

УДК 681.3:543.253

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И РАСПОЗНАВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ В СИСТЕМАХ ЭКСПРЕСС АНАЛИЗА МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВОВ

©2009 А.В. Седов^{1,2}, М.С. Липкин², С.М. Липкин², Д.А. Онышко²

¹ Южный научный центр РАН, г. Ростов на Дону

² Южно-Российский государственный технический университет, г. Новочеркасск

Поступила в редакцию 2.12.2009

Рассматривается применение математических моделей компонентного, кластерного анализов, теории распознавания образов, декомпозиционных методов моделирования для решения задачи предварительного электрохимического экспресс-анализа металлических сплавов.

Ключевые слова: математическое моделирование, электрохимическая поляризация, экспресс-анализ, металлические сплавы

Электрохимический экспресс-анализ металлических сплавов на основе усовершенствованной импульсной прямой и инверсионной хронопотенциометрии является новым и перспективным методом контроля металлов и сплавов в различных областях техники, технологий, в частности, в машиностроении [1]. Его преимуществами являются экспрессность, простота и высокая информативность. Однако полная реализация преимуществ метода возможна только на основе использования специального математического и алгоритмического обеспечения. Это связано с наличием латентных факторов, влияющих на закономерности протекания электрохимических процессов, лежащих в основе анализа, в частности, сложность структуры металлических сплавов, для которой практически невозможно подобрать адекватную аналитическую математическую модель. В связи с этим представляется необходимым построение специальных математических моделей на основе методов интеллектуальной обработки информации для эффективного решения задач экспресс-анализа сплавов [2-5].

Одной из задач, из общего перечня решаемых при электрохимическом анализе, является *предварительный анализ образцов* с целью идентификации преобладающего компонента сплава по графику изменения потенциала – хронопотенциограмме. Хронопотенциограмма является функцией отклика действия

импульсов тока, протекающего в цепи электрохимического датчика и осуществляющего поляризацию образца в импульсном режиме. В настоящей работе рассматривается применение математических моделей компонентного, кластерного анализов, теории распознавания образов, декомпозиционных методов моделирования (ДММ) [2-5] для решения задачи предварительного анализа образцов.

Подходы моделирования процессов при распознавании сплавов. При построении систем распознавания сплавов можно выделить три основных этапа, связанных с математическим моделированием процессов: 1) определение признаков пространства распознавания по обучающей выборке; 2) автоматическая кластеризация выборок хронопотенциограмм H_j ; 3) выбор решающего правила распознавания сплавов. Первый этап, с одной стороны, связан со снижением размерности пространства представления хронопотенциограмм $H_j = [h_{j1}, \dots, h_{jm}]^T$, но без потери основной информации о сплаве. С другой стороны, с обеспечением наибольшей различимости образов различных сплавов в полученном пространстве. В признаковом пространстве каждый сплав H_j , представляется точкой или образом $Y_j = [y_{j1}, \dots, y_{jm}]^T$ с минимальным числом параметров $m < n$. Второй этап связан с получением обучающей выборки и определением самой возможности кластеризации сплавов. Третий этап – это определение перечня математических условий, позволяющих с требуемой точностью отнести образ сплава Y_j , а, следовательно, и сам сплав к одной из возможных групп (кластеров).

Определение признаков пространства реализуем на основе ДММ, компонентного

Седов Андрей Владимирович, доктор технических наук, ведущий научный сотрудник, профессор кафедры «Автоматика и телемеханика». E-mail: Sedov_A.V@mail.ru

Липкин Михаил Семенович, кандидат химических наук, доцент кафедры «Технология электрохимических производств». E-mail: Lipkin@yandex.ru

Липкин Семен Михайлович, аспирант

Онышко Дмитрий Анатольевич, ассистент кафедры «Автоматика и телемеханика». E-mail: onix2001@rambler.ru

разложения [3], позволяющего выделить основные составляющие графиков H_j путем преобразования выборки $\{H_j\}, j = \overline{1, N}$ со взаимно коррелированными координатами в образы Y_j с линейно независимыми координатами:

$$Y_j = V^T H_j \quad (1)$$

где V - матрица настраиваемого линейного ортогонального преобразования. Преобразование (1) является декоррелирующим и каждая координата y_{ji} образа Y_j линейно независима одна от другой, а, следовательно, правомерно предположить, что каждая координата несет свою информацию о форме процесса H_j и связана со своей составляющей сплава. Восстановление процесса H_j по образу Y_j возможно согласно ДММ [3]:

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{bmatrix}, \quad K = \begin{bmatrix} k_{11} & k_{12} & \dots & k_{1n} \\ k_{21} & k_{22} & \dots & k_{2n} \\ \dots & k_{il} & \dots & \dots \\ k_{n1} & k_{n2} & \dots & k_{nn} \end{bmatrix},$$

$$k_{il} = M \left[(H_{ij} - H_i^*) (H_{lj} - H_l^*) \right], \quad j = \overline{1, N},$$

где M - знак усреднения по индексу j ; H_i^*, H_j^* - среднее значение i и j координат по выборке $\{H_j\}$; $V = [V_1 \ V_2 \ \dots \ V_n]$;

Число столбцов матрицы V равно n , однако только малая часть или m из них определяет изменчивость процесса H_j . Данные m столбцов матрицы V выбирают по соответствующим наибольшим собственным числам λ_i так, чтобы:

$$\sum_{i=m+1}^n \lambda_i / \sum_{i=1}^n \lambda_i < \delta \quad (3)$$

Величина δ определяет допустимую погрешность распознавания графиков H_j или кластеризации. В большинстве практических задач достаточно выбирать $\delta = 0,1 \div 0,02$. Использование ДММ для формирования признакового пространства обеспечивает: 1) наилучшую разделимость кластеров (образов) различных сплавов в построенном признаковом пространстве по сравнению со всеми возможными ортонормированными пространствами; 2) адаптивность признакового пространства к изменениям кластеризуемых графиков H_j , что позволяет производить настройку системы на распознавание тех или иных сплавов, а также самообучение в процессе работы.

$$H_j = \sum_{i=1}^m y_{ji} \cdot V_i + Q_j,$$

где V_i - ортонормированные столбцы матрицы преобразования V или настраиваемые базисные функции, по которым разложен процесс H_j ; Q_j - вектор практически неизменной величины (изменчивость его координат от j мала).

Базисные функции $V_i, i = \overline{1, n}$ вычисляются по выборке $\{H_j\}$ [2, 3, 5], как собственные векторы матрицы выборочных ковариационных моментов K :

$$KV = V\Lambda, \quad (2)$$

где Λ - диагональная матрица собственных чисел матрицы K :

Автоматическую кластеризацию выборок хронопотенциограмм удобно проводить методом k групповых средних [2]. В качестве решающего правила в устройстве распознавания сплавов удобнее всего использовать методы линейных разделяющих функций или непараметрическое правило *kNN-ближайших соседей* [2, 5]. Эти подходы не требуют знания многомерной плотности вероятности распределения образов в кластерах. При распознавании могут использоваться различные метрики, что улучшает распознавание в случае несферических (эллипсоидальных, плохо разделимых или иных) кластеров. Общий вид линейной решающей функции для двух кластеров ω_1, ω_2 задается формулой [2]:

$$d(Y_j) = \sum_{i=1}^m w_i y_{ji} + w_{m+1} = WY_j + w_{m+1} \begin{cases} > 0, \text{ если } Y_j \in \omega_1; \\ < 0, \text{ если } Y_j \in \omega_2, \end{cases}$$

где w_i - весовые коэффициенты, определяемые по стандартным алгоритмам.

Экспериментальные исследования. Экспериментальную проверку изложенных подходов моделирования и распознавания проводили, используя 30 типов сплавов железа, никеля, хрома, меди, титана, молибдена,

вольфрама, ниобия, золота, алюминия, цинка, делящиеся по преобладающему компоненту на 19 классов. Цель проверки – выявление работоспособности перечисленных методов при распознавании хронопотенциограмм по преобладающему в сплаве элементу. В результате импульсной поляризации с использованием устройства [1] получили массив $H=[H_1, \dots, H_N]$ хронопотенциограмм образцов (рис. 1). Для устранения влияния случайных помех применяли к H медианную фильтрацию 5-го порядка и сжатие массивов, т.е. сокращение числа отсчетов в соответствии со спектральным составом [2]. В соответствии с (2) определили собственные значения Λ и собственные векторы V матрицы выборочных ковариационных моментов K (см. рис. 2).

По физическому смыслу V_1 - наиболее значимый собственный вектор, соответствует активному растворению с образованием ионов металлов в электролите, V_2 и V_3 – пассивации и области транспассивности. Согласно (3), получаем $\delta < 0,01$ для 3-х собственных векторов и $\delta < 0,02$ для 2-х, поэтому возможно рассмотрение как 2-х, так и 3-мерного признакового пространства. На рис. 3 приведена кластеризация всех образцов в 2-мерном пространстве собственных векторов V_1, V_2 . Многие из классов сплавов имеют сложную и взаимопроникающую структуру, что соответствует сложному характеру анодного растворения многокомпонентных сплавов, в котором в зависимости от сочетания компонентов возможны как базовые типы процессов, так и их смесь.

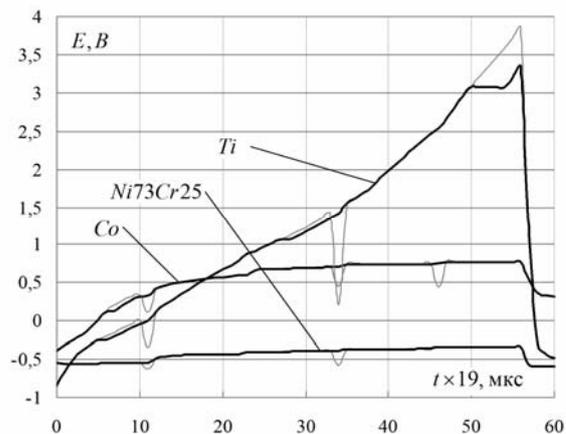


Рис.1. Примеры хронопотенциограмм сплавов

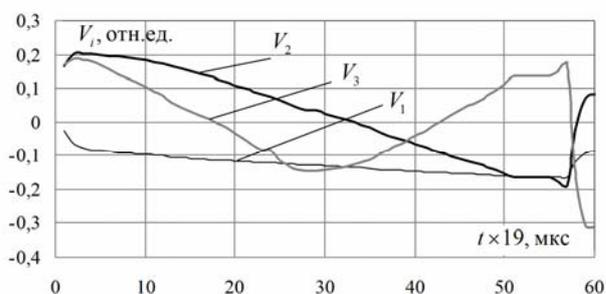


Рис. 2. Три первых собственных вектора матрицы K

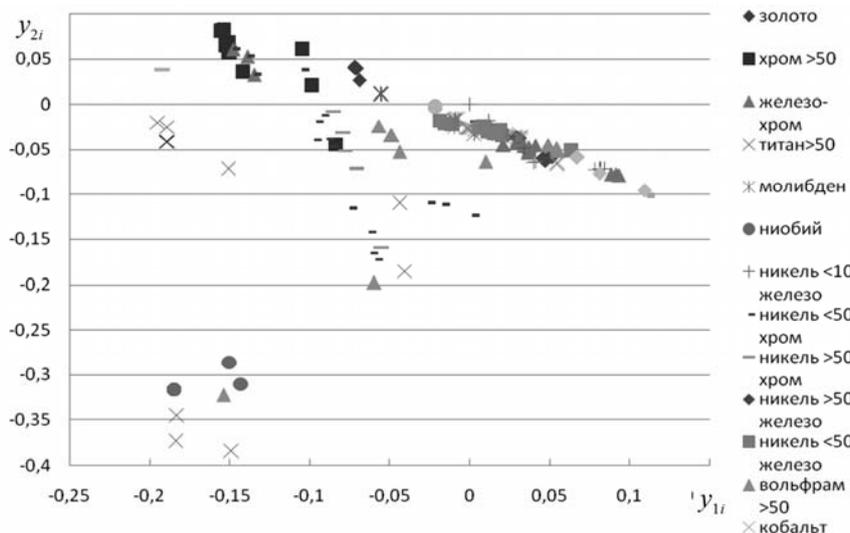


Рис. 3. Образы обучающей выборки в пространстве (y_1, y_2)

Для проверки эффективности методов автоматической кластеризации хронопотенциограмм к полученной выборке (рис. 3) применили метод k групповых средних [2,4] с критерием в форме отношения $g=d/D$, среднего расстояния d между центрами кластеров к

среднему внутриклассовому разбросу D . Получили оптимальное разбиение на 20 кластеров, что очень хорошо согласуется с реальным количеством распознаваемых сплавов, а именно 19 типов. Проверка показала, что правило распознавания kNN дает 57% правильных рас-

познаваний даже в сочетании с лучшей в этом случае метрикой Журавлева:

$$d_{im} = \sum_{j=1}^k I_{im}^j, \text{ где } I_{im}^j = \begin{cases} 1, & |y_{ij} - y_{mj}| < \varepsilon; \\ 0, & |y_{ij} - y_{mj}| \geq \varepsilon. \end{cases}$$

Для улучшения качества классификации был предложен 2-этапный подход: 1) разбиение выборки на классы по методу k групповых средних; 2) разделение полученных классов на фрагменты в соответствии с типом анодного поведения. Этот подход позволяет преодолеть проблему взаимопроникновения классов и дает возможность использовать в кластеризации метод линейных решающих функций. Фрагмент таких решающих функций показан на рис. 4.

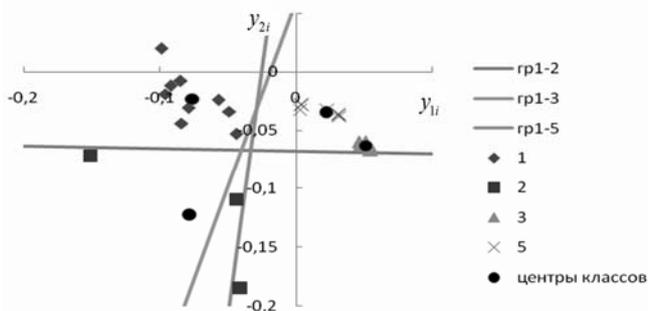


Рис.4. Решающие функции на плоскости (y_1, y_2)

В результате применения двухэтапного подхода доля правильных распознаваний со-

ставляла 95%, что доказывает его перспективность по отношению к рассматриваемой задаче.

Выводы:

1. Собственные векторы ковариационной матрицы, полученной по выборке измерений на сплавах различной природы, представляют базовые типы зависимостей потенциала от времени. Им соответствуют активное растворение и пассивация.
2. Проблема классификации по обучающей выборке с пересекающимися классами может быть решена использованием двухэтапного подхода.
3. Полученный алгоритм идентификации типа сплава может быть использован в методиках электрохимического анализа конструкционных и специальных сплавов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Способ электрохимической идентификации вида и количественного содержания оксидных, сульфидных и углеродных включений в металлокомпозиционные системы. Патент РФ № 2315990. МКИ G01R 27/48. Опубл. 27.01. 2008. Бюл. №27.
2. Ту, Дж. Принципы распознавания образов / Дж. Ту, Р. Гонсалес. – М.: Мир, 1978. – 412 с.
3. Седов, А.В. Системы контроля, распознавания и прогнозирования электропотребления: модели, методы, алгоритмы и средства / А.В. Седов, И.И. Надтока. – Ростов н/Д.: Изд. РГУ, 2002. – 320 с.
4. Грузман, И.С. Цифровая обработка изображений в информационных системах / И.С. Грузман, В.С. Киричук, В.П. Косых и др. Учебное пособие. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2000. – 168 с.
5. Фукунага, К. Введение в статистическую теорию распознавания образов. – М.: Наука, 1979. – 308 с.

MATHEMATICAL MODELING AND RECOGNITION OF ELECTROCHEMICAL POLARIZATION PROCESSES IN SYSTEMS OF METAL ALLOYS EXPRESS-ANALYSIS

© 2009 A.V. Sedov^{1,2}, M.S. Lipkin², S.M. Lipkin², D.A. Onyshko²

¹ Southern Scientific Center RAS, Rostov-on-Don

² South-Russian State Technical University, Novocherkassk

Application of mathematical models of componental, cluster analysis, the theory of pattern recognition, decomposition modeling methods for the solution of problem of preliminary electrochemical express-analysis of metal alloys is observed.

Key words: *mathematical modeling, electrochemical polarization, express-analysis, metal alloys*

Andrey Sedov, Doctor of Technical Sciences, Leading Research Fellow, Professor at the Department "Automatics and Telemechanics". E-mail: Sedov_A.V@mail.ru

Mikhail Lipkin, Candidate of Chemistry, Associate Professor at the Department "Technology of Electrochemical Manufactures". E-mail: Lipkin@yandex.ru

Semyon Lipkin, Graduate Student

Lmityriy Onyshko, Assistant At the Department "Automatics and Telemechanics". E-mail: onix2001@rambler.ru