

# 用单纯形优化法研究铝箔腐蚀工艺

胡涛\* 王守绪 杨邦朝

(电子科技大学信息材料工程学院 成都 610054)

**【摘要】** 采用单纯形优化法研究了高纯电子铝箔腐蚀的工艺条件,通过较少的实验次数获得了最佳腐蚀条件。结果表明,单纯形优化法特别适宜于多因素条件的优化,其简单、快捷、准确,具有较好的推广价值。

**关键词** 优化; 单纯形优化法; 铝箔; 腐蚀

**中图分类号** TG178

电子铝箔的腐蚀工艺是提高铝电解电容器电容量,缩小产品体积,提高产品质量的关键工艺,腐蚀工艺的研究有利于优质小体积铝电解电容器的国产化,具有很大的经济效益和社会效益。但铝箔的腐蚀工艺受诸多因素的影响,如腐蚀液各组份的浓度、腐蚀液的酸度、腐蚀温度、添加剂的种类及含量、腐蚀时间、腐蚀的电流密度、电源的频率与波形、交直流电等,这些因素相互制约,协同作用,极大地增加了腐蚀工艺研究的难度。为了提高实验效率,我们采用了单纯形优化法进行实验。

单纯形优化法是近年来在优化试验设计中逐渐被广泛应用的一种优化设计方法。与正交设计法、旋转设计法及均匀表设计法相比,它具有计算简便、不受所取因素数限制的特点,因素数的增加并不会导致实验次数的大量增加,并且只需较少的实验次数就可以得到最优化条件。它的调优过程是根据实验过程中的响应情况逐步调优的,属于非线性的动态调优过程,因此很适合于多因素实验条件的优化<sup>[1]</sup>。

## 1 基本原理

单纯形法最早由 Spendley 在 1962 年提出,称为简单单纯形法或基本单纯形法,之后逐步修改发展为改进单纯形法、加权形心法、控制加权形心法<sup>[2]</sup>。本文采用的是基本单纯形法和改进单纯形法。单纯形是指多维空间的凸多边形,其顶点数比空间维数多 1。例如,二维空间的单纯形是一个三角形,三维空间的单纯形是一个四面体, $n$  维空间的单纯形是一个  $(n+1)$  个顶点的凸多边形,这里空间维数就是我们所考虑的影响因素的数目。

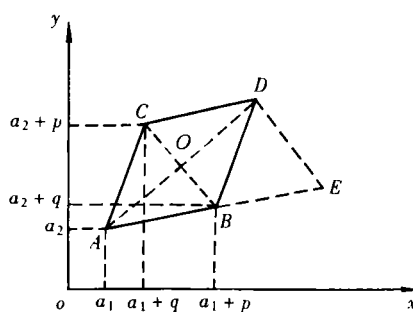


图1 两因素基本单纯形

假设在试验设计中有两个影响因素,也就是因素数为 2,分别取其值  $a_1$  和  $a_2$  作为它们试验的初点,记为  $A(a_1, a_2)$ 。对两因素的单纯形应为三角形,因此还有两点  $B$ 、 $C$ ,设三角形的边长为  $a$ (又称为

步长),  $B$ 、 $C$  两点的取值可计算出来, 如图 1 所示。

$$|AB| = |AC| = |BC| = a$$

若  $B$  点为

$$B = (a_1 + p, a_2 + q)$$

$$C = (a_1 + q, a_2 + p)$$

$$|AB| = a = \sqrt{(a_1 + p - a_1)^2 + (a_2 + q - a_2)^2} = \sqrt{p^2 + q^2}$$

$$|BC| = a = \sqrt{(a_1 + q - a_1 - p)^2 + (a_2 + p - a_2 - q)^2} = \sqrt{2(p - q)^2}$$

解以上两式, 可得

$$\begin{cases} p = \frac{\sqrt{3} + 1}{2\sqrt{2}} a \\ q = \frac{\sqrt{3} - 1}{2\sqrt{2}} a \end{cases}$$

$A$ 、 $B$ 、 $C$  三点构成的单纯形称为初始单纯形。试验时, 首先在相应的初始单纯形条件下做试验, 得到三个响应值, 比较三者的大小, 找出最差响应值的点, 将其称为坏点。如果  $A$  点为坏点, 则将  $A$  点去掉, 选  $A$  点的对称点  $D$  点为新试验点, 新试验点是  $A$  点过  $O$  点 ( $BC$  中点) 的对称反射, 简称反射点。

$$D = B + C - A = (a_1 + p + q, a_2 + p + q)$$

$D$  点与  $B$ 、 $C$  两点构成新的单纯形。在  $D$  点的条件下进行试验得到  $D$  的响应值, 这时比较  $D$ 、 $B$ 、 $C$  响应值的大小, 确定坏点。若此时  $C$  点的响应值最差, 去掉  $C$  点, 取其反射点  $E$ 。

$$E = B + D - C = (a_1 + 2p, a_2 + 2q)$$

$E$  点再与  $B$ 、 $D$  构成新的单纯形。这样重复进行, 不断找出坏点, 去掉坏点, 求出坏点的反射点代替坏点继续试验, 最终达到优化的目的。

对于多因素  $n$ , 其单纯形为  $(n + 1)$  个顶点构成的  $n$  维空间上的凸多边形。设有一点  $A = (a_1, a_2, a_3, \dots, a_n)$ , 步长为  $a$ , 与二维空间相似进行计算

$$B = (a_1 + p, a_2 + q, a_3 + q, \dots, a_n + q)$$

$$C = (a_1 + q, a_2 + p, a_3 + q, \dots, a_n + q)$$

⋮  
⋮

$$n = (a_1 + q, a_2 + q, a_3 + q, \dots, a_{n-1} + p, a_n + q)$$

$$(n + 1) = (a_1 + q, a_2 + q, a_3 + q, \dots, a_n + p)$$

$$\begin{cases} p = \frac{\sqrt{n+1} + n - 1}{\sqrt{2n}} a \\ q = \frac{\sqrt{n+1} - 1}{\sqrt{2n}} a \end{cases}$$

由  $A, B, C, \dots, n, (n + 1)$ , 共  $(n + 1)$  个顶点构成了初始单纯形, 在各点对应条件下进行试验, 得出相应的响应值, 比较响应值的大小, 找出坏点。去掉坏点并求出坏点的反射点, 以反射点为新点, 继续进行试验。其中新点的计算为

$$[\text{新坐标点}] = 2 \times [n \text{ 个留下点的坐标和}] / n - [\text{去掉点坐标}]$$

改进单纯形法与基本单纯形法的原理相同,只是对步长进行调整。改进单纯形法新点的计算公式为

$$[\text{新坐标点}] = (1 + a) \times [n \text{ 个留下点的坐标和}] / n - a \times [\text{去掉点坐标}]$$

当  $a = 1$  时,即为单纯形法计算公式; $a > 1$  称为扩大,是沿最好点方向加大步长; $0 < a < 1$  称为收缩,是沿最差点方向缩小步长,以满足优化的精度。

单纯形法中初始点的计算比较麻烦,特别是多因素且步长各不相同,因此实际应用中常采用 Long 系数表法和均匀设计表法选取初始点,而均匀设计表构成的初始单纯形各顶点在空间均匀分布,在此基础上的优化是整体的均匀优化,因此被广泛采用。

## 2. 实验与分析

我们采用基本单纯形法及改进单纯形法对铝箔腐蚀工艺中腐蚀液的配方进行了优化,选定了五个影响较大的因素:HCl 的浓度、 $\text{H}_3\text{PO}_4$  的浓度、 $\text{HNO}_3$  的浓度、 $\text{AlCl}_3$  的浓度、 $\text{Cu}^{2+}$  的浓度,恒定腐蚀温度、腐蚀时间、腐蚀电流密度进行实验。采用均匀设计表法构成初始单纯形的 6 个顶点,如表 1 所示。实验的初始条件、因素、步长及初点的确定如表 2 所示。实验的优化过程如表 3 所示,响应值为按日本 JCC 腐蚀箔容量测试方法,50 V 赋能测试所得的容量值。

利用表 1 建立初始单纯形,五个因素应有 6 个顶点,在这 6 点的条件下做实验得到 6 个容量  $C$  值。比较  $C$  值可知 1 点的  $C = 5.51$  最小,故去掉 1 点,以 1 点的反射点为 7 点,7 点的坐标按照新点计算式计算。在 7 点条件下做实验测得  $C$  值后比较 2、3、4、5、6、7 六点,3 点的  $C = 5.87$  最低,因此去掉 3 点,以 3 点的反射点为 8 点,测出 8 点条件下的  $C$  值与 2、4、5、6、7 比较,则 2 点的  $C = 6.97$  最小,去掉 2 点,以 2 点的反射点 9 点为新点,测得 9 点条件  $F$  的容量  $C$  值。这时比较 4、5、6、7、8、9 六点的  $C$  值,7 点的  $C = 9.14$ ,结果最好,故进行扩大,取  $a = 1.5$ ,计算出新点 10 点,测得 10 点条件下容量为 7.67,不是最大,也不是最小,扩大失败。再选 9 点 ( $C = 7.04$ ) 最差点进行缩小,取  $a = 0.5$ ,缩小后的 11 点  $C = 10.35$  为最大值。进一步取  $a = 0.2$  缩小得 12 点,12 点的  $C = 9.57$  未超过 11 点,再取  $a = 0.4$  缩小,得到 13 点,测 13 点的  $C = 10.5$ ,为最大值。这样 13 点的条件即为最优条件。

表 1 五因素均匀设计表

试验号	1	2	3	4	5
1	1	2	3	4	6
2	2	4	6	1	5
3	3	6	2	5	4
4	4	1	5	2	3
5	5	3	1	6	2
6	6	5	4	3	1

表2 初始条件

因素	HCl/N	AlCl <sub>3</sub> /(%)	H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> /(%)	HNO <sub>3</sub> /(%)	Cu <sup>2+</sup> /(%)
初点	1.4	0.8	0.8	0	0
步长	0.1	0.2	0.1	0.1	0.4

表3 优化过程表

单纯形顶点	HCl /N	AlCl <sub>3</sub> /(%)	H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> /(%)	HNO <sub>3</sub> /(%)	Cu <sup>2+</sup> / (% × 10 <sup>-3</sup> )	容量平均值 C/μF·cm <sup>-2</sup>	注
1	1.40	1.00	1.00	0.30	2.00	5.51	
2	1.50	1.40	1.30	0	1.60	6.97	
3	1.60	1.80	0.90	0.40	1.20	5.87	
4	1.70	0.80	1.20	0.10	0.80	7.14	
5	1.80	1.20	0.80	0.50	0.40	8.20	
6	1.90	1.60	1.10	0.20	0	8.99	
7	2.00	1.72	1.12	0.18	0	9.14	1点反射
8	1.96	0.89	1.31	0	0	8.57	3点反射
9	2.24	1.08	0.91	0.39	0	7.04	2点反射
10	2.15	1.90	1.15	0.15	0	7.67	7点扩大, a = 1.5
11	2.06	1.16	1.01	0.29	0	10.35	9点缩小, a = 0.5
12	1.95	1.09	1.07	0.24	0	9.57	9点缩小, a = 0.2
13	2.02	1.18	1.03	0.27	0	10.50	9点缩小, a = 0.4

### 3 结 论

实验表明,采用单纯形优化法对电子铝箔腐蚀液配方进行优化是切实可行的,它的确具有快速、简单、可靠、准确的特点,特别对多因素条件的优化很有意义。单纯形法找到的最佳条件不是某个孤立的点,而是一个最佳操作条件范围。单纯形法的数学公式可用计算机进行计算和控制,将会达到全自动寻找最佳条件。

### 参 考 文 献

- 1 邓正龙.化工中的优化方法.北京:化学工业出版社,1992
- 2 何为,陈际达.优化试验设计法及其在化学中的应用.成都:电子科技大学出版社,1994

## Study of Corrosion Condition of Al Foil Optimized by Simplex Method

Hu Tao Wang Shouxu Yang Bangchao

(Inst. of Information Materials Eng., UEST of China Chengdu 610054)

**Abstract** The corrosion condition of pure Aluminum foil is optimized by simplex method. The optimum condition of corrosion is obtained by several experiments. The simplex method is simple, rapid and accurate, especially suits for optimization of multiple factor conditions.

**Key words** optimize; simplex method; Aluminum foil; corrosion condition

编辑 徐培红