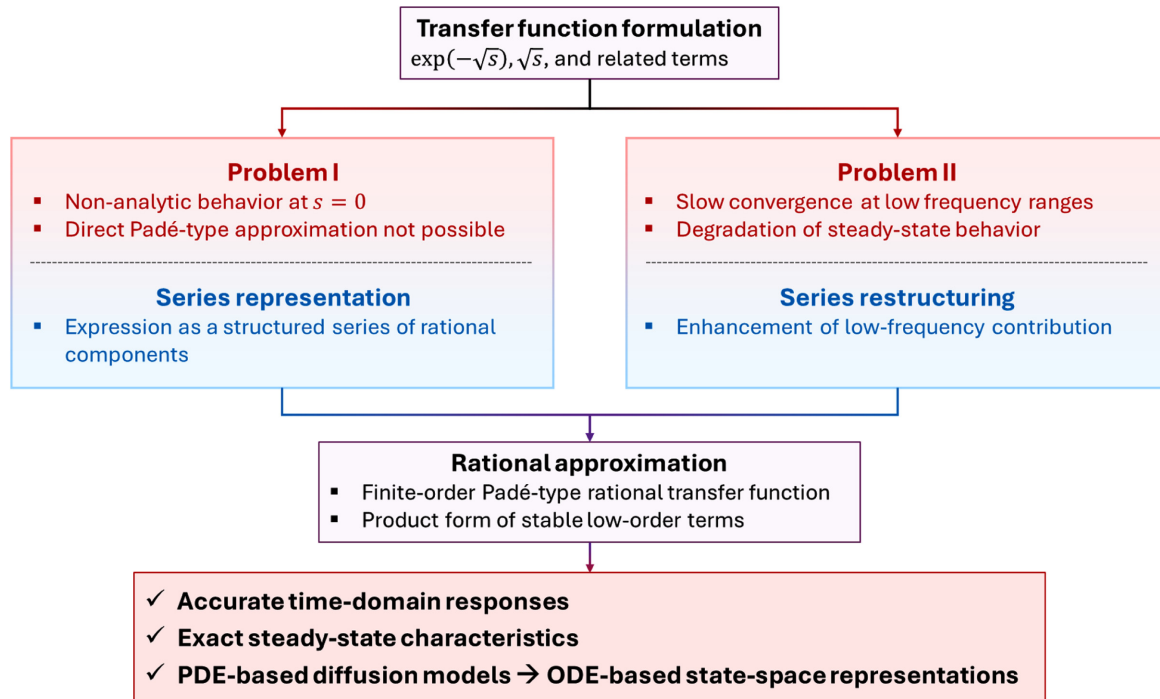


Fig. 1. Schematic overview of the proposed approximation strategy for non-analytic transfer functions arising in diffusion processes.

3. Main Results

Eq. (1) 급수의 더 빠른 수렴을 위하여 Shank 변환을 적용하면 다음을 얻을 수 있다[15].

$$e^{-\sqrt{s}} \approx a_0(1+a_1(1+\dots+a_{n-2}(1+a_{n-1}/(1-a_n)))) \frac{1}{a_0(1+a_1(1+\dots+a_{n-2}(1+\hat{a}_n)))}, \hat{a}_n = \frac{2^{2n-1}s+1}{2^{2n-3}s+1} \frac{2^{2n}s+1}{2^{2n}s+1} \quad (4)$$

이는 Eq. (1) 급수를 Euler 연분수(continued fraction)로 표현하고 이를 절사하는 과정에서도 얻을 수 있다[15]. 이 Shank 변환으로부터 얻은 Eq. (4)는 몇몇 좋은 점을 가지고 있는데, 하나는 정상

상태 이득이 완벽하게 같게 되는 결과를 주는 것이다. 즉 s=0를 대입하였을 때 양 편 모두 정상상태 이득인 1이 얻어진다.

여기서는 더 나아가 Eq. (1)의 끝 두 항을 다음과 같이 근사하는 것을 제안한다.

$$e^{-\sqrt{s}} \approx a_0(1+a_1(1+\dots+a_{n-2}(1+\tilde{a}_n))), \tilde{a}_n = \frac{1}{2^{2n-2}s+1} \left(\frac{2^{2n+1}s+1}{2^{2n+2}s+1} \right) = \frac{1/\sqrt{2}}{2^{2n-2}s+1} \left(1 + \frac{\sqrt{2}-1}{2^{2n+2}s+1} \right) \quad (5)$$

여기에는 Eq. (1)의 끝 두 항에 해당하는 $e^{-2^{n-1}\sqrt{s}}$ 의 근사를 위한 다음의 관계식에 근거하여 유도하였다 (상세한 과정은 Appendix에 기술되어 있다).

$$e^{-2^{n-1}\sqrt{s}} = \left(e^{-\alpha 2^{n-1}\sqrt{s}} \right)^{1/\alpha} = \left(\frac{1}{2 \cosh(\alpha 2^{n-1}\sqrt{s})} \left(1 + e^{-\alpha 2^n \sqrt{s}} \right) \right)^{1/\alpha} \quad (6)$$

Eq. (5)는 $\alpha=2$ 로 하여 얻은 식이고, Eq. (4)는 $\alpha=1$ 로 하면 얻을 수 있다. $\alpha = \sqrt{2}$ 로 하면 Eq. (4)과 Eq. (5) 사이의 식이 얻어지는데, Appendix에 보였듯 이 또한 간단한 형태의 식을 제공하며, 이들 모두 Eq. (4)와 같이 정상상태 이득이 1인 정확한 값을 준다.

Fig. 2은 Eq. (1), Eq. (4) 그리고 Eq. (5) 전달함수의 주파수 응답 AR (amplitude ratio)을 나타낸 그래프이다. 여기서 a_0 는 정확한 값 $0.5/\cosh(\sqrt{s})$ 를 사용하였고, 나머지는 일차 전달함수로 근사한 Eq. (3)을 이용하였다. 근사 항 수 $n=2$ 에 대하여 비교하면 Eq. (1)과 Eq. (4)에 비하여 제안하는 Eq. (5)가 같은 개수의 근사항에 대해서도 더 우수하다는 것을 볼 수 있다. 또한, 근사 항 수 $n=2$ 를 $n=3$ 으로 늘리면 근사 정확도가 매우 좋아지는 것을 볼 수 있다.

Fig. 3는 a_0 를 $0.5/\cosh(\sqrt{s})$ 의 정확한 값에서 Table 1에 있는 2차 혹은 1차의 근사식으로 정확도를 낮출 경우의 주파수 응답 AR 그래프로, 높은 주파수의 근사 정확도에서 차이를 보이는 것을 볼 수 있다. Fig. 2에서 보이는 낮은 주파수 ($\omega < 0.1$)에서의 오차는 n 을

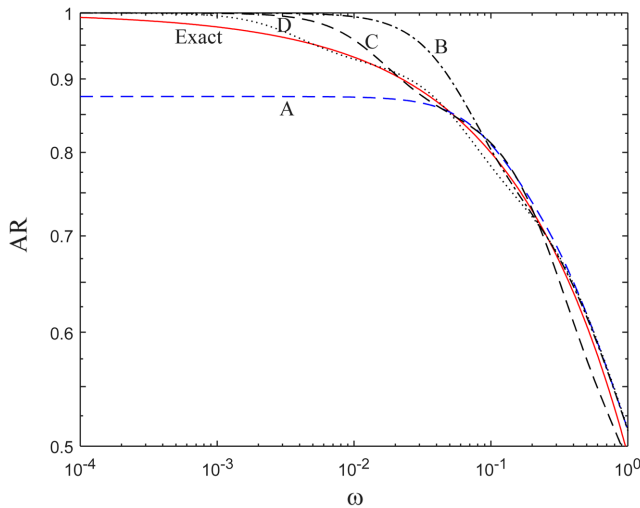


Fig. 2. Amplitude ratio (AR) plot of $\exp(-\sqrt{s})$ and its approximations with the exact a_0 and first order approximations for all other a_k 's (Exact: red solid line, A(Eq. (1) with $n=2$), B(Eq. (4) with $n=2$), C(Proposed, black dashed line, Eq. (5) with $n=2$), D(Proposed, black dotted line, Eq. (5) with $n=3$)).

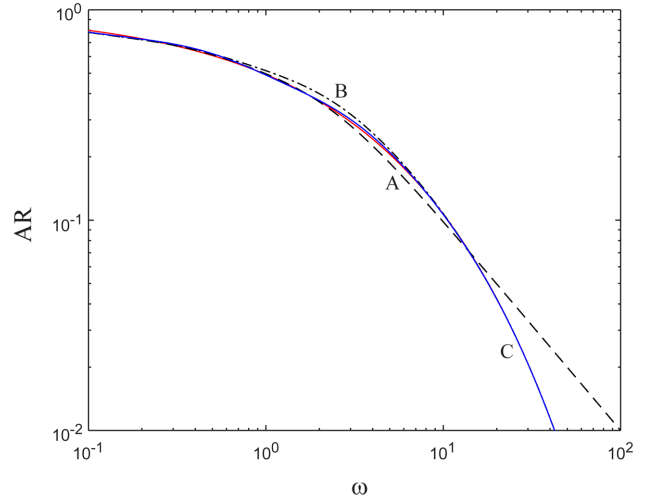


Fig. 3. Amplitude ratio (AR) plot of $\exp(-\sqrt{s})$ and the proposed approximations of Eq. (5) with $n=3$ (Exact: red solid line, A(dashed line, $a_0\sim a_3$:1st order), B(dash-dotted line, a_0 :exact, $a_1\sim a_3$:1st order), C(dotted line, a_0 :exact, a_1 :2nd order, $a_2\sim a_3$:1st order)).

늘리면 줄어들고, 중간 주파수($\omega \approx 2$)에서의 오차는 a_1 의 근사 차수를 올리면 줄일 수 있다. 이 계산에 따르면 대체로 높은 주파수에서의 오차는 a_0 및 a_1 의 근사 차수를 늘려 줄일 수 있고, 낮은 주파수에서의 오차는 n 을 늘려 줄일 수 있다. Table 2에 근사 차수에 따른 주파수 응답 AR의 최대 상대 오차 값을 보였다. 절사를 $n=2$ 로 하면 상대 오차로 9%, $n=3$ 으로 하면 3% 그리고 $n=4$ 로 하면 0.9%를 얻을 수 있음을 볼 수 있다. 앞의 근사와 비교하여 제안하는 본 방법에서 n 에서 하나 줄어들게 결정할 수 있음을 볼 수 있다.

주파수 응답 AR 그래프로부터 살펴보면 첫 항인 a_0 는 높은 주파수 영역을 담당하고 이어지는 항들은 순차적으로 낮은 주파수 영역을 담당하는 것을 알 수 있다. 실제 적용을 하여 보면 주로 낮은 주파수 영역에서 작용하는 계단응답을 맞추는 근사에서는 다음과 같이 a_0 를 포함하여 모두 1차 근사를 사용하여도 충분 하였다. 모든 a_k 를 일차로 하면 Eq. (5)는 다음과 같이 된다.

$$e^{-\sqrt{s}} \approx a_0(1 + a_1(1 + \dots + a_{n-2}(1 + \tilde{a}_n))) = \frac{0.5}{0.5s+1} \left(1 + \frac{0.5}{2s+1} \left(1 + \dots + \frac{0.5}{2^{2n-3}s+1} \left(1 + \frac{1/\sqrt{2}}{2^{2n-2}s+1} \left(1 + \frac{\sqrt{2}-1}{2^{2n+2}s+1} \right) \right) \right) \right) \quad (7)$$

Table 2. Approximation accuracies for $G(s) \approx \exp(-\sqrt{s})$

Approximation (G(s))	n	$(\epsilon_A, \epsilon_R)^*$		
		Eq. (1)	Eq. (3)	Eq. (4)
a_0 : Exact	1	(0.250, 0.250)	(0.147, 0.185)	
$a_1\sim a_n$: 1 st Order	2	(0.125, 0.125)	(0.073, 0.089)	(0.036, 0.080)
	3	(0.062, 0.089)	(0.037, 0.089)	(0.033, 0.090)
a_0 : Exact	2	(0.125, 0.125)	(0.073, 0.082)	
a_1 : 2 nd Order	3	(0.063, 0.063)	(0.037, 0.038)	(0.018, 0.028)
$a_2\sim a_n$: 1 st Order	4	(0.031, 0.031)	(0.018, 0.028)	(0.016, 0.028)
a_0, a_1 : Exact	3	(0.063, 0.063)	(0.037, 0.039)	
a_2 : 2 nd Order	4	(0.031, 0.031)	(0.018, 0.019)	(0.009, 0.010)
$a_3\sim a_n$: 1 st Order	5	(0.016, 0.016)	(0.009, 0.009)	(0.009, 0.009)

* $\epsilon_A = \max_{\omega \in (0, \infty)} |G(j\omega) - \exp(-\sqrt{j\omega})|$, $\epsilon_R = \max_{\omega \in (0, \infty)} |G(j\omega) / \exp(-\sqrt{j\omega}) - 1|$

Table 3. Approximation examples of $\exp(-\sqrt{s})$

n	$\exp(-\sqrt{s}) \approx Q_{[0/n]}(s) = a_0(1 + a_1(1 + \dots + a_{n-2}(1 + \tilde{a}_n)))$
1	$\frac{1}{s+1} \frac{8\sqrt{2s+1}}{16s+1}$
2	$\frac{0.5}{0.5s+1} \left(1 + \frac{1}{4s+1} \frac{32\sqrt{2s+1}}{64s+1} \right)$
3	$\frac{0.5}{0.5s+1} \left(1 + \frac{0.5}{2s+1} \left(1 + \frac{1}{16s+1} \frac{128\sqrt{2s+1}}{256s+1} \right) \right)$
4	$\frac{0.5}{0.5s+1} \left(1 + \frac{0.5}{2s+1} \left(1 + \frac{0.5}{8s+1} \left(1 + \frac{1}{64s+1} \frac{512\sqrt{2s+1}}{1024s+1} \right) \right) \right)$
5	$\frac{0.5}{0.5s+1} \left(1 + \frac{0.5}{2s+1} \left(1 + \frac{0.5}{8s+1} \left(1 + \frac{0.5}{32s+1} \left(1 + \frac{1}{256s+1} \frac{2048\sqrt{2s+1}}{4096s+1} \right) \right) \right) \right)$

Table 3에 몇몇 이 근사식을 보였다. $Y(s) = e^{-\sqrt{s}}F(s)$ 의 동적 시스템을 Eq. (7)형태로 근사하면 이는 다음과 같은 상미분 방정식으로 계산할 수 있다.

$$\begin{aligned} \dot{x}_0 &= (-x_0 + 0.5x_1 + 0.5f(t)) / 0.5 \\ \dot{x}_1 &= (-x_1 + 0.5x_2 + 0.5f(t)) / 2 \\ &\dots \\ \dot{x}_{n-2} &= (-x_{n-2} + 0.5x_{n-1} + 0.5f(t)) / 2^{2n-5} \\ \dot{x}_{n-1} &= (-x_{n-1} + x_n / \sqrt{2} + f(t) / \sqrt{2}) / 2^{2n-2} \\ \dot{x}_n &= (-x_n + (\sqrt{2} - 1)f(t)) / 2^{2n+2} \\ y(t) &= x_0 \end{aligned} \tag{8}$$

여기서 x_k 는 $n+1$ 개의 가상의 상태변수이다.

높은 주파수의 응답이 필요한 펄스 응답이나 높은 주파수의 주기 응답이 필요하면 a_0 를 2차나 그 이상의 차수의 것들을 Table 1에서 찾아 사용하면 우수한 성능을 얻을 수 있을 것이다. 계단응답에서도 초기 응답의 정확도를 높이는 데도 고차의 a_0 가 도움이 된다.

또한 본 연구에서 다른 $\exp(-\sqrt{s})$ 및 \sqrt{s} 형태의 비유리 전달함수는 일반적인 $\exp(-a\sqrt{s}) (a \neq 1)$ 형태로 자연스럽게 확장될 수 있다. $\exp(-a\sqrt{s})$ 는 Laplace 변수 s 에 대한 단순한 스케일링을 통해 $\exp(-\sqrt{a^2s})$ 로 표현할 수 있고, 본 논문에서 제시한 급수 전개 및 유리 근사 프레임워크를 동일하게 적용할 수 있다. 따라서 제안한 방법은 특정 계수에 국한되지 않으며, 반 무한 확산 문제에서 나타나는 다양한 시간 스케일을 포괄적으로 다룰 수 있다.

더 나아가, 본 연구의 핵심 아이디어는 비해석적 분수 차수 항을 Padé 근사가 가능한 급수 구조로 재구성한 뒤 이를 저차 유리 전달함수로 변환하는 데에 있다. 이러한 구조적 접근은 반드시 $\sqrt{s} (=s^{1/2})$ 에 한정되지 않으며, 다른 분수 차수 모델에도 확장 가능할 것이다. 다만 일반적인 $s^\gamma (0 < \gamma < 1)$ 항의 경우 급수 전개의 형태와 수렴 특성이 달라질 수 있으므로, 이에 대한 체계적인 확장이 필요할 것이다.

4. Extensions

앞의 근사 방법을 여러 다른 $\exp(-\sqrt{s})$ 와 \sqrt{s} 를 포함하는 전달함수로 확장한다. 식들을 간단히 하기 위하여 다음 표현을 도입한다.

$$Q_{[m/n]}(s) = a_m(1 + a_{m+1}(1 + \dots + a_{n-2}(1 + \tilde{a}_n))) \approx e^{-2^m \sqrt{s}} \tag{9}$$

이는 다음과 같은 특성을 가지며, 여러 관계식 유도에 사용할 수 있다.

$$\begin{aligned} Q_{[1/n]}(s) &= Q_{[0/n-1]}(4s) \approx e^{-2\sqrt{s}} \\ Q_{[0/n]}(s) &= a_0(1 + Q_{[1/n]}(s)) \approx e^{-\sqrt{s}} \end{aligned} \tag{10}$$

확산 공정의 전달함수에 자주 등장하는 다음과 같이 half-order 미분기와 결합된 다양한 전달함수의 근사를 얻는다.

$$\sqrt{s}e^{-\sqrt{s}} = \frac{\sqrt{s}}{2\sinh(\sqrt{s})} (1 - e^{-2\sqrt{s}}) \approx b_0(1 - Q_{[1/n]}(s)), \quad b_0 = \frac{\sqrt{s}}{2\sinh(\sqrt{s})} \tag{11}$$

$$\sqrt{s} = \frac{\sqrt{s}e^{-\sqrt{s}}}{e^{-\sqrt{s}}} = \frac{b_0(1 - e^{-2\sqrt{s}})}{a_0(1 + e^{-2\sqrt{s}})} \approx c_0 \frac{1 - Q_{[1/n]}(s)}{1 + Q_{[1/n]}(s)}, \quad c_0 = \frac{b_0}{a_0} = \frac{\sqrt{s}}{\tanh(\sqrt{s})} \tag{12}$$

$$\begin{aligned} (1 + \beta\sqrt{s})e^{-\sqrt{s}} &= e^{-\sqrt{s}} + \beta\sqrt{s}e^{-\sqrt{s}} \approx a_0(1 + Q_{[1/n]}(s)) + \beta b_0(1 - Q_{[1/n]}(s)) \\ &= a_0(1 + \beta c_0) \left(1 + \frac{1 - \beta c_0}{1 + \beta c_0} Q_{[1/n]}(s) \right) \end{aligned} \tag{13}$$

$$\begin{aligned} \frac{e^{-\sqrt{s}}}{1 + \beta\sqrt{s}} &= \frac{e^{-2\sqrt{s}}}{(1 + \beta\sqrt{s})e^{-\sqrt{s}}} \approx \frac{Q_{[1/n]}(s)}{a_0(1 + Q_{[1/n]}(s)) + \beta b_0(1 - Q_{[1/n]}(s))} \\ &= \frac{1}{a_0(1 + \beta c_0)} \frac{Q_{[1/n]}(s)}{1 + \frac{1 - \beta c_0}{1 + \beta c_0} Q_{[1/n]}(s)} \end{aligned} \tag{14}$$

$$e^{-\sqrt{s+q}} \approx a_0(1 + a_1(1 + \dots + a_{n-2}(1 + \tilde{a}_n))) \Big|_{s=\bar{s}+q} \tag{15}$$

마지막의 Eq. (15)는 반 무한 구조에서 확산과 더불어 대류 (convection)가 있든가 흡착(adsorption) 같은 반응이 있는 공정에서 나타나는 전달함수 요소이다. 이 전달함수 요소는 원점에서 해석적 이어서 Padé 근사가 가능하다. 하지만 q 크기가 작으면 이 Padé 근사의 차수가 매우 커져야 하는 어려움이 있는데, $|q| \ll 1$ 일 때는 Eq. (15)의 근사가 유용하다. 이 공정을 실현하는 상태 방정식은 Eq. (8) 원편의 미분 항인 \dot{x}_k 대신 $\dot{x}_k + qx_k$ 를 도입하면 간단히 해결된다[9]. Eq. (15)의 단점은 $q=0$ 일 때와는 달리 정상상태 이득에서 오차가 생긴다는 것이다. 정상상태 이득은 낮은 주파수 영역의 값으로 급수 전개에서 마지막 항들이 이를 담당하는 점에 착안하여, 급수 전개 마지막 항의 크기를 조정하여 이 정상상태 이득의 차이를 극복한다. 즉 다음의 식을 고려한다.

$$\tilde{a}_n|_{s=\tilde{s}+q} = \frac{1/\sqrt{2}}{2^{2n-2}(\tilde{s}+q)+1} \left(1 + \delta \frac{\sqrt{2}-1}{2^{2n+2}(\tilde{s}+q)+1} \right) \quad (16)$$

여기서 δ 는 정상상태 이득이 같게 되는 것으로 다음과 같이 계산된다.

$$\delta = \frac{e^{-\sqrt{q}} - A}{B - A}$$

$$A = a_0 \left(1 + \dots + a_{n-2} \left(1 + \frac{1/\sqrt{2}}{2^{2n-2}q+1} \right) \right) \Big|_{s=q} \quad (17)$$

$$B = a_0 \left(1 + \dots + a_{n-2} \left(1 + \frac{1/\sqrt{2}}{2^{2n-2}q+1} \left(1 + \frac{\sqrt{2}-1}{2^{2n+2}q+1} \right) \right) \right) \Big|_{s=q}$$

급수 근사에서 δ 를 포함하는 항은 주파수가 커지면 그 크기가 매우 작게 되기 때문에 δ 의 도입이 높은 주파수 영역의 응답에 주는 영향은 미미할 것이다.

5. Simulations

5-1. 공정 전달함수: $\exp(-\sqrt{s})$

다음의 편미분 방정식으로 표현되는 공정의 동특성을 고려한다 [1,7].

$$\frac{\partial p(z,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 p(z,t)}{\partial z^2} \quad (18)$$

$$p(z,0) = 0$$

$$p(0,t) = f(t), p(\infty,t) = 0$$

여기서 $p(z,t)$ 는 상태 변수, z 는 거리 변수, t 는 시간 변수이다. 공정 출력은 $y(t)=p(1,t)$ 이다. 공정 표면에 $f(t)$ 의 변화가 들어오며, 이 변화가 확산으로 인해 내부로 전파되는 공정이다.

Laplace 변환을 통하여 식을 풀면 다음을 얻을 수 있다[7,14].

$$Y(s) = P(1,s) = e^{-\sqrt{s}}F(s) \quad (19)$$

여기서 $Y(s)$, $P(1,s)$ 와 $F(s)$ 는 각각 $y(t)$, $p(1,t)$ 와 $f(t)$ 의 Laplace 변환이다.

일반적인 입력 변화 $f(t)$ 에 대하여 출력 $y(t)=p(1,t)$ 를 얻기 위하여 $e^{-\sqrt{s}}$ 의 s 에 관한 유리 전달함수를 얻는다. 3차 전달함수를 주는 $n=2$ 인 경우를 고려할 때, Lee and Kim [10]의 Eq. (1)을 다음과 같이 나타낼 수 있다($n=2$ 인 경우).

$$e^{-\sqrt{s}} \approx a_0(1+a_1(1+a_2)) \approx \frac{0.5}{0.5s+1} \left(1 + \frac{0.5}{2s+1} \left(1 + \frac{0.5}{8s+1} \right) \right) = \frac{8s^2 + 7s + 0.875}{(0.5s+1)(2s+1)(8s+1)} \quad (20)$$

Shank 변환 식인 Eq. (4)는 다음과 같이 얻어진다.

$$e^{-\sqrt{s}} \approx a_0(1+a_1/(1-a_2)) \approx \frac{0.5}{0.5s+1} \left(1 + \frac{0.5}{2s+1} \left(1 - \frac{0.5}{8s+1} \right) \right) = \frac{16s^2 + 13s + 1}{(0.5s+1)(2s+1)(16s+1)} \quad (21)$$

제안하는 방법인 Eq. (5)는 다음과 같이 얻어진다.

$$e^{-\sqrt{s}} \approx a_0(1+\tilde{a}_2) \approx \frac{0.5}{0.5s+1} \left(1 + \frac{1}{4s+1} \frac{32\sqrt{2}s+1}{64s+1} \right) = \frac{128s^2 + (34+16\sqrt{2})s+1}{(0.5s+1)(4s+1)(64s+1)} \quad (22)$$

위의 각 근사의 성능을 비교한다. 계단응답인 경우($f(t)=1$) 해석하는 다음과 같다[7,14-15].

$$y(t) = p(1,t) = L^{-1} \left(\frac{e^{-\sqrt{s}}}{s} \right) = \text{erfc} \left(\frac{0.5}{\sqrt{t}} \right) \quad (23)$$

여기서 $L^{-1}(\cdot)$ 는 Laplace 역변환을 의미한다.

Fig. 4에 응답을 보였다. Eq. (20)의 경우 (Fig. 4에서 A) 정상상태 오차가 크게 부각되는데, 이 오차를 줄이기 위해서는 근사 차수를 많이 올려야 한다. Eq. (21)의 경우 (Fig. 4에서 B) 정상상태 오차는 없지만 빠르게 정상상태에 도달하여 중간 시간에서의 오차가 크게 나타난다. 제안하는 Eq. (22)의 경우 (Fig. 4에서 C) 근사 차수는 같지만 가장 우수하다. 제안하는 방법에서 근사 항을 $n=2$ 에서 $n=3$ 으로 하나 늘리면(Fig. 4에서 D) 더욱 정확한 응답을 얻을 수 있는 것을 볼 수 있다. IAE (integral of absolute errors) 값은 (A, B, C, D)에 대하여 각각(16.2, 11.8, 5.82, 0.98)로 계산된다.

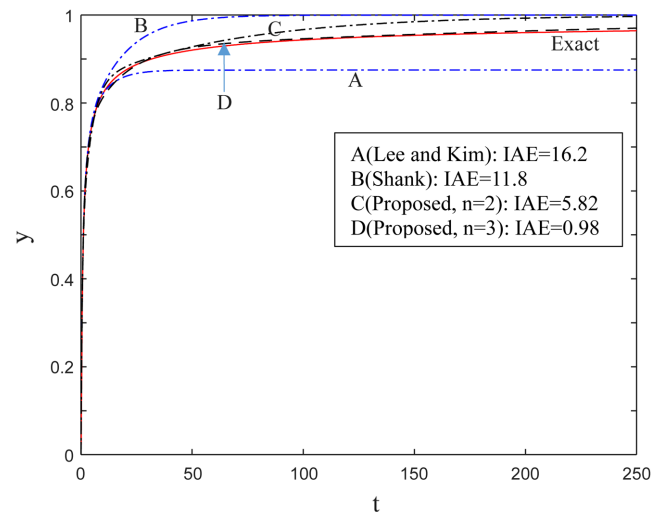


Fig. 4. Step responses for the example process 5.1 (Exact(red solid line, Eq. (23)), A(Eq. (20)), B(Eq. (21)), C(black dash-dotted line, Eq. (22)), D(black dashed line, Eq. (5) with n=3).

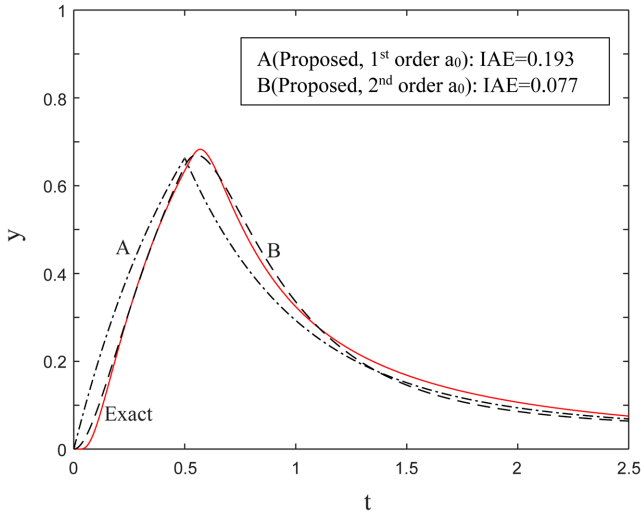


Fig. 5. Pulse responses for the example process 5.1 (Exact(red solid line), A(dash-dotted line, Eq. (22)), B(dashed line, Eq. (24))).

높은 주파수 응답이 요구되는 펄스 응답에서 a_0 의 효과를 살펴본다. 높은 주파수 응답에 크게 영향을 주는 a_0 의 근사 차수를 1에서 2로 늘린 경우인 다음의 근사를 고려한다.

$$e^{-\sqrt{s}} \approx a_0(1 + \tilde{a}_2) \approx \frac{0.5 \times 24}{s^2 + 12s + 24} \left(1 + \frac{1}{4s+1} \frac{32\sqrt{2}s+1}{64s+1} \right) \quad (24)$$

Fig. 5에 Eq. (22)와 Eq. (24)의 근사를 한 경우의 펄스 응답을 보였다. 여기서 펄스 크기는 2이고 펄스 폭은 0.5로 하였다. 이 그림에서 a_0 차수를 늘린 효과를 확연히 볼 수 있다. IAE (integral of absolute errors) 값은 (A, B)에 대하여 각각 (0.193, 0.077)로 계산된다.

5-2. 공정 전달함수: $\exp(-\sqrt{s}) / (1 + \beta\sqrt{s})$

Eq. (18) 식의 경계 조건 중 $z=0$ 에서의 조건이 다음과 같이 바뀐 공정을 고려한다[1,7].

$$\frac{\partial p(0,t)}{\partial z} = \frac{1}{\beta}(p(0,t) - f(t)) \quad (25)$$

이 공정은 구조 표면에서 대류 저항이 존재하는 경우이다. Laplace 변환을 통하여 풀면 다음의 해를 얻을 수 있다 [7].

$$Y(s) = P(1,s) = \frac{e^{-\sqrt{s}}}{1 + \beta\sqrt{s}} F(s) \quad (26)$$

Eq. (26)을 전달함수 근사를 통하여 풀이를 한다. 여기서 $b=1$ 인 경우에 대해, Lee and Kim [10]은 다음의 근사를 하였다.

$$\begin{aligned} \frac{e^{-\sqrt{s}}}{1 + \beta\sqrt{s}} &= \frac{1}{\frac{1}{e^{-\sqrt{s}}} + s} \frac{1}{\sqrt{s}e^{-\sqrt{s}}} \approx \frac{1}{a_0(1+a_1) + s} \frac{1}{b_0(1-a_1) + s} \\ &= \frac{396s^2 + 504s + 108}{120s^4 + 1352s^3 + 2488s^2 + 1272s + 144} \end{aligned} \quad (27)$$

제안하는 Eq. (14)의 근사를 사용하면 다음이 얻어진다.

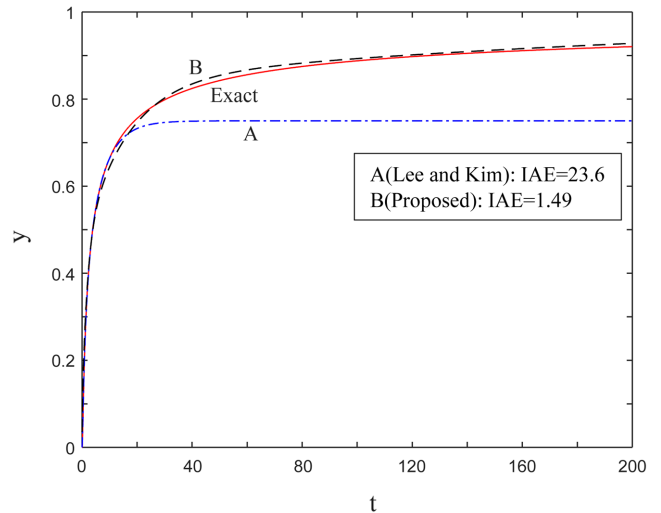


Fig. 6. Step responses for the example process 5.2 (Exact(red solid line, Eq. (29)), A(dash-dotted line, Eq. (27)), B(dashed line, Eq. (28))).

$$\begin{aligned} \frac{e^{-\sqrt{s}}}{1 + \beta\sqrt{s}} &= \frac{e^{-2\sqrt{s}}}{e^{-\sqrt{s}} + \sqrt{s}e^{-\sqrt{s}}} \approx \frac{1}{a_0(1+c_0)} \frac{Q_{[1/3]}(s)}{1 + \frac{1-c_0}{1+c_0} Q_{[1/3]}(s)} \\ &= \frac{0.5s+1}{0.5} \frac{s+15}{7s+30} \frac{0.5}{2s+1} \left(1 + \frac{1}{16s+1} \frac{128\sqrt{2}s+1}{256s+1} \right) \\ &= \frac{0.5s+1}{0.5} \frac{s+15}{7s+30} \frac{0.5}{2s+1} \left(1 + \frac{1}{16s+1} \frac{128\sqrt{2}s+1}{256s+1} \right) \end{aligned} \quad (28)$$

이때 $Q_{[1/3]}(s) = Q_{[0/2]}(4s)$ 관계와 Table 3의 수식을 이용하였다. Fig. 6에 계단응답 비교를 하였다. 해석하는 다음과 같다[7].

$$y(t) = L^{-1} \left(\frac{e^{-\sqrt{s}}}{1 + \beta\sqrt{s}} \frac{1}{s} \right) = \operatorname{erfc} \left(\frac{0.5}{\sqrt{t}} \right) - \exp \left(\frac{1}{\beta} + \frac{t}{\beta^2} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{\sqrt{t}}{\beta} + \frac{0.5}{\sqrt{t}} \right) \quad (29)$$

Eq. (27)과 Eq. (28)은 같은 차수의 근사인데, 제안한 방법인 Eq. (28)의 근사가 월등히 우수함을 확인할 수 있다. IAE 값은 (A, B)에 대하여 각각 (23.6, 1.49)로 계산된다.

5-3. 공정 전달함수: $1 / (1 + \sqrt{s})$

다음의 분수 차수(fractional order) 시스템을 고려한다[11-13].

$$Y(s) = \frac{1}{1 + \sqrt{s}} F(s) \quad (30)$$

이는 여러 물리화학적 공정에서 나타나는 half-order 미분기를 갖는 공정의 문제이다[11-12].

제안하는 근사와 분수 차수 미분기의 근사에 자주 이용되는 Oustaloup[13]의 근사를 비교한다. Oustaloup 근사는 근사 영역 주파수와 근사 차수의 매개변수를 갖는다. 주파수 0.001과 10 사이에서 \sqrt{s} 를 4차로 맞추는 근사를 고려한다. 이를 본 공정에 적용하면 다음을 얻을 수 있다.

$$\frac{1}{1+\sqrt{s}} \approx 1 / \left(1 + 3.1623 \frac{(s+1.7783)(s+0.17783)(s+0.017783)(s+0.0017783)}{(s+5.6234)(s+0.56234)(s+0.056234)(s+0.0056234)} \right) \quad (31)$$

Eq. (31)의 근사는 공정의 정상상태 이득에서 대략 3%의 오차를 준다. 이 오차는 Ostaloup 근사를 낮은 주파수 영역으로 옮기면 줄어든다[13].

제안하는 Eq. (12)의 근사를 적용하면 다음이 얻어진다.

$$\frac{1}{1+\sqrt{s}} \approx \frac{1}{1+c_0 \frac{1-Q_{[1/3]}(s)}{1+Q_{[1/3]}(s)}} = \frac{1}{1+\frac{6s+15}{s+15} \frac{1-Q_{[1/3]}(s)}{1+Q_{[1/3]}(s)}} \quad (32)$$

$$= 1 / \left(1 + \frac{(6s+15) \left(1 - \frac{0.5}{2s+1} \left(1 + \frac{1}{16s+1} \frac{128\sqrt{2}s+1}{256s+1} \right) \right)}{(s+15) \left(1 + \frac{0.5}{2s+1} \left(1 + \frac{1}{16s+1} \frac{128\sqrt{2}s+1}{256s+1} \right) \right)} \right)$$

여기서 $Q_{[1/3]}(s)=Q_{[0/2]}(4s)$ 관계와 Table 3의 수식을 이용하였다. 계단응답을 위한 해석하는 다음과 같다 [7,14].

$$y(t) = L^{-1} \left(\frac{1}{1+\sqrt{s}} \right) = 1 - e^t \operatorname{erfc}(\sqrt{t}) \quad (33)$$

Fig. 7에 계단응답을 보였다. 제안하는 방법과 Oustaloup 근사가 비슷한 결과를 보여주고 있다. Eq. (31)의 Oustaloup 근사는 정상상태에서 3% 정도의 오차를 보이기 때문에 모사 시간을 늘리면 이 오차의 효과가 서서히 나타날 것으로 보인다. 반면에 제안하는 Eq. (32)는 정상상태 오차가 없다. IAE 값은 (A, B)에 대하여 각각 (1.21, 1.00)로 계산된다. 두 근사 모두 우수한 계단응답 모사 결과를 주는 것을 볼 수 있지만, 특히 본 연구에서 제안한 방법은 정상상태 이득을 보존한다. 이는 본 근사 방법이 특정 주파수 대역을 맞추는 방식이 아닌, 급수 구조와 Shank 기반 재구성을 통해 전달함수의

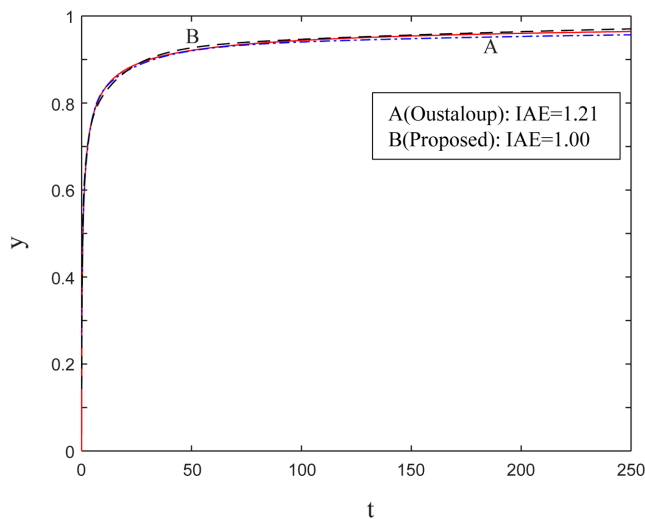


Fig. 7. Step responses for the example process 5.3 (Exact(red solid line, Eq. (33)), A(dash-dotted line, Eq. (31)), B(dashed line, Eq. (32))).

저주파 거동을 직접 제어할 수 있기 때문에 얻어지는 특성이라 할 수 있다.

5-4. 공정 전달함수: $\exp(-Pe/2 - \sqrt{Pe^2/4+s})$

다음의 편미분 방정식으로 표현되는 공정의 동특성을 고려한다 [1,7].

$$\frac{\partial p(z,t)}{\partial t} = Pe \frac{\partial p(z,t)}{\partial z} + \frac{\partial^2 p(z,t)}{\partial z^2}$$

$$p(z,0) = 0$$

$$p(0,t) = f(t), p(\infty,t) = 0 \quad (34)$$

여기서 Pe는 공정 변수로 대류 효과를 나타내는 것이다. Laplace 변환을 통하여 식을 풀면 다음을 얻을 수 있다[7].

$$Y(s) = P(1,s) = e^{-Pe/2 - \sqrt{Pe^2/4+s}} F(s) \quad (35)$$

여기서 Y(s), P(1,s)와 F(s)는 각각 y(t), p(1,t)와 f(t)의 Laplace 변환이다. Laplace 역변환을 통하여 계단응답을 해석적으로 얻을 수 있다[7].

$$y(t) = \frac{1}{2} \left(\operatorname{erfc} \left(\frac{1}{2\sqrt{t}} + \frac{Pe}{2} \sqrt{t} \right) + e^{-Pe} \operatorname{erfc} \left(\frac{1}{2\sqrt{t}} - \frac{Pe}{2} \sqrt{t} \right) \right) \quad (36)$$

Pe=0.01인 경우에 대하여 분석을 할 때, Eq. (15)~(17)를 적용하면 다음을 얻는다.

$$e^{-0.005 - \sqrt{2.5 \times 10^{-5} + s}} = e^{-0.005} e^{-\sqrt{s+q}}, q = 2.5 \times 10^{-5}$$

$$\approx 0.995 \frac{0.5}{0.5(s+q)+1}$$

$$\left(1 + \frac{0.5}{2(s+q)+1} \left(1 + \frac{1/\sqrt{2}}{16(s+q)+1} \left(1 + \delta \frac{\sqrt{2}-1}{256(s+q)+1} \right) \right) \right) \quad (37)$$

Eq. (37)에서 정상상태 이득인 s=0를 대입하였을 때 양 쪽을 같게 하는 δ를 계산하면 δ=0.940이다. 이 문제에 대하여 Lee and

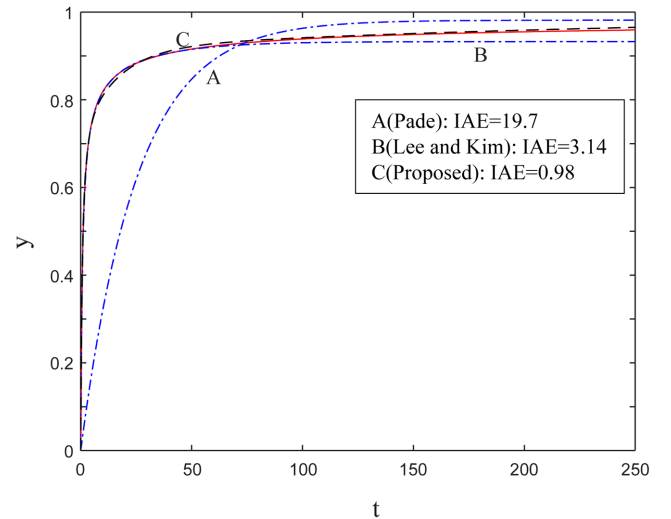


Fig. 8. Step responses for the example process 5.4 (Exact(red solid line, Eq. (36)), A(dash-dotted line, 4th order Padé [10]), B(dash-dotted line, Lee and Kim [10]), C(dashed line, Eq. (37))).

Kim [10]은 먼저 $e^{-0.005-\sqrt{2.5 \times 10^{-5}+s}} \approx 0.995e^{-\sqrt{s}}$ 의 근사를 하고 여기에 Eq. (1)의 급수 근사를 하는 방법을 적용하였다.

Fig. 8에 4차 Padé 근사 [10], Lee and Kim 근사 [10], 그리고 본 방법의 Eq. (37)에 대한 계단응답을 비교하였다. 4차 Padé 근사는 응답이 정확한 값에서 크게 벗어나는 매우 느린 응답을 주는 것을 볼 수 있다. Lee and Kim의 방법으로 같은 4차 근사를 하면, 개선된 계단 응답을 얻을 수 있다. 그러나 이 근사는 정상상태 이득에서 6% 가량 낮은 값을 준다. 공정의 정상상태 이득은 $e^{-0.01} \approx 0.990$ 로 Lee and Kim의 근사에서는 $e^{-\sqrt{s}}$ 를 더 정밀하게 근사 하더라도 정상상태 이득은 약 5% 정도의 오차를 보인다. 한편, 본 연구에서 제안한 Eq. (37)은 더욱 개선된 계단응답을 보이며, 정상상태 이득도 0.990로 실제와 같다. Eq. (37)의 δ 를 1로 하면 정상상태 이득은 0.4%의 오차를 가진다. IAE 값은 (A, B, C)에 대하여 각각 (19.7, 3.14, 0.98)로 계산되며, 최적의 δ 를 찾지 않고 Eq. (15)를 그대로 사용하더라도 응답에서 큰 오차는 없다.

본 연구에서 제안한 유리 전달함수 근사 프레임워크는 다양한 반무한 확산 지배 공정의 편미분방정식 동역학을 구조적으로 저차원의 상태공간 표현으로 환원하는 이론적 기반을 제공하며, 이를 통해 계산 효율의 개선과 현상의 해석적 이해에 도움을 줄 수 있다. 단 실제 공정 조건에서는 시공간적으로 변화하는 물성치, 이동 경계, 미지의 반응 메커니즘 등으로 인해 동특성을 충분히 설명하기 어려울 수 있다. 최근 제안되고 있는 물리기반 정규화 기법을 활용한 파라미터 추정 연구[16]와 이동 경계 문제에서의 하이브리드 모델링 접근[17]은 이러한 확장의 가능성을 시사하는데, 본 근사 프레임워크는 이러한 데이터-물리 통합 모델링 접근에서 안정적인 저차 동역학 표현을 제공하는 기초 모델로 활용될 수 있다.

6. Conclusion

본 연구에서는 반 무한 구조에서의 확산 지배 공정에서 나타나는 비유리 전달함수 요소들을 정수 차수의 유리 전달함수로 근사하기 위한 Padé-유사 유리함수 근사 기법을 제안하였다. 이러한 시스템을 Laplace 영역에서 표현할 경우, $\exp(-\sqrt{s})$ 및 \sqrt{s} 와 같은 비유리 함수 형태의 전달함수를 포함하게 되는데, 이는 고전적인 Padé 근사나 유한차원 상태공간 표현을 통한 해석 및 제어기 설계를 어렵게 하는 주요 원인이다. 제안하는 방법은 이러한 항들에 대해, 먼저 Padé 근사가 가능한 $1/\cosh(\sqrt{s})$ 형태의 급수 전개를 도입하여 급수의 수렴을 촉진하고, 이를 유리 전달함수로 근사함으로써 비유리 항들을 체계적으로 정수 차수 동역학으로 대체할 수 있음을 보였다. 이를 통해 대부분의 확산 공정 예제에서 4차 이하의 낮은 차수에서도 우수한 시간영역 응답과 정상상태 특성을 동시에 만족하는 근사를 얻을 수 있음을 보였다.

특히 이러한 형태의 분수 차수 연산자는 반무한 고체에서의 열전도, 촉매 펠렛 내부 확산, 관형 반응기의 축방향 분산 모델, 전기화학 시스템의 확산 임피던스(예: Warburg 요소), 점탄성 모델 등 다양한 물리화학적 공정에서 나타나는데, 본 연구에서 제안하는 프레임워크는 이런 본질적으로 무한차원 동특성을 갖는 편미분방정식 기반 공정 모델들을 효과적으로 상미분방정식 기반으로 근사할 수 있게 한다. 이는 고차 Padé 근사 등 기존의 방법들과 비교하여 계산 효율성과 해석의 용이성 측면에서 뚜렷한 장점을 가지며, 특정 주파수 대역에서의 응답만을 맞추는 기존 분수차수 근사 기법과 다르

게 전달함수의 저주파 거동과 정상상태 이득을 구조적으로 보존한다. 이는 본질적으로 무한차원 시스템의 유한차원 임베딩(finite-dimensional embedding)으로 해석될 수 있으며, 모델 축소(model reduction)의 관점에서도 중요한 의미를 갖는다. 즉, 이러한 근사는 공정의 시간영역 모사, 주파수 응답 해석, 상태 추정 및 모델 예측 제어(MPC)를 포함한 고급 제어기 설계의 적용을 가능하게 하며, 확산 지배 공정 시스템에 대한 시스템 이론 기반 접근의 실용적 활용 범위를 크게 확장할 것으로 기대된다.

단, 본 연구는 1차원 반무한 구조에서의 선형 확산 지배 공정을 대상으로 하였다는 점에서는 적용 범위에 한계가 있다. 다차원 확산 문제의 경우 공간 모드 간의 결합 효과로 인해 전달함수 구조가 보다 복잡해질 수 있으며, 본 논문에서 제안한 급수 재구성 기법을 직접 적용하기 위해서는 추가적인 구조 분석이 요구된다. 또한, 본 연구는 확산계수가 상수인 선형 시스템을 가정하고 있으므로, 상태 의존적 확산계수나 반응-확산이 결합된 비선형 시스템의 경우에는 Laplace 영역의 해석적 표현이 일반적으로 성립하지 않을 수 있고, 이에 대한 별도의 접근이 필요할 것이다. 다만 본 연구에서 제안한 근사 프레임워크는 단순한 함수 근사 기법을 넘어, 무한차원 확산 동역학을 유한차원 유리 전달함수로 구조적으로 환원하는 체계적 접근이라는 점에서 보다 넓은 의미를 가진다.

더 나아가, 본 연구는 \sqrt{s} 및 $\exp(-\sqrt{s})$ 형태의 비해석적 전달함수 항에 초점을 두었으나, 일반적인 분수 차수 연산자에 대한 체계적인 재구성 전략은 향후 연구 과제로 남는다. 향후에는 다차원 확산계, 비선형 확산 동역학, 그리고 모델 축소 및 제어 설계와의 통합을 포함하는 방향으로 본 근사 프레임워크를 확장할 수 있을 것으로 기대된다.

Reference

1. Carslaw, H. S. and Jaeger, J. C., "Conduction of Heat in Solid;" Oxford University Press, Oxford, UK (1959).
2. Finlayson, B. A., "Nonlinear Analysis in Chemical Engineering;" MacGraw-Hill, New York, N.Y. (1980).
3. Krstic, M., "Compensating Actuator and Sensor Dynamics Governed by Diffusion PDEs;" *Syst. Control Lett.*, **58**, 372-377 (2009).
4. Tang, S. and Xie, C., "State and Output Feedback Boundary Control for a Coupled PDE-ODE System;" *Syst. Control Lett.*, **60**(8), 540-545(2011).
5. Lhachemi, H. and Shorten, R., "Output feedback stabilization of an ODE-Reaction-Diffusion PDE cascade with a long interconnection delay," *Automatica*, **147**, 110704, 1-9(2023).
6. Sierociuk, D., Skovranek, T., Macias, M., Podlubny, I., Petras, I., Dzielinski, A. and Ziubinski, P., "Diffusion Process Modeling by Using Fractional-order Models;" *Appl. Math. Comput.*, **257**, 2-11(2015).
7. Hassanzadeh, H. and Pooladi-Darvish, M., "Comparison of Different Numerical Laplace Inversion Methods for Engineering Applications;" *Appl. Math. Comput.*, **189**, 1966-1981(2007).
8. Lee, J. and Kim, D. H., "Simple High-order Approximations for Unsteady-state Diffusion, Adsorption and Reaction in a Catalyst: A Unified Method by a Continued Fraction for Slab, Cylinder and Sphere Geometries;" *Chem. Eng. J.*, **173**, 644-650(2011).
9. Kailath, T., "Linear Systems, Prentice-Hall;" Upper Saddle River,

- N.J., (1980).
10. Lee, J. and Kim, D. H., "Analytic Pade-like Approximations of $\exp(-\sqrt{t})$ for Simulations of Diffusion Processes in the Semi-infinite Geometry," *Chem. Eng. Comm.*, **207**, 194-202(2020).
 11. Podlubny, I., "Fractional Differential Equations," Academic Press, San Diego, (1999).
 12. Krishna, B. T., "Studies on Fractional Order Differentiators and Integrators: a Survey," *Signal Press.*, **91**, 386-426(2011).
 13. Oustaloup, A., Levron, F., Mathieu, B. and Nanot, F. M., "Frequency Band Complex Noninteger Differentiator: Characterization and Synthesis, IEEE Trans. Circuit Syst. I," *Fundam. Theory Appl.*, **47**, 25-39(2000).
 14. Zill, D. G. and Cullen, M. R., "Advanced Engineering Mathematics," PWS-KENT Pub., Boston, M. A., (1992).
 15. Gradshteyn, I. S. and Ryzhik, I. M., "Table of Integrals, Series, and Products," 7th ed., Academic Press, San Diego (2007).
 16. Pahari, S., Shah, P. and Kwon, J. S.-I., "Achieving Robustness in Hybrid Models: A Physics-Informed Regularization Approach for Spatiotemporal Parameter Estimation in PDEs," *Chem. Eng. Res. Des.*, **204**, 292-302(2024).
 17. Pahari, S., Shah, P. and Kwon, J. S.-I., "Unveiling Latent Chemical Mechanisms: Hybrid Modeling for Estimating Spatiotemporally Varying Parameters in Moving Boundary Problems," *Ind. Eng. Chem. Res.*, **63**(3), 1501-1514(2024).

Authors

Juhyeon Kim: Graduate Research Assistant, Artie McFerrin Department of Chemical Engineering, Texas A&M University, TX 77843, United States; juhyeon.kim@tamu.edu

Jietae Lee: Professor Emeritus, Department of Chemical Engineering, Kyungpook National University, Daegu 41002, Republic of Korea; jtlee@knu.ac.kr

Joseph Sang-II Kwon: Professor, William G. Lowrie Department of Chemical and Biomolecular Engineering, OH 43210, United States; kwon.677@osu.edu

Appendix

Eq. (1)의 $a_{n-1}(1+a_n)$ 항은 $e^{-2^{n-1}\sqrt{s}}$ 를 근사하기 위한 것이며, 이에 대해 더 정밀한 근사 방법을 찾는다. 다음 관계식을 이용한다.

$$e^{-2^{n-1}\sqrt{s}} = \left(e^{-\alpha 2^{n-1}\sqrt{s}} \right)^{1/\alpha} = \left(\frac{1}{2 \cosh(\alpha 2^{n-1}\sqrt{s})} \left(1 + e^{-\alpha 2^n \sqrt{s}} \right) \right)^{1/\alpha}$$

$$= \left(\frac{1}{2 \cosh(\alpha 2^{n-1}\sqrt{s})} \left(1 + \left(\frac{e^{-\phi \alpha 2^n \sqrt{s}}}{e^{-\phi \alpha 2^n \sqrt{s}}} \right)^{1/(\phi-\phi)} \right) \right)^{1/\alpha}$$
(A1)

위 각 함수에 첫 항으로 된 근사를 적용한다.

$$e^{-2^{n-1}\sqrt{s}} \approx \left(\frac{1}{2 \cosh(\alpha 2^{n-1}\sqrt{s})} \left(1 + \left(\frac{2 \cosh(\phi \alpha 2^n \sqrt{s})}{2 \cosh(\phi \alpha 2^n \sqrt{s})} \right)^{1/(\phi-\phi)} \right) \right)^{1/\alpha}$$

$$\approx \left(\frac{0.5}{\alpha^2 2^{2n-3} s + 1} \left(1 + \left(\frac{\phi^2 \alpha^2 2^{2n-1} s + 1}{\phi^2 \alpha^2 2^{2n-1} s + 1} \right)^{1/(\phi-\phi)} \right) \right)^{1/\alpha}$$

$$\approx \left(\frac{0.5}{\alpha^2 2^{2n-3} s + 1} \left(1 + \left(\frac{\frac{\phi^2}{\phi-\phi} \alpha^2 2^{2n-1} s + 1}{\frac{\phi^2}{\phi-\phi} \alpha^2 2^{2n-1} s + 1} \right) \right) \right)^{1/\alpha}$$

$$\approx \frac{1}{\alpha 2^{2n-3} s + 1} \frac{\frac{1}{2} \frac{\phi^2 + \phi^2}{\phi - \phi} \alpha 2^{2n-1} s + 1}{\frac{\phi^2}{\phi - \phi} \alpha 2^{2n-1} s + 1}$$
(A2)

이 근사는 작은 크기의 s 에 대하여 의미가 있는 것으로, 이는 $a_{n-1}(1+a_n)$ 항이 낮은 주파수를 담당하기 때문이다.

여기서 $\alpha=1, \phi=2, \varphi=0$ 로 선택하면 다음을 얻을 수 있다.

$$e^{-2^{n-1}\sqrt{s}} \approx \frac{1}{2^{2n-3} s + 1} \frac{2^{2n-1} s + 1}{2^{2n} s + 1}$$
(A3)

그리고 $\alpha=\sqrt{2}, \varphi=2^{1.5}(1-\sqrt{2^{0.25}-1}), \phi=\sqrt{2^{0.25}-1}$ 로 선택하면 다음이 얻어진다.

$$e^{-2^{n-1}\sqrt{s}} \approx \frac{1}{2^{2n-2.5} s + 1} \frac{2^{2n+0.25} s + 1}{2^{2n+1} s + 1}$$
(A4)

여기에 $\alpha=2, \varphi=2^2(1-\sqrt{2^{0.5}-1}), \phi=\sqrt{2^{0.5}-1}$ 로 선택하면 다음이 얻어진다.

$$e^{-2^{n-1}\sqrt{s}} \approx \frac{1}{2^{2n-2} s + 1} \frac{2^{2n+1.5} s + 1}{2^{2n+2} s + 1}$$
(A5)

본 연구에서는 Eq. (A5)를 사용하는데, 설계 변수(α, ϕ, φ)는 엄밀한 최적화 없이 식의 간단함을 기준으로 경험적으로 선정된 것이다.