

УДК 681.513:541.13

## ПАРАМЕТРИЧЕСКАЯ ИДЕНТИФИКАЦИЯ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА НА ОСНОВЕ ГЕНЕТИЧЕСКИХ АЛГОРИТМОВ

**А. М. Мендельсон,**

аспирант

**Е. Н. Бендерская,**

канд. техн. наук

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

**Р. А. Тенно,**

доктор техн. наук

Хельсинкский технологический университет

Рассматривается задача идентификации параметров двухсторонней модели электрохимического процесса. Использован подход, основанный на оценке параметров линеаризованной модели с последующим пересчетом линейных параметров в нелинейные. Для учета нелинейных ограничений при оценивании предлагается использовать генетические алгоритмы.

The problem of identifying the parameters of an electrochemical process is considered. The solution is based on genetic optimisation of linear coefficients subject to nonlinear constraints and recalculation of linear parameters to nonlinear parameters. The simulation results show the advantages of this method.

### Введение

В задаче электроосаждения методом химического восстановления модель процесса [1], состоящего из четырех реакций, задается в виде

$$\begin{cases} i_1 = i_{01} \left[ e^{k_1 \alpha_{a1} (\Phi - U_1)} - e^{-k_1 (1 - \alpha_{a1}) (\Phi - U_1)} \right] \\ i_2 = i_{02} \left[ e^{k_2 \alpha_{a2} (\Phi - U_2)} - e^{-k_2 (1 - \alpha_{a2}) (\Phi - U_2)} \right] \\ i_3 = i_{03} \left[ e^{k_3 \alpha_{a3} (\Phi - U_3)} - e^{-k_3 (1 - \alpha_{a3}) (\Phi - U_3)} \right] \\ i_4 = i_{04} \left[ e^{k_4 \alpha_{a4} (\Phi - U_4)} - e^{-k_4 (1 - \alpha_{a4}) (\Phi - U_4)} \right] \end{cases}, \quad (1)$$

где  $i_j, j = \overline{1, 4}$  – токи, соответствующие каждой реакции;  $i_{0j}, j = \overline{1, 4}$  – плотности токов, соответствующие каждой реакции;  $k_j, j = \overline{1, 4}$  – известные электрохимические константы;  $\alpha_{aj}, j = \overline{1, 4}$  – коэффициенты наклона, соответствующие каждой реакции;  $U_j, j = \overline{1, 4}$  – электродные потенциалы реакций;  $\Phi$  – смешанный потенциал.

Математическая модель (1) основана на уравнении электрохимической кинетики Батлера–Фольмера [2]. Электродные потенциалы определяются на основе уравнений Нернста [2, 3]. Значения токов и электродных потенциалов предполагаются наблюдаемыми. Цель идентификации – определение плотностей токов и коэффициентов наклона. При наличии соответствующих измерений смешанного потенциала данная задача может быть решена обычным нелинейным методом наименьших квадратов [4]. К сожалению, практически такие измерения являются достаточно неточными и дорогостоящими. Поэтому актуальной является разработка алгоритма идентификации неизвестных параметров модели (1) при наличии, максимум, знаний о диапазоне изменения смешанного потенциала.

### Линеаризация модели

Для идентификации будем использовать подход, основанный на сведении исходной задачи к задаче квадратичного программирования [5]. Введем следующее обозначение:

$$\eta_j = \Phi - U_j, j = \overline{1, 4}.$$

Разложение в ряд Тейлора каждого уравнения модели (1) ведет к следующей линейной зависимости токов реакций от потенциалов:

$$i_j(\Phi, U_j) = i_j(\Phi_0, U_{0j}) + i'_j(\Phi_0, U_{0j})(\eta_j - \eta_{0j}) = a_j + b_j(\eta_j - \eta_{0j}), j = \overline{1, 4}.$$

Линеаризованная модель процесса выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} i_1 = a_1 + b_1((\Phi - \Phi_0) - (U_1 - U_{01})) \\ i_2 = a_2 + b_2((\Phi - \Phi_0) - (U_2 - U_{01})) \\ i_3 = a_3 + b_3((\Phi - \Phi_0) - (U_3 - U_{01})) \\ i_4 = a_4 + b_4((\Phi - \Phi_0) - (U_4 - U_{01})) \end{cases} \quad (2)$$

Смешанный потенциал удовлетворяет уравнению консервации  $i_1 + i_2 + i_3 + i_4 = 0$ . Этот факт позволяет привести модель (2) к следующему виду:

$$\begin{cases} i_1 = \gamma_1 + \beta_{21}\Delta U_{21} + \beta_{31}\Delta U_{31} + \beta_{41}\Delta U_{41} \\ i_2 = \gamma_2 + \beta_{12}\Delta U_{12} + \beta_{32}\Delta U_{32} + \beta_{42}\Delta U_{42} \\ i_3 = \gamma_3 + \beta_{13}\Delta U_{13} + \beta_{23}\Delta U_{23} + \beta_{44}\Delta U_{43} \\ i_4 = \gamma_4 + \beta_{14}\Delta U_{14} + \beta_{24}\Delta U_{24} + \beta_{34}\Delta U_{34} \end{cases}, \quad \Delta U_{ij} = U_i - U_j. \quad (3)$$

Параметры  $\gamma_i, \beta_i$  системы (3) очевидным образом связаны с параметрами  $a_i, b_i$  системы (2). На коэффициенты системы (3), исходя из (2), накладываются следующие линейные и нелинейные ограничения:

$$\sum_{i=1}^4 \gamma_i = 0, \beta_{ij} = \beta_{ji}, \quad (4)$$

$$\beta_{ij}\beta_{kl} = \beta_{ik}\beta_{jl}. \quad (5)$$

Заметим, что при отсутствии нелинейных ограничений система (3) может быть идентифицирована обычным методом наименьших квадратов [5]. Линейное оценивание не позволяет учесть нелинейные ограничения (5). В хорошо обусловленном случае и при малой ошибке линеаризации это не принципиально, так как ограничения (5) в итоге выполняются. Однако в общем случае ошибка линеаризации и ошибки измерений могут вести к сильным разбросам параметров, что не позволяет однозначно определить коэффициенты модели (3). Для того чтобы решить указанную проблему, далее предлагается использовать генетические алгоритмы. Здесь же заметим, что обратное преобразование осуществляется в два этапа. Сначала по оценкам параметров  $\gamma_i, \beta_i$  рассчитываются также линейные

параметры  $a_i, b_i$ . Затем преобразование линейных параметров в нелинейные осуществляется с использованием формул

$$\alpha_{aj}^{\text{opt}} = \frac{b_j}{a_j k_j} - \frac{e^{-k_j \eta_{0j}}}{1 - e^{-k_j \eta_{0j}}}, \quad i_j^{\text{opt}} = \frac{a_j}{e^{k_j \alpha_{aj}^{\text{opt}} \eta_{0j}} (1 - e^{-k_j \eta_{0j}})}, j = \overline{1, 4}. \quad (6)$$

Разрешимость уравнений (6) требует знания точки линеаризации. Для этого необходимо знание средних значений электродных потенциалов, легко вычисляемых на основе измерений, и среднего значения смешанного потенциала, предполагаемого известным. Очевидно, предложенный алгоритм дает адекватную параметрическую оценку только в случае малых отклонений потенциалов от точки разложения. В связи с тем, что целью управления в задаче электроосаждения [1] является поддержание постоянной толщины и постоянного состава сплава, что равносильно поддержке примерно постоянных токов и смешанного потенциала, предположение о малых отклонениях является допустимым. Однако в общем случае для получения достоверных результатов идентификации необходима предварительная кластеризация данных с последующим применением алгоритма для каждого кластера.

### Идентификация на основе генетических алгоритмов

Необходимо определить коэффициенты модели (3) при наличии линейных (4) и нелинейных (5) ограничений. Целевая функция, подлежащая минимизации, имеет следующий вид:

$$J = \min \left\{ (\mathbf{i}_1 - \mathbf{X}_1 \boldsymbol{\theta}_1^T)^2 + (\mathbf{i}_2 - \mathbf{X}_2 \boldsymbol{\theta}_2^T)^2 + (\mathbf{i}_3 - \mathbf{X}_3 \boldsymbol{\theta}_3^T)^2 + (\mathbf{i}_4 - \mathbf{X}_4 \boldsymbol{\theta}_4^T)^2 \right\}, \quad (7)$$

где  $\mathbf{X}$  и  $\boldsymbol{\theta}$  – регрессоры и векторы параметров из модели (3).

Алгоритм идентификации системы с нелинейными ограничениями с использованием генетических алгоритмов состоит в следующем. Каждая хромосома состоит из четырех параметров, при этом каждый параметр, в свою очередь, кодируется бинарным словом. При этом заранее учтено, что коэффициенты могут быть только положительными, что означает отсутствие гена знака. Возможный вариант задания хромосомы – коэффициенты  $\beta_{12}, \beta_{13}, \beta_{14}, \beta_{23}$ . Два других параметра  $\beta_{24}, \beta_{34}$  могут быть получены использованием нелинейных ограничений (5). Оставшиеся

■ Таблица 1. Результаты идентификации по полному набору данных

Исходные параметры		Число обусловленности $5.1 \cdot 10^6$		Число обусловленности $4.7 \cdot 10^4$	
$i_0$ , мА	$\alpha$	$i_0$ , мА	$\alpha$	$i_0$ , мА	$\alpha$
17.7	0.53	17.1	0.61	17.7	0.51
0.50	0.38	0.48	0.36	0.50	0.38
2.51	0.41	2.11	0.36	2.6	0.43
1.61	0.54	1.56	0.53	1.6	0.54

■ Таблица 2. Результаты идентификации по двум кластерам

Первый кластер		Второй кластер	
$i_0$ , мА	$\alpha$	$i_0$ , мА	$\alpha$
17.7	0.53	17.7	0.53
0.50	0.38	0.50	0.38
2.50	0.41	2.50	0.41
1.61	0.54	1.61	0.54

три параметра  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  могут быть определены стандартным методом наименьших квадратов с линейными ограничениями [6]:

$$\theta_{\text{constr}} = \theta - (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{A} \left( \mathbf{A} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{A}^T \right)^{-1} (\mathbf{A} \theta - \mathbf{b}).$$

Полный алгоритм идентификации на основе генетических алгоритмов следующий:

- 1) генерация начальной популяции;
- 2) вычисление функции предпочтения для каждой хромосомы на основе целевой функции (7);
- 3) скрещивание и мутация;
- 4) формирование новой популяции;
- 5) если количество генераций больше заданного или ошибка меньше порога – конец, иначе – переход к шагу 2.

Результатом идентификации является лучшая хромосома последней популяции.

Таким образом, при указанном определении хромосом поиск всегда ведется в допустимой области ограничений на параметры. По сравнению с классическими методами оптимизации, подход на основе генетических алгоритмов позволяет исключить такую величину, как невязка ограничений, которая определяет, удовлетворяют ли параметры ограничениям. В рассматриваемом случае эта невязка всегда равна нулю.

### Пример идентификации

Рассмотрим электрохимический процесс из четырех реакций, плотности токов и коэффициенты на-

клона которого приведены в табл. 1. Электродные потенциалы моделировались на основе уравнений Нернста. В генетическом алгоритме были использованы следующие параметры: количество популяций 100, размер популяции 1000, вероятность мутации 0.05. Каждая переменная была закодирована 16-битным словом. Тестирование алгоритма идентификации проводилось в двух режимах: в первом случае электродные потенциалы вычислялись строго по уравнениям Нернста, а во втором – для повышения степени обусловленности к ним добавлялся малый псевдослучайный сигнал. Диапазоны изменения электродных потенциалов составляют  $[-895, -865]$ ,  $[-483, -477]$ ,  $[-365, -333]$ ,  $[-288.74, -288.73]$  мВ соответственно. Диапазон изменения смешанного потенциала  $[-752, -728]$  мВ. В соответствии с этим линеаризация производилась в следующей точке:  $U_{01} = -880$  мВ,  $U_{02} = -480$  мВ,  $U_{03} = -349$  мВ,  $U_{04} = -288.735$  мВ,  $\Phi_0 = -740$  мВ. Размерность окна данных при оценивании выбиралась в соответствии с теорией планирования научного эксперимента и составила 1000 измерений. Результаты идентификации представлены в табл. 1. На однопроцессорной ЭВМ AMD Duron 800 МГц, 512 RAM расчет с указанными выше размером популяции, количеством популяций и размером окна данных, определяющих быстродействие генетического алгоритма, занимает в среднем порядка 3 мин. В табл. 2 представлены результаты идентификации с предварительным разбиением данных на два кластера. Сравнение табл. 1 и 2 показывает, что кластеризация улучшает качество параметрических оценок. Это объясняется уменьшением ошибки разложения.

### Заключение

В работе был предложен алгоритм идентификации нелинейных параметров двухсторонней модели электрохимического процесса на основе

линеаризации с использованием генетических алгоритмов. Основными преимуществами алгоритма являются простота и однозначность получения оценок даже в плохообусловленном случае.

### Литература

1. Paunovic M., Sclesinger M. Fundamentals of electrochemical deposition. John Wiley & Sons, 1998. 301 p.
2. Newman J. Electrochemical systems. Wiley-Interscience, 2004. 672 p.
3. Дамаскин Б. Б., Петрий О. А., Цирлина Г. А. Электрoхимия. М.: Химия, 2001. 624 с.

4. <http://mathworld.wolfram.com/NonlinearLeastSquaresFitting.html>.
5. Мендельсон А. М. Идентификация частично наблюдаемого электрохимического процесса на основе линеаризации // Идентификация систем и задачи управления: Тр. V Междунар. конф. М., 2006. С. 846–848.
6. Soderstrom T., Stoica P. System Identification. New York: Prentice Hall, 1989. 612 p.

## ПАМЯТКА ДЛЯ АВТОРОВ

*Поступающие в редакцию статьи проходят обязательное рецензирование.*

При наличии положительной рецензии статья редактируется и рассматривается редакционной коллегией. Принятая в печать статья направляется автору для согласования редакторских правок. После согласования автор представляет в редакцию окончательный вариант текста статьи.

Процедуры согласования текста статьи могут осуществляться как непосредственно в редакции, так и по e-mail (80x@mail.ru).

При отклонении статьи редакция представляет автору мотивированное заключение и рецензию. При необходимости доработать статью – рецензию.

*Редакция журнала напоминает, что ответственность за подбор, достоверность и точность фактов, экономико-статистических и технических показателей, собственных имен и прочих сведений, а также за то, что в материалах не содержится сведений, не подлежащих открытой публикации, несут рекламодатели.*