

## ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКОГО ПОКРЫТИЯ

Запропоновані теоретичні основи структурного моделювання електролітичних процесів залізнення.

Предложены теоретические основы структурного моделирования электролитических процессов железнения.

Theoretical bases of structural modelling the electrolyt processes of a covering by iron are offered.

В настоящее время все более находит применение электролитическое покрытие. Особенно необходимо отметить применение данного процесса для восстановления деталей подвижного состава.

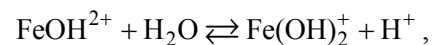
В общем виде процесс восстановления в любой момент времени можно характеризовать некоторым набором показателей  $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ , среди которых могут быть показатели как количественные, так и качественные. Например, электролиты железнения могут быть кислотными или щелочными, тогда  $x_1 = 1$ , то можно этим отмечать кислотность раствора, а при  $x_1 = 0$  будем считать, что раствор щелочной. Далее считаем, что  $x_2$  характеризует качественное состояние железа в растворе. Другими словами, это может быть хлорный электролит или сульфатный, или борфтористый и т. д., т. е. – качественный показатель. В качестве примера количественного показателя могут выступать: температура раствора, толщина покрытия, его твердость, сцепляемость и т. д.

Очевидно, что между показателями из  $X$  в любой момент времени существуют определенные связи, определяемые физико-химической природой процесса железнения.

В общем виде данные связи будем описывать в виде графа  $G(V, E)$ , где  $V$  – перечень вершин графа, названия которых совпадают с названиями показателей из перечня  $X$ , а  $E$  – множество дуг (ребер) между вершинами. Так, например, дуга из  $x_2$  в  $x_3$ , где  $x_3$  – толщина покрытия означает, что тип электролита влияет на толщину покрытия. На графе данная дуга начинается в вершине  $x_2$  и оканчивается в вершине  $x_3$ . Краткости ради эту дугу будем обозначать как  $e_{23}$ . Заметим,

что если между вершиной графа  $x_i$  и  $x_j$  имеется дуга  $e_{ij}$ , то может быть и дуга из  $x_j$  в  $x_i$ , т. е.  $e_{ji}$ , причем эти дуги не эквивалентны в том плане, что дуги можно характеризовать некоторым показателем  $P(e_{ij})$  и в общем случае  $P(e_{ij}) \neq P(e_{ji})$ .

**Пример.** Рассмотрим реакцию



Тогда скорость реакции в одну сторону может не совпадать со скоростью реакции в другую сторону.

Таким образом, граф  $G(V, E)$  является ориентированным графом.

**Определение 1.** Максимальный набор вершин  $M \subset V$  будем называть набором предикторных переменных, если вершины из  $M$  не имеют между собой дуг и любая вершина из множества  $V \setminus M$  достижима из множества  $M$ . Смысл предикторных переменных состоит в том, что, зная их, можно определить все остальное.

Под понятием **максимальный набор** подразумевается, что множество  $M$  не может быть пополнено без нарушения требования отсутствия дуг или достижимости остальных вершин.

Отметим, что в общем случае может возникнуть ситуация, когда исходный граф распадается на несколько между собой не связанных подграфов. Этот факт означает, что рассматриваемый процесс распадается на соответствующее количество между собой не связанных подпроцессов.

В такой ситуации можно каждый процесс рассматривать независимо и отдельно.

В дальнейшем считаем, что граф  $G(V, E)$

не распадается на несвязные подграфы.

Рассмотрим модельный пример, на котором дадим интерпретацию введенных понятий.

На рис. 1 дан граф, вершины которого пронумерованы от 1 до 8, т. е. множество  $X = \{x_1, x_2, \dots, x_8\}$ .

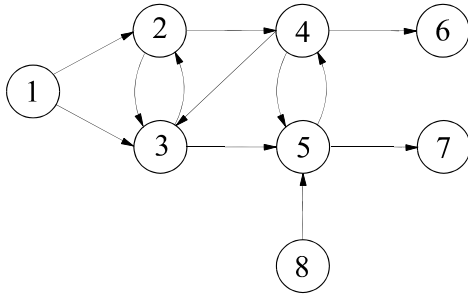


Рис. 1. Граф модельного примера

У данного графа имеются четыре висячие вершины – 1, 6, 7, 8. Однако вершины 6 и 7 являются стоками и они не могут входить в набор предикторных переменных. Вершины 1 и 8 являются истоками и они обязательно должны входить в набор предикторных переменных.

Таким образом, набор  $M = \{x_1, x_4, x_8\}$  является набором предикторных переменных, а оставшийся набор  $V \setminus M$  представляет собой

$$V \setminus M = \{x_2, x_3, x_5, x_6, x_7\}.$$

До каждой из указанных вершин можно указать путь, по которому можно до них «добраться». Так, например, в вершину  $x_2$  из  $M$  можно добраться по следующим путям:

$$\omega_1 := 1 \rightarrow 2;$$

$$\omega_2 := 1 \rightarrow 3 \rightarrow 2;$$

$$\omega_3 := 8 \rightarrow 5 \rightarrow 4 \rightarrow 3 \rightarrow 2.$$

Знание этих путей позволяет предложить структуру зависимости  $x_2$  от предикторных переменных, исходя из правила, что в эту зависимость должны входить все те показатели, от которых имеются дуги, входящие в вершину 2.

Следовательно, структура функциональной связи для  $x_2$  будет следующей  $x_2 = f_2(x_1, x_3)$ , а для  $x_3$  имеем  $x_3 = f_3(x_1, x_2, x_4)$ .

Для  $x_5, x_6$  и  $x_7$  соответственно получаем  $x_5 = f_5(x_3, x_4, x_8)$ ;  $x_6 = f_6(x_4)$ ;  $x_7 = f_7(x_5)$ .

Таким образом, структура математической модели для локальных взаимосвязей, представленная в виде графа (см. рис. 1) и выбранных предикторных переменных представляет собой

$$\begin{cases} x_2 = f_2(x_1, x_3); \\ x_3 = f_3(x_1, x_2, x_4); \\ x_5 = f_5(x_3, x_4, x_8); \\ x_6 = f_6(x_4); \\ x_7 = f_7(x_5). \end{cases} \quad (1)$$

Однако может случиться такая ситуация, когда какой-либо показатель, входящий в набор  $M$  не может быть измерен. Пусть показатель  $x_4$  не может быть измерен, тогда его исключаем из набора  $M$ , а структуру математической модели (1) дополняем зависимостью

$$x_4 = f_4(x_2, x_5).$$

Получив структуру математической модели, мы еще никаких ограничений не накладывали на характер зависимостей функций  $f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$  и  $f_7$ . В работе [1] отмечается, что механический процесс или физико-химический будут протекать в соответствии с законами физики, химии и т. д. и не зависят от выбора единиц измерения. Последнее означает, что если все размерности увеличим в  $k$  раз, то для математической модели получим (для примера  $x_4 = f_4(x_2, x_5)$ )

$$kx_4 = f_4(kx_2, kx_5) = kf_4(x_2, x_5).$$

А это означает, что указанные функции должны быть однородными первого порядка.

Следовательно, при раскрытии зависимостей в модели (1) функции  $f_i$  должны быть из класса однородных первого порядка.

Так, например, если мы желаем взять в качестве  $f_4$  простейшую линейную зависимость, то требование однородности означает, что  $f_4$  должно иметь следующий вид

$$x_4 = a_2 x_2 + a_5 x_5, \quad (2)$$

где  $a_2$  и  $a_5$  – некоторые коэффициенты.

Необходимо указать теорему Л. Эйлера для функций однородных первого порядка

$$f(x, y) = \frac{\partial f}{\partial x} x + \frac{\partial f}{\partial y} y. \quad (3)$$

Это свойство для (2) очевидно, но, например, взяв функцию

$$f(x, y) = A \cdot x^\alpha y^\beta,$$

где  $A, \alpha, \beta$  – постоянные величины, приходим к



не зависят от первоначальной системы единиц измерения потому, что они имеют нулевую размерность относительно единиц измерения  $A_1, A_2, \dots, A_k$ .

Использование относительной системы измерения позволяет соотношению (4) придать вид

$$P_{n-k} = f \left( \underbrace{1, 1, \dots, 1}_k, P_1, P_2, \dots, P_{n-k} \right). \quad (6)$$

Данное представление известно под названием П-теоремы [1]. Иногда величины  $P, P_1, \dots, P_{n-k}$  называют критериями подобия. Последнее означает, что, рассматривая процессы, у которых одинаковые критерии, можно по результатам одного процесса предсказать значение показателей другого процесса. Другими словами, если лабораторный процесс подобен промышленному, то, зная результаты лабораторного процесса, можно определить показатели промышленного процесса.

В практике электролитического покрытия, как правило, выбирают какой-либо один показатель, характеризующий свойство покрытия, например, сопротивление сдвигу, и затем, выполняя ряд специальных экспериментов, находят его зависимость от предикторных переменных из выбранной области их изменения.

По результатам эксперимента строят математическую модель, которую используют для определения таких значений предикторных переменных, при которых выбранный показатель достигает своего экстремального значения.

В общем случае покрытие характеризуется несколькими свойствами, например, сцепляемостью, микротвердостью, хрупкостью и т. д.

К сожалению, по литературным источникам нам не удалось найти работу, где оценка процесса электролитического покрытия производилась бы по нескольким показателям одновременно.

В работе [2] исследуются сцепляемость, микротвердость и хрупкость электролитических железных покрытий, однако, эти свойства рассматриваются каждый раз отдельно и даже наборы предикторных переменных различны.

Так, например, сернокислый электролит железнения на образцах по методу сдвига ( $\text{мН/м}^2$ ). В качестве предикторных переменных были взяты:

- кислотность электролита  $\tilde{x}_1$  ( $1,5 \pm 0,3$  рН);
- температура электролита  $\tilde{x}_2$  ( $40 \pm 20$  °С);

- начальная плотность тока  $\tilde{x}_3$  ( $2 \pm 1$  А/дм<sup>2</sup>);
- время выдержки в электролите без тока  $\tilde{x}_4$  ( $60 \pm 60$  с).

Эксперимент проводился с концентрацией сернокислого железа  $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$  – 420 г/л и добавкой сернокислого алюминия  $\text{Al}(\text{SO}_4)_3 \cdot 18\text{H}_2\text{O}$  – 100 г/л.

По опытным данным была получена математическая модель вида

$$\hat{Y}_1 = 275,163 - 28,00x_1 + 34,445x_2 + 8,333x_3 + 9,778x_4 + 13,29x_1^2 - 6,69x_1x_2 + 5,94x_2x_4 - 22,71x_3^2.$$

При изучении микротвердости условия эксперимента были несколько иными – не было добавок сернокислого алюминия.

В качестве предикторных переменных были взяты:

- кислотность электролита  $\tilde{x}_1$ ;
- температура электролита  $\tilde{x}_2$ ;
- начальная катодная плотность тока  $\tilde{x}_3$ ;
- рабочая плотность тока  $\tilde{x}_5$ .

Математическая модель для микротвердости имеет вид

$$\hat{Y}_2 = 369,6920 + 24,0518x_5 + 5,5039x_1 + 71,6411x_2 + 4,50x_3 + 70,5408x_2^2 - 13,078x_5x_2 - 11,0892x_5^2.$$

Таким образом, приведенные математические модели не могут быть использованы для решения задачи, когда желательно сделать сцепляемость и микротвердость как можно большими.

Нам представляется, что подобная ситуация в практике электролитического покрытия возникла из-за отсутствия математических методов (на то время) решения задач оптимизации по нескольким показателям.

В дальнейшем подобные задачи будем называть задачами векторной оптимизации, хотя сами математики такие задачи называют задачами многокритериальными [3].

С нашей точки зрения подобная терминологическая неточность возникла из-за толкования понятия «критерий».

Предлагаем под критерием понимать правило отбора вариантов.

В рассматриваемом случае правило отбора по двум и более показателям можно представить следующим образом:

- пусть  $x$  – набор предикторных переменных, которому соответствует сцепляемость

$F_1(x)$  и микротвердость  $F_2(x)$ , а  $y$  – тоже набор предикторных переменных, которому соответствует сцепляемость  $F_1(y)$  и микротвердость  $F_2(y)$ , тогда будем говорить, что набор « $y$  лучше, чем  $x$ », если имеет место

$$\begin{pmatrix} F_1(x) \leq F_1(y) \\ F_2(x) \leq F_2(y) \end{pmatrix}, \quad (7)$$

причем среди неравенств имеет место хотя бы одно строгое неравенство. Таким образом, соотношение (7) необходимо рассматривать как критерий.

В математическом плане приходим к задаче, формальная запись которой представляет собой [4]

$$\begin{pmatrix} F_1(x) \\ F_2(x) \end{pmatrix} \rightarrow \max \quad (8)$$

при условии, что  $x \in X$ , где  $X$  – область изменения предикторных переменных  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ .

Ради определенности напомним, что будем понимать под решением задачи векторной оптимизации (8).

**Определение 1.** Значение предикторных переменных  $x \in X$  будем называть эффективным, если любое отклонение от  $x$  приводит к уменьшению  $F_1(x)$  или  $F_2(x)$  или обоих сразу.

**Определение 2.** Множество  $X_* \subseteq X$  будем называть решением задачи (8), если любое  $x_* \in X_*$  является эффективным и несравнимым с другими  $x_*$  из  $X_*$ .

Учитывая важность введенных понятий, рассмотрим модельный пример, когда функция  $F_1(x)$  и  $F_2(x)$  имеют следующий вид (рис. 2).

Пусть  $x_1$  такое значение  $x \in [0, \infty]$ , при котором  $F_1(x)$  достигает максимального значения, а  $x_2$  имеет аналогичный смысл для  $F_2(x)$ , тогда решением задачи типа (8) является множество  $X_*$ , которое может быть использовано для построения рационального технологического процесса покрытия.

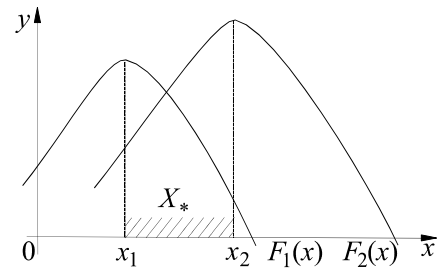


Рис. 2. Графическое представление модельного примера

Все изложенное позволяет сформулировать следующие основные задачи.

**Задача 1.** На основании априорной информации выбрать перечень показателей, характеризующих электролитический процесс покрытия и построить граф локальных взаимосвязей.

**Задача 2.** Для заданного графа локальных взаимосвязей определить наборы предикторных переменных и построить структуры математических моделей.

**Задача 3.** Для выбранного набора предикторных переменных разработать способ решения задачи математической оптимизации по опытному данным.

**Задача 4.** Среди допустимых наборов предикторных переменных выбрать такие, которые бы обеспечивали заданную точность.

**Задача 5.** Среди допустимых по точности наборов предикторных переменных выбрать такие, которые были бы технологически реализуемы и требовали бы как можно меньше затрат на их реализацию.

#### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Седов Л. И. Методы подобия и размерности в механике. – М.: Наука, 1977. – 400 с.
2. Калмуцкий В. С. Оптимизация технологии осаждения износостойких покрытий. – Кишинев.: Штиинца, 1973. – 108 с.
3. Ногин В. Д. Принятие решений в многокритериальной среде. Количественный подход. – М.: Физматлит, 2002. – 144 с.
4. Босов А. А. О Парето-оптимальных решениях задач векторной оптимизации / А. А. Босов, В. В. Скалозуб // Диференціальні рівняння та їх застосування: Зб. наук. пр. ДДУ. – Д.: 1988. – С. 66–70.

Надійшла до редколегії 08.02.2007.