ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ
И
ПРОЦЕССЫ УПРАВЛЕНИЯ
N. 3, 2021
Электронный журнал,
рег. Эл. N ФС77-39410 от 15.04.2010
ISSN 1817-2172

http://diffjournal.spbu.ru/
e-mail: jodiff@mail.ru

Прикладные задачи

Математическая модель и численная схема расчёта электрических полей в гальванических ваннах с плоским токонепроводящим экраном

И. Ю. Пчелинцева, Ю. В. Литовка
Тамбовский государственный технический университет,
e-mail: irina_yu_10@mail.ru, polychem@list.ru

Аннотация. Рассматривается математическая модель электрического поля в гальванической ванне с плоскими анодом и катодом, имеющей бесконечно тонкую плоскую перегородку–изолятор с поперечными отверстиями. Такой токонепроводящий экран необходим для более равномерного покрытия детали катода. В работе делается переход к разностному аналогу рассматриваемой задачи. Описан эффективный численный метод, основанный на методе Ньютона решения нелинейных алгебраических уравнений, проведен вычислительный эксперимент для 4-х поперечных отверстий. Полученные результаты показывают эффективность применяемого численного метода.

Ключевые слова: уравнение Лапласа, метод Ньютона, критерий неравномерности, толщина покрытия.

1 Введение

Электролитические процессы нанесения металлопокрытий применяются для защиты изделий от коррозии, декоративной отделки поверхности и других целей. Гальваническое покрытие имеет важную количественную характеристику – толщину покрытия. Поскольку электрическое поле в электролите неоднородно, толщина покрытия в разных точках поверхности покрываемой детали разная. Важной задачей является нанесение более равномерного покрытия. Заметим, что изоляционные стенки с отверстиями в гальванических ваннах применяются для того, чтобы добиться более равномерного нанесения гальванического покрытия на поверхность детали.

Чтобы решить задачу вычисления толщины покрытия на детали-катоде, необходимо рассчитать распределение потенциалов в гальванической ванне из уравнения Лапласа.

Одним из наилучших является метод, согласно которому пространство гальванической ванны разбивается сеткой, и производные функции распределения потенциала электролита в объеме ванны заменяются их разностными аналогами. Полученная система нелинейных алгебраических уравнений решается методом простых итераций с использованием метода верхней релаксации с прогонкой по строке [1, 2] по анодным и катодным плотностям тока. Однако у такой итеративной процедуры есть недостаток – медленная сходимость к приближённому решению. В то же время, при решении задачи нанесения более равномерного покрытия из-за её высокой размерности уравнение Лапласа приходится решать тысячи раз. Если задать высокую точность, то такую задачу нельзя решить за приемлемое время. В связи с этим задача повышения скорости вычислений при решении уравнения Лапласа является актуальной.

Анализ итерационных методов показал, что вместо простых итераций целесообразно применить метод Ньютона, который, как известно [3], обладает квадратичной скоростью сходимости.

Цель данной работы – разработка математической модели процесса получения покрытия с бесконечно тонкой изоляционной стенкой и численного метода решения её уравнений, обеспечивающего более высокую скорость решения поставленной задачи по сравнению с известными методами. Особенностью подхода, предлагаемого в работе, является то, что он позволяет построить динамически разностную схему по исходным данным для математического пакета Maxima в виде нелинейной системы алгебраических уравнений.

2 Математическая модель процесса

Построим математическую модель процесса нанесения покрытия на плоскую деталь в гальванической ванне с бесконечно тонкой плоской перегородкой-

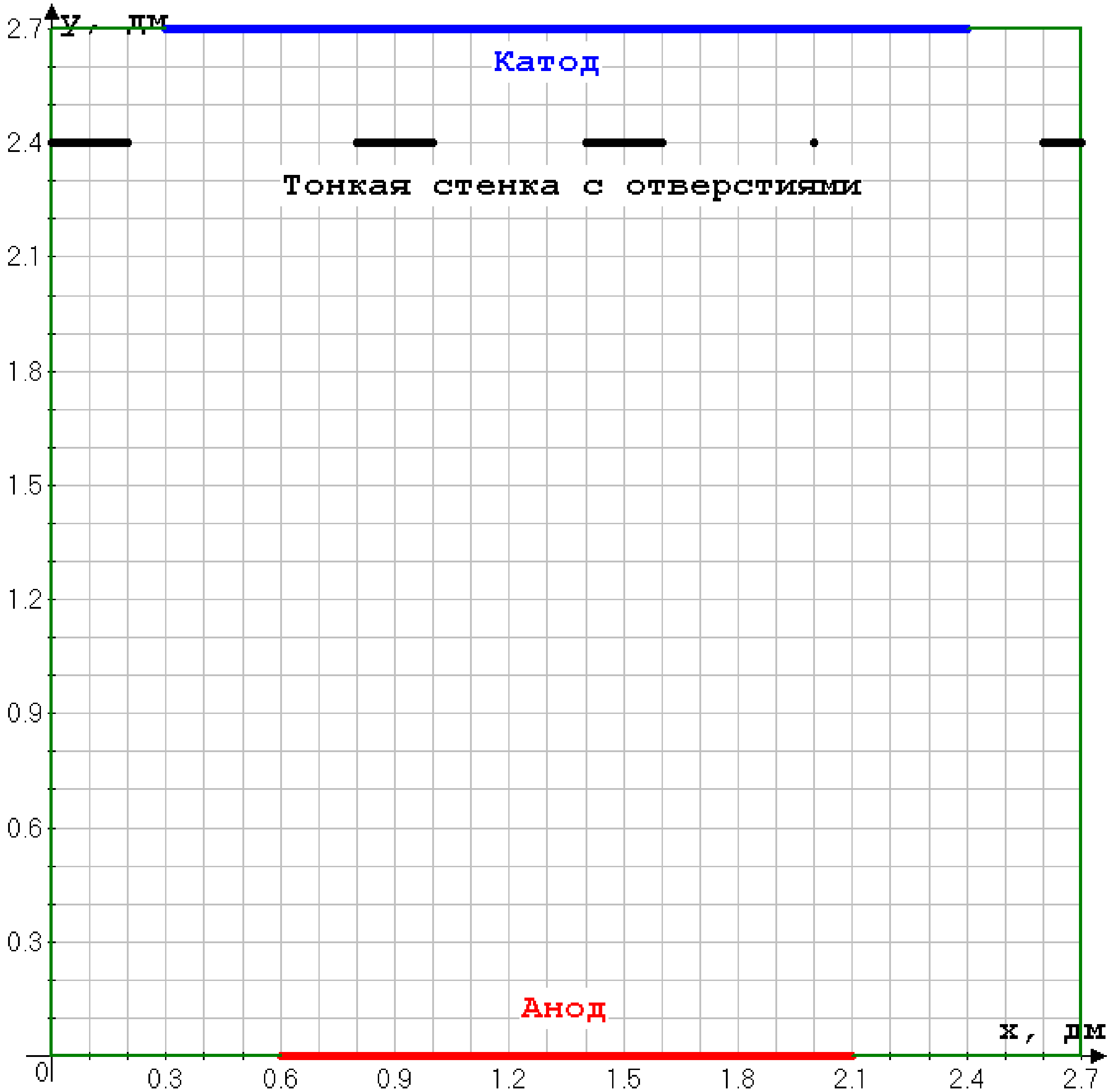

Рис. 1: Горизонтальное сечение гальванической ванны.

изолятором, в которой имеются поперечные отверстия прямоугольной формы. Предполагается, что ванна имеет форму параллелепипеда. Анод и катод являются плоскими и располагаются напротив друг друга вдоль соответствующих стен. Тогда мы имеем ванну, когда в горизонтальном сечении, перпендикулярном оси Oz, не меняется конфигурация электрического поля внутри ванны, т.е. для любого такого сечения мы имеем картину, представленную на рис. 1. Размер ванны $l \times l$.

Поперечный вид плоской перегородки–изолятора представлен на рис. 2.

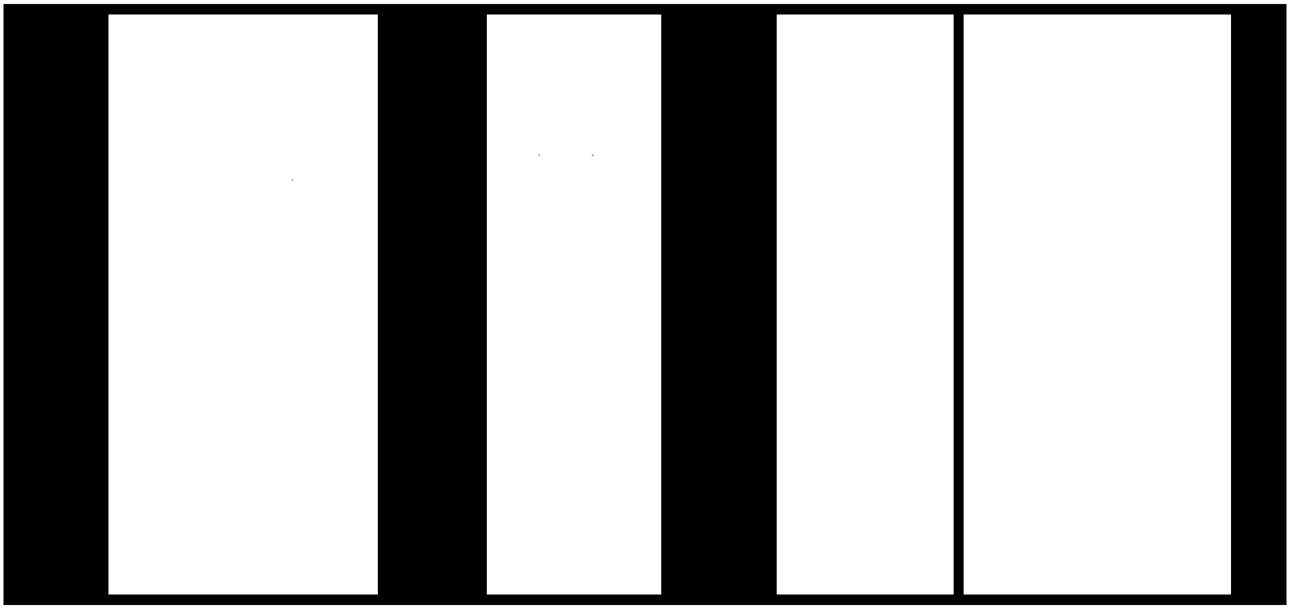

Рис. 2: Поперечный вид плоской перегородки-изолятора.

Конфигурация поперечных отверстий прямоугольной формы соответствует их расположению в продольном сечении ванны на рис. 1. Высота токонепроводящего экрана равна высоте гальванической ванны, а длина равна l.

Предположим, что к аноду подведено напряжение U_a, к катоду 0 В. Стенки ванны являются изолирующими, т.е. градиент потенциала по нормали к их поверхности равен нулю.

Обозначим через $\varphi(x, y)$ потенциал электрического поля в точке с координатами (x, y). Запишем уравнение Лапласа, описывающее распределение потенциала в электролите гальванической ванны [4]:

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2} = 0. \tag{1}$$

Далее опишем граничные условия для рис. 1. Для границы с изоляторами–стенками они имеют вид:

$$\left.\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right|_{(0;y)} = 0,\ y \in (0; l),\ \left.\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right|_{(l;y)} = 0,\ y \in (0; l), \tag{2}$$

$$\left.\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right|_{(x;0)} = 0,\ x \in [0; x_{al}),\ \left.\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right|_{(x;0)} = 0,\ x \in (x_{ar}; l], \tag{3}$$

$$\left.\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right|_{(x;l)} = 0,\ x \in [0; x_{cl}),\ \left.\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right|_{(x;l)} = 0,\ x \in (x_{cr}; l], \tag{4}$$

где x_{al}, x_{ar}, x_{cl} и x_{cr} – координаты расположения краёв анода и катода соответственно. Например, для рис. 1 $x_{al} = 0{,}6$ дм, $x_{ar} = 2{,}1$ дм, $x_{cl} = 0{,}3$ дм, $x_{cr} = 2,4$ дм при $l = 2{,}7$ дм.

Потенциалы поля на аноде и катоде связаны соотношениями

$$\varphi(x,0) + F_a\left(i_a(x)\right) = U_a,\ x \in [x_{al}; x_{ar}], \tag{5}$$

$$\varphi(x,l) + F_c\left(i_c(x)\right) = 0,\ x \in [x_{cl}; x_{cr}], \tag{6}$$

где $F_a\left(i_a\right)$ и $F_c\left(i_c\right)$ – так называемые функции анодной и катодной поляризации [5, 6], i_a, i_c – соответственно, анодная и катодная плотности тока.

Для плоской бесконечно тонкой перегородки–изолятора с поперечными отверстиями граничные условия аналогичны условиям для изоляторов–стенок:

$$\left.\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right|_{(x;p)} = 0,\ \ x \in \left[x_{pl}^{(k)}; x_{pr}^{(k)}\right],\ \ k = \overline{1,n}, \tag{7}$$

где p – y-координата перегородки–изолятора, $x_{pl}^{(k)}$, $x_{pr}^{(k)}$ – координаты расположения краёв k-ого отверстия, n – количество отверстий.

Поскольку ток течёт от большего потенциала к меньшему (положительное направление тока вдоль оси y), закон Ома в дифференциальной форме на аноде и катоде запишется как

$$i_0 = -\chi\left.\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right|_{(x;0)},\ \ x \in [x_{al}; x_{ar}],\ \ i_c = -\chi\left.\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right|_{(x;l)},\ \ x \in [x_{cl}; x_{cr}], \tag{8}$$

где χ – удельная проводимость электролита.

Таким образом, мы построили математическую модель (1) – (8) распределения потенциала внутри гальванической ванны.

Толщина получаемого на катоде покрытия определяется из формулы

$$\delta(x) = \frac{K}{\rho} i_c(x)\Delta t,$$

где $x \in [x_{cl}; x_{cr}]$, K – электрохимический эквивалент металла покрытия, ρ – плотность металла покрытия, Δt – время нанесения покрытия.

3 Описание численного метода

Для численного решения нелинейной задачи (1) – (8) заменим производные их разностными аналогами. Введём сетку по координатам x и y:

$$\begin{gathered} x_i = (i-1)h_x, \\ y_j = (j-1)h_y, \\ i = \overline{1, N_x},\ j = \overline{1, N_y}, \end{gathered}$$

где h_x и h_y – шаги сетки по x и y соответственно, N_x и N_y – количество узлов.

Производным, входящим в задачу (1) – (8), сопоставим соотношения:

$$\begin{cases} \dfrac{\varphi_{i-1,j} - 2\varphi_{i,j} + \varphi_{i+1,j}}{h_x^2} + \dfrac{\varphi_{i,j-1} - 2\varphi_{i,j} + \varphi_{i,j+1}}{h_y^2} = 0, \\ \qquad i = \overline{2, N_x - 1} \ \&\ j = \overline{2, N_p - 1},\ \overline{N_p + 1, N_y - 1}, \\ \qquad i = \overline{p_l^{(k)}, p_r^{(k)}} \ \&\ j = N_p \ \&\ k = \overline{1, n}; \\ \dfrac{\varphi_{2,j} - \varphi_{1,j}}{h_x} = 0, \quad j = \overline{2, N_p - 1},\ \overline{N_p + 1, N_y - 1}; \\ \dfrac{\varphi_{N_x,j} - \varphi_{N_x-1,j}}{h_x} = 0, \quad j = \overline{2, N_p - 1},\ \overline{N_p + 1, N_y - 1}; \\ \dfrac{\varphi_{i,2} - \varphi_{i,1}}{h_y} = 0, \quad i = \overline{1, a_l - 1},\ \overline{a_r + 1, N_x}; \\ \dfrac{\varphi_{i,N_y} - \varphi_{i,N_y-1}}{h_y} = 0, \quad i = \overline{1, c_l - 1},\ \overline{c_r + 1, N_x}; \\ \dfrac{\varphi_{i,N_p} - \varphi_{i,N_p-1}}{h_y} = 0, \quad i = \overline{1, p_l^{(k)} - 1},\ \overline{p_r^{(k)} + 1, N_x} \ \&\ k = \overline{1, n}; \\ \varphi_{i,1} + F_a\left(-\chi \dfrac{\varphi_{i,2} - \varphi_{i,1}}{h_y}\right) - U_a = 0, \quad i = \overline{a_l, a_r}; \\ \varphi_{i,N_y} + F_c\left(-\chi \dfrac{\varphi_{i,N_y} - \varphi_{i,N_y-1}}{h_y}\right) = 0, \quad i = \overline{c_l, c_r}, \end{cases}$$

где a_l, a_r, c_l, c_r – номера узлов сетки, соответствующих левому и правому краю анода и катода, $p_l^{(k)}$, $p_r^{(k)}$ – номера узлов сетки, соответствующих краям отверстий перегородки–изолятора, $n = 4$. Например, для рис. 1 $a_l = 7$, $a_r = 22$, $c_l = 4$, $c_r = 25$, $p_l^{(1)} = 4$, $p_r^{(1)} = 8$, $p_l^{(2)} = 11$, $p_r^{(2)} = 14$, $p_l^{(3)} = 18$, $p_r^{(3)} = 20$, $p_l^{(4)} = 22$, $p_r^{(4)} = 26$, $N_p = 25$.

Заметим, что количество уравнений и неизвестных в системе равно $m = N_x \cdot N_y$.

Соберём неизвестные величины

$$\varphi_{1,1},\ \varphi_{1,2},\ \ldots,\ \varphi_{1,N_y},\ \varphi_{2,1},\ \varphi_{2,2},\ \ldots,\ \varphi_{2,N_y},\ \ldots,\ \varphi_{N_x,1},\ \varphi_{N_x,2},\ \ldots,\ \varphi_{N_x,N_y}$$

в вектор и обозначим его как

$$\Psi = [\psi_1,\ \psi_2,\ \ldots,\ \psi_m]^{\mathrm{T}}.$$

Левая часть полученной системы является вектор-функцией Λ от Ψ.

Таким образом, мы перепишем систему как

$$\Lambda(\Psi) = 0. \tag{9}$$

Для численного решения нелинейной системы (9) предлагается использовать метод Ньютона. Обозначим через $\Psi^{(0)}$ вектор начального приближения. Выбор значений его компонентов, т.е. $\varphi_{i,j}^{(0)}$, осуществляется следующим образом.

Поскольку в направлении от анода к катоду потенциал убывает, примем:

$$\varphi_{i,1}^{(0)} = U_a,\ \varphi_{i,N_y}^{(0)} = 0,\ i = \overline{1, N_x}.$$

В промежуточных узлах сетки сделаем линейную интерполяцию, т.е.

$$\varphi_{i,j}^{(0)} = U_a \frac{N_y - j}{N_y - 1}. \tag{10}$$

Как известно (см., например, [3]), численная схема метода Ньютона имеет вид:

$$\Psi^{(r)} = \Psi^{(r-1)} - \left[\nabla\Lambda\left(\Psi^{(r-1)}\right)\right]^{-1} \Lambda\left(\Psi^{(r-1)}\right), \tag{11}$$

где $r = 1,\ 2,\ 3, \ldots$ – номер итерации, $\nabla\Lambda\left(\Psi^{(r-1)}\right)$ – матрица Якоби функции Λ в точке $\Psi^{(r-1)}$.

На сегодняшний день матрица Якоби в соотношении (11) при реализации метода Ньютона в математических пакетах не обращается, т.к. это требует существенных вычислительных затрат. Для нахождения значения приближения $\Psi^{(r)}$ на текущей итерации выражение (11) можно привести к системе линейных уравнений вида

$$\nabla\Lambda\left(\Psi^{(r-1)}\right)\Psi^{(r)} = \nabla\Lambda\left(\Psi^{(r-1)}\right)\Psi^{(r-1)} - \Lambda\left(\Psi^{(r-1)}\right),$$

для решения которой используется наиболее эффективный метод – LU-разложение (например, в [7] для решения задач теории упругости).

4 Пример расчёта

Проиллюстрируем разработанный алгоритм на примере расчёта процесса нанесения никелевого гальванического покрытия на плоскую пластину для электролита, содержащего $NiSO_4$ (2 моль/л) и H_3BO_3 (0,5 моль/л) при температуре 25 °C.

Для вычислительного эксперимента было выбрано положение и конфигурация токонепроводящего экрана, показанного на рис. 1 и 2.

Чтобы рассчитать распределение толщины получаемого на катоде покрытия в мкм, используем соотношение

$$q(x,\Delta t) = \theta(x)\cdot\Delta t = 100\frac{K}{\rho}i_c(x)\Delta t = -100\frac{K\chi}{\rho}\left.\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right|_{(x;l)}\Delta t \approx$$
$$\approx 100\frac{K\chi}{\rho}\frac{\varphi_{i,N_y-1}-\varphi_{i,N_y}}{h_y}\Delta t,$$

где $x \in [x_{cl}; x_{cr}]$, $i = \overline{c_l, c_r}$; K – электрохимический эквивалент никеля, г/(А·ч); ρ – плотность никеля, г/см^3, Δt – время нанесения покрытия, ч. В нашем случае $K = 1,09$ г/(А·ч), $\rho = 8,902$ г/см^3, $\chi = 0,515$ (Ом·дм)$^{-1}$ [5]. Далее положим, что время $\Delta t = \Delta t_{\text{calc}} = 0,5$ ч.

Введём обозначение

$$\delta(x) = q\left(x, \Delta t_{\text{calc}}\right).$$

Заметим, что для раствора электролита поляризационные кривые приводятся в литературе в виде графиков, например, в работе [5, с. 275, 289].

В дальнейших расчётах целесообразным является построение аппроксимирующих зависимостей $F_a\left(i_a\right)$ и $F_c\left(i_c\right)$ методом наименьших квадратов.

Анализ графиков из [5] показал, что наилучшим является квадратичный вид аппроксимирующей зависимости.

Полученное нами аналитическое выражение для анодной поляризации:

$$F_a(i_a) = -4,267i_a^2 + 5,867i_a$$

для $i_a \in [0; 1,5]$, А/дм^2; для катодной поляризации:

$$F_c(i_c) = 0,883i_c^2 - 2,242i_c \tag{12}$$

для $i_c \in [0; 3]$, А/дм^2.

Отрицательное значение изменения $F_c(i_c)$ потенциала катоде (в вольтах) уже учтено в функции (12) на приведённом отрезке изменения плотности тока i_c.

5 Результаты вычислений

Для отыскания приближённого решения системы (9) мы использовали реализацию метода Ньютона в математическом пакете Maxima [8] с точностью $\varepsilon = 10^{-2}$. Под точностью вычислений мы понимаем модуль разности векторов $\Psi^{(r)}$ и $\Psi^{(r-1)}$ на соседних итерациях, т.е. когда выполнено условие

$$\left|\Psi^{(r)} - \Psi^{(r-1)}\right| < \varepsilon,$$

вычисления завершаются. Для автоматизации формирования скрипта для математического пакета с системой (9) из большого числа уравнений разработана модификация программы [9] на языке C++ с учётом наличия в ванне изолятора–стенки.

Для взаимодействия с пакетом авторы использовали перенаправление ввода/вывода с вызовом команды `maxima` под Linux. Каждая команда записывается в отдельной строке входного файла. Перед вызовом в пакете реализации метода Ньютона нужно выполнить команду `display2d:false$`, чтобы результаты вычислений выводить в виде строк. В самой команде `mnewton()` определить левые части уравнений системы (9) в символьном виде, вектор Ψ неизвестных, а также начальное приближение, сформированное правилу (10). После того, как пакет произведёт вычисления, результат считывается из выходного текстового файла.

На рис. 3 приведены результаты вычислительного эксперимента для $U_a = 3$ В, $l = 2,7$ дм, $N_x = N_y = 28$ и $h_x = h_y = 0,1$ дм. При этом для наглядности точки сетки соединены кубическим сплайном.

С учётом того, что мы работаем с плоским сечением гальванической ванны, для оценки равномерности полученного покрытия используем выражение

$$R = \frac{1}{L}\int_{x_{cl}}^{x_{cr}} \frac{\delta(x) - \delta_{\min}}{\delta_{\min}} dx, \tag{13}$$

где L – длина катода в продольном сечении (рис. 1),

$$\delta_{\min} = \min_{x\in[x_{cl};x_{cr}]} \delta(x).$$

Так как мы работаем с дискретным аналогом функции $\delta(x)$, заменим

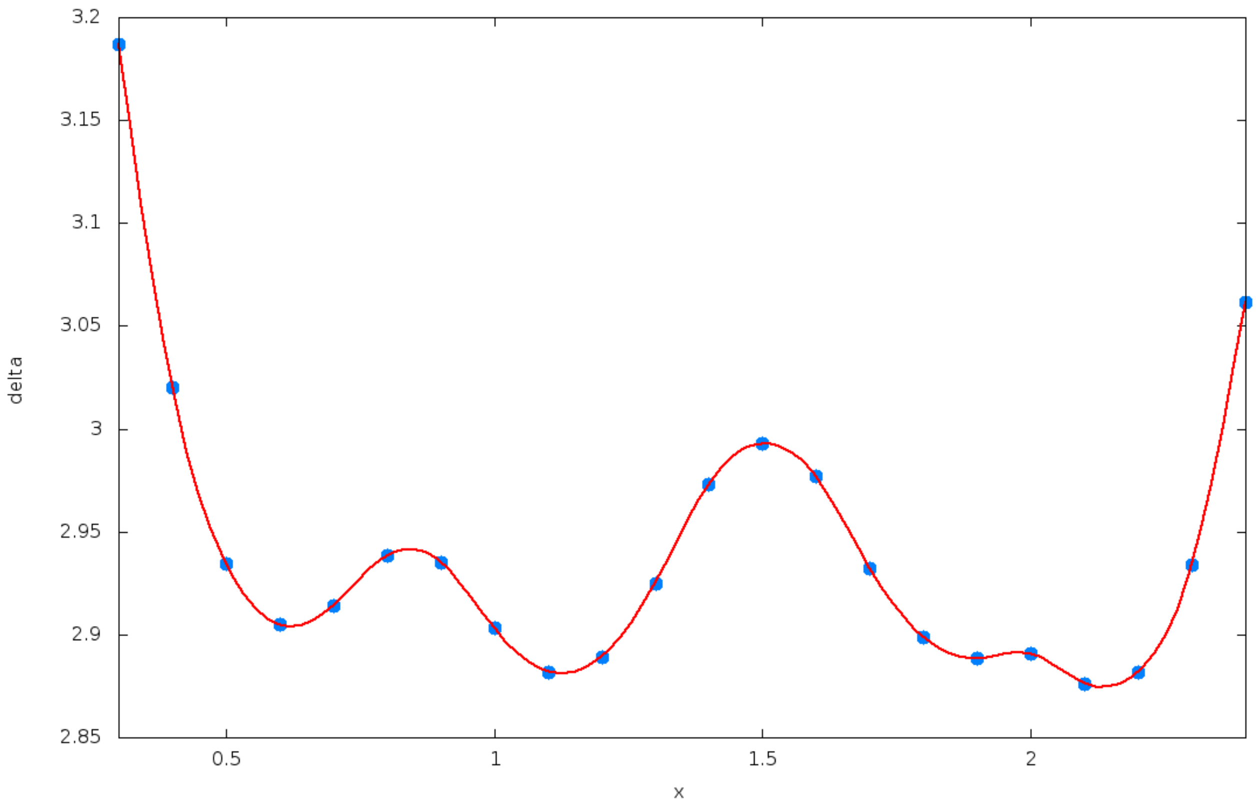

Рис. 3: Распределение покрытия по поверхности катода, размерность по оси x – дм, по оси δ – мкм.

интеграл в формуле (13) суммой вида

$$R = \frac{1}{\delta_{\min} L} \sum_{i=c_l}^{c_r} \left(\delta(x_i) - \delta_{\min}\right) h_x =$$

$$= \frac{1}{\delta_{\min}(c_r - c_l) h_x} \sum_{i=c_l}^{c_r} \left(\delta(x_i) - \delta_{\min}\right) h_x = \frac{\displaystyle\sum_{i=c_l}^{c_r} \left(\delta(x_i) - \delta_{\min}\right)}{\delta_{\min}(c_r - c_l)}.$$

Для рис. 3 значение R составило 0,024 или 2,4%, что считается удовлетворительным.

Заметим, что для проведения вычислений время $\Delta t = \Delta t_{\text{calc}}$ было выбрано условно, чтобы проверить адекватность модели и вычислить значение показателя R. На практике требуется подобрать такое время нанесения покрытия $\Delta t = \Delta t_{\text{proc}}$, чтобы обеспечить заданное среднее значение δ_{set} толщины получаемого покрытия. Получим расчётную формулу для этого времени.

Среднее значение функции

$$\overline{\delta} = \frac{1}{L}\int_{x_{cl}}^{x_{cr}} \delta(x)dx \approx \frac{1}{(c_r - c_l)h_x}\sum_{i=c_l}^{c_r} \delta(x_i)h_x = \frac{\sum\limits_{i=c_l}^{c_r}\delta(x_i)}{c_r - c_l}.$$

По полученным значениям $\delta(x_i)$ определяем среднее значение $\overline{\delta}$ толщины рассчитываемого покрытия. Далее отметим, что

$$\overline{\delta} = \overline{\theta}\cdot\Delta t_{\text{calc}},$$
$$\delta_{\text{set}} = \overline{\theta}\cdot\Delta t_{\text{proc}},$$

где $\overline{\theta}$ – среднее значение функции $\theta(x)$ на отрезке $[x_{cl}; x_{cr}]$, откуда

$$\Delta t_{\text{proc}} = \frac{\delta_{\text{set}}}{\overline{\delta}}\Delta t_{\text{calc}}.$$

6 Заключение

Полученные результаты показывают эффективность применяемого численного метода – квадратичная скорость сходимости метода Ньютона на сетках с большим количеством узлов даёт выигрыш во времени примерно в 10 раз по сравнению с одним из наилучших численных методов для такого вида задач – итерационного метода, описанного в работах [1,2]. При этом был использован численный метод Ньютона с реализацией в математическом пакете Maxima для решения системы нелинейных алгебраических уравнений, получаемых как разностный аналог задачи распределения потенциала в гальванической ванне. Данная задача включает в себя уравнение Лапласа и нелинейные краевые условия III-его рода на аноде и катоде.

Разработанные модель и эффективный метод решения её уравнений могут быть использованы для решения задачи оптимизации – минимизации критерия (13) неравномерности покрытия.

Список литературы

[1] *Дутов А. В., Литовка Ю. В., Нестеров В. А., Соловьев Д. С., Соловьева И. А., Сыпало К. И.* Поиск оптимального управления токовыми

режимами в гальванических процессах со многими анодами при разнообразии номенклатуры обрабатываемых изделий // Известия Российской академии наук. Теория и системы управления, 2019, №1. С. 78–88.

[2] *Литовка Ю. В.*, *Михеев В. В.* Численный расчет электрического поля в гальванической ванне с биполярными электродами // Теоретические основы химической технологии, 2006, том 40, №3. С. 328–334.

[3] *Демидович Б. П.*, *Марон И. А.* Основы вычислительной математики. – СПб.: Лань, 2006. – 672 с.

[4] *Pchelintseva I. Yu.*, *Pchelintsev A. N.*, *Litovka Yu. V.* Modeling of metal distribution when coating flat metal plates in electroplating baths // International Journal of Numerical Modelling: Electronic Networks, Devices and Fields, 2021, vol. 34, iss. 2, e2830, 10 pp.

[5] *Кудрявцев Н. Т.* Электролитические покрытия металлами. – М.: Химия, 1979. – 352 с.

[6] *Жук Н. П.* Курс теории коррозии и защиты металлов. – М.: Альянс, 2014. – 472 с.

[7] *Толмачев А. В.*, *Коновалов А. В.*, *Партин А. С.* Эффективность алгоритма LU-разложения с двухмерным циклическим распределением матрицы для параллельного решения упругопластической задачи // Программные продукты и системы, 2013, №3. С. 94–99.

[8] Maxima computer algebra system, `http://maxima.sourceforge.net/ru/`

[9] *Пчелинцева И. Ю.*, *Пчелинцев А. Н.*, *Литовка Ю. В.* Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2020614929. Численное решение уравнения Лапласа для расчёта распределения электрического потенциала в гальванической ванне на базе математического пакета Maxima. – 29.04.2020 г.

Mathematical model and numerical scheme for calculation of electric fields in galvanic baths with non-conductive screen

I. Yu. Pchelintseva, Yu. V. Litovka
Tambov State Technical University,
e-mail: irina_yu_10@mail.ru, polychem@list.ru

Abstract. A mathematical model of the electric field in a electroplating bath with a flat anode and cathode, which has an infinitely thin flat insulator wall with transverse slots, is considered. Such a non-conductive screen is necessary for a more uniform coverage of the cathode detail. In this article, a transition is made to the difference analogue of the problem. A numerical method based on Newton's method for solving nonlinear algebraic equations is described, a computational experiment for 4 slits is carried out. The obtained results show the effectiveness of the applied numerical method.

Keywords: Laplace's equation, Newton's method, non-uniformity criterion, coating thickness.