

16. Bini D., Latouche G., Meini B. *Numerical Methods for Structured Markov Chains*. Oxford University Press; New York, 2005. 215 p.
17. Candela L., Castelli D., Pagano. *History, Evolution and Impact of Digital Libraries. E-Publishing and Digital Libraries: Legal and Organizational Issues*. IGI Global, 2011, pp. 1–30.
18. Ethier S. N., Kurtz T. G. *Markov processes. Wiley Series in Probability and Mathematical Statistics: Probability and Mathematical Statistics*. New York, John Wiley & Sons Inc., 1986, pp. 214–234.
19. Isah A., Serema B. C., Mutshewa A., Kenosi L. Digital Libraries: Analysis of Delos Reference Model and 5S Theory. *Journal of Information Science Theory and Practice*, 2013, no. 1 (4), pp. 38–47.
20. Kokoykina O. N. The development of the information society and issues of digital preservation. Formation of regional cultural policy in the context of the modernization of education. *International scientific-practical conf*, Orel, 2014, pp. 53–56.
21. Kotenko I. V., Parashchuk I. B. Analysis of the Sensitivity of Algorithms for Assessing the Harmful Information Indicators in the Interests of Cyber-Physical Security. *Cyber-Physical Systems*, 2019, no. 8 (3), pp. 1–15.
22. Lanagan J., Smeaton A. F. Video digital libraries: contributive and decentralized. *International Journal on Digital Libraries*, 2012, no. 12 (4), pp. 159–178.
23. Papy F. *Digital Libraries*. 1st ed. Amsterdam, Netherlands, 2016. 152 p.
24. Pomerantz J., Marchionini G. The digital library as place. *Journal of Documentation*, 2007, no. 63 (4), pp. 505–533.
25. Reilly B. F. Jr. Rethinking the National Library. *American Libraries*, 2016, vol. 47, iss. 11–12. 30 p.
26. Russian Association of Digital Libraries 2020. Available at: <http://www.aselibrary.ru/index.html> (accessed 17.01.2020).
27. Trivedi M. Digital Libraries: Functionality, Usability, and Accessibility. *Library Philosophy and Practice (e-journal)*, 2010, p. 381. Available at: <http://digitalcommons.unl.edu/libphilprac/381> (accessed 17.01.2020).
28. Van Le C. Opening the Doors to Digital Libraries: A Proposal to Exempt Digital Libraries From the Copyright Act. *Case Western Reserve Journal of Law, Technology & The Internet*, 2010, no. 1–2, p. 135.
29. Witten I. H., Bainbridge D., Nichols D. M. *How to Build a Digital Library*. 2nd ed. Waltham, US, 2009. 656 p.
30. Yin G. G., Zhang Q. *Continuous-Time Markov Chains and Applications: A Singular Perturbation Approach*. Springer, 2012. 351 p.

DOI 10.21672/2074-1707.2020.49.4.131-143

УДК 519.6, 004.021

ПРИМЕНЕНИЕ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ГАЛЬВАНИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ НЕРАВНОМЕРНОСТИ ТОЛЩИНЫ ПОКРЫТИЯ

Статья получена редакцией 20.02.2020, в окончательном варианте – 04.03.2020.

Соловьев Денис Сергеевич, Тамбовский государственный университет имени Г.Р. Державина, 392036, Российская Федерация, г. Тамбов, ул. Интернациональная, 33, кандидат технических наук, e-mail: solovjevdenis@mail.ru

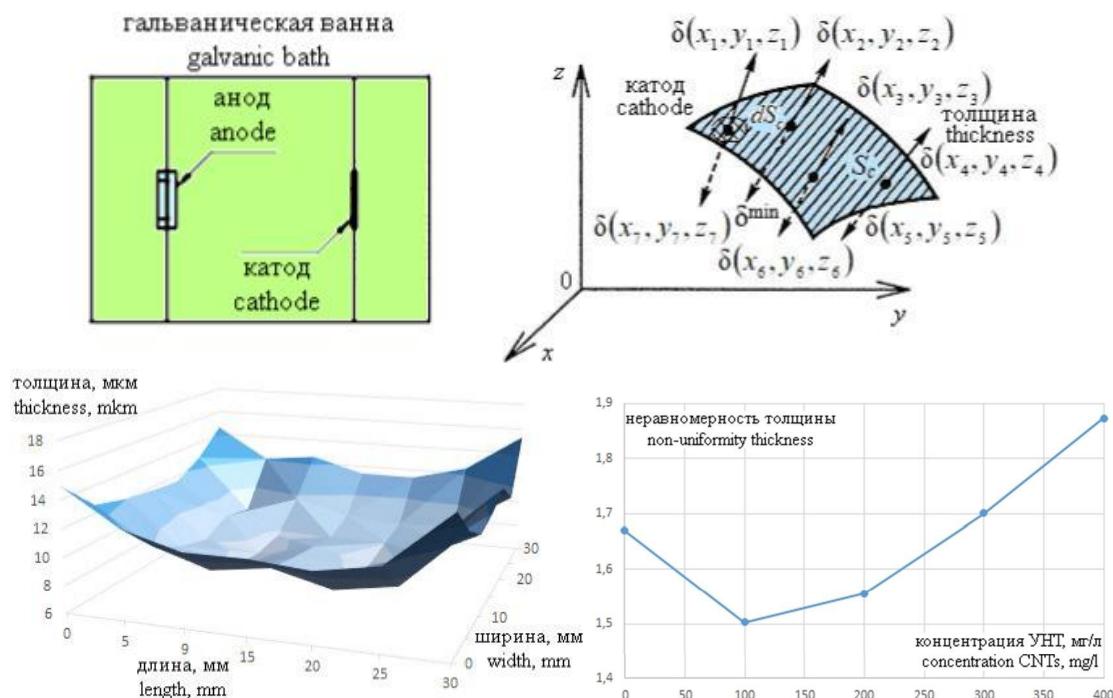
Соловьева Инна Александровна, Тамбовский государственный технический университет, 392000, Российская Федерация, г. Тамбов, ул. Советская, 106, аспирант, e-mail: good.win32@yandex.ru

Литовка Юрий Владимирович, Тамбовский государственный технический университет, Российская Федерация, 392000, г. Тамбов, ул. Советская, 106, доктор технических наук, профессор, e-mail: polychem@list.ru

В работе рассматривается применение углеродных нанотрубок для улучшения равномерности гальванических покрытий. Сформулирована задача поиска концентрации углеродных нанотрубок в электролите для улучшения равномерности толщины покрытия. Разработана математическая модель гальванического процесса, которая учитывает концентрацию углеродных нанотрубок в электролите. Для решения прямой задачи оптимизации (поиска оптимальной концентрации углеродных нанотрубок в электролите) поставлена обратная задача поиска функции катодной поляризации при добавлении в электролит углеродных нанотрубок. Увеличение скорости решения обратной задачи может быть достигнуто с применением технологии распаралеливания вычислений. Составлен алгоритм решения для прямой и обратной задач оптимизации. Для хранения требуемой информации разработаны базы данных. Проведена серия компьютерных и экспериментальных исследований по гальваническому нанесению цинкового покрытия с добавлением углеродных нанотрубок в электролит. Доказано, что присутствие углеродных нанотрубок в растворе электролита способно положительно влиять на равномерность получаемого покрытия.

Ключевые слова: прямая задача оптимизации, обратная задача оптимизации, математическое моделирование, эксперимент, углеродные нанотрубки, алгоритм, база данных, неравномерность покрытия

Графическая аннотация (Graphical annotation)



INVERSE PROBLEM SOLUTION OF THE MATHEMATICAL MODELING FOR GALVANIC PROCESS TO OPTIMIZE THE NON-UNIFORMITY OF THE COATING THICKNESS

The article was received by the editorial board on 20.02.2020, in the final version – 04.03.2020.

Solovjev Denis S., Tambov State University named after G.R. Derzhavin, 33 Internatsionalnaya St., Tambov, 392036, Russian Federation,

Cand. Sci. (Engineering), e-mail: solovjevdenis@mail.ru

Solovjeva Inna A., Tambov State Technical University, 106 Sovetskaya St., Tambov, 392000, Russian Federation,

post-graduate student, e-mail: good.win32@yandex.ru

Litovka Yuri V., Tambov State Technical University, 106, Sovetskaya St., Tambov, 392000, Russian Federation,

Doct. Sci. (Engineering), Professor, e-mail: polychem@list.ru

The article considers the use of carbon nanotubes to improve the uniformity of galvanic coatings. The problem of searching the concentration of carbon nanotubes in an electrolyte is formulated to improve the uniformity of the coating thickness. The mathematical model of the galvanic process has been developed that takes into account the concentration of carbon nanotubes in the electrolyte. The inverse problem of searching for the cathodic polarization function when carbon nanotubes are added to the electrolyte is posed to solve this (direct) optimization problem. The use of parallelization technology allows to increase the speed of solving the inverse problem. An algorithm for solving the direct and inverse optimization problems is compiled. Databases have been developed to store the required information. A series of computer and experimental studies on the galvanic deposition of a zinc coating using carbon nanotubes in an electrolyte was carried out. It is proved that the presence of carbon nanotubes in an electrolyte solution can have a positive effect on the uniformity of the resulting coating.

Key words: direct optimization problem, inverse optimization problem, mathematical modeling, experiment, carbon nanotubes, algorithm, database, coating non-uniformity

Введение. Исключительные свойства углеродных нанотрубок (УНТ), такие как жесткость, низкая плотность, высокая механическая прочность, электро- и теплопроводность, привлекли исследователей для использования их в различных структурах [1–11]. Не избежали модификации в виде использования УНТ и гальванические покрытия, применяемые для защиты деталей от коррозионного поражения и повышения их срока службы, придания декоративного вида и

улучшения показателей качественных характеристик. Среди них важное место занимает равномерность толщины покрытия. Обоснованием применения в составах электролитов наноматериалов являются результаты экспериментов по нанесению модифицированных УНТ гальванических покрытий с улучшенными показателями по сравнению с традиционными технологическими процессами их получения [12, 13]. Для отыскания оптимальной концентрации УНТ в электролите, обеспечивающей высокую равномерность покрытия, необходимо проводить многочисленные эксперименты, что связано со значительными материальными и временными затратами. Поэтому моделирование и оптимизация процессов нанесения модифицированных УНТ гальванических покрытий являются важными не только с технологических позиций и экономической точки зрения, но также и для уменьшения времени работы персонала в условиях воздействия агрессивных сред при проведении натурных экспериментов.

Целью данной работы является оптимизация равномерности модифицированных УНТ покрытий на основе математического моделирования гальванического процесса.

Постановка прямой и обратной задачи оптимизации. Для достижения поставленной цели сформулируем сначала задачу оптимизации. Определить степень неравномерности толщины покрытия можно согласно [14]:

$$R = \frac{1}{S_c} \int_{S_c} \frac{\delta(x, y, z) - \delta^{\min}}{\delta^{\min}} dS_c, \quad (1)$$

где δ – толщина покрытия в точке с координатами (x, y, z) на поверхности катода S_c ; δ^{\min} – минимальная толщина покрытия.

На рисунке 1 приведена графическая иллюстрация расчета неравномерности толщины покрытия по формуле (1) согласно принятым обозначениям.

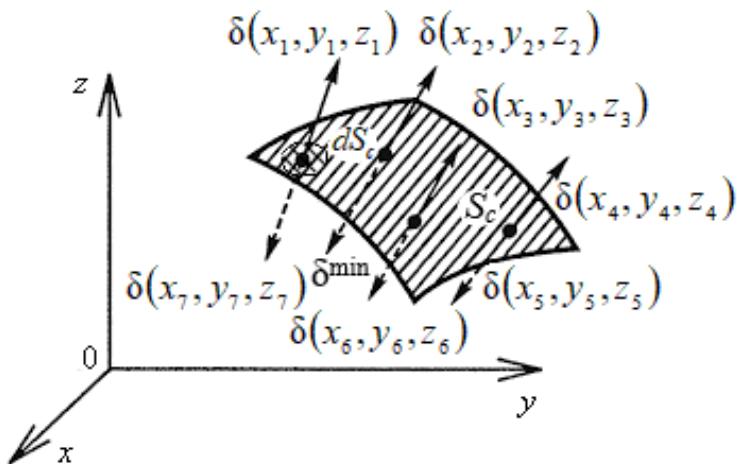


Рисунок 1 – Графическая иллюстрация расчета неравномерности толщины покрытия

Система уравнений математической модели гальванического процесса содержит уравнения Фарадея, Ома и Лапласа и имеет следующий вид:

$$\begin{cases} \delta(x, y, z) = \frac{k\eta(t)\Gamma}{\rho} i_c(x, y, z) \\ i_a(x, y, z) = \chi \nabla \phi(x, y, z) | S_a \\ i_c(x, y, z) = -\chi \nabla \phi(x, y, z) | S_c \\ \Delta \phi(x, y, z) = 0 \\ \phi(x, y, z) + F_1(i_a) | S_a = U \\ \phi(x, y, z) + F_2(i_c, C_{VHT}) | S_c = 0 \\ \frac{\partial \phi(x, y, z)}{\partial \vec{n}} | S_{ins} = 0 \end{cases}, \quad (2)$$

где T – время; t – температура электролита; k – электрохимический эквивалент; η – выход металла по току; ρ – плотность металла покрытия; χ – электропроводность электролита; i_a, i_c – плотность тока на аноде и катоде; S_a, S_{ins} – площади поверхности анода и изолятора; \vec{n} – нормаль к S_{ins} ; φ – электрический потенциал поля; U – напряжение; $C_{УНТ}$ – концентрация УНТ в электролите; F_1, F_2 – функции анодной и катодной поляризации; L_x, L_y, L_z – длина, ширина и высота гальванической ванны.

На рисунке 2 показана схема расчета уравнений математической модели (2).

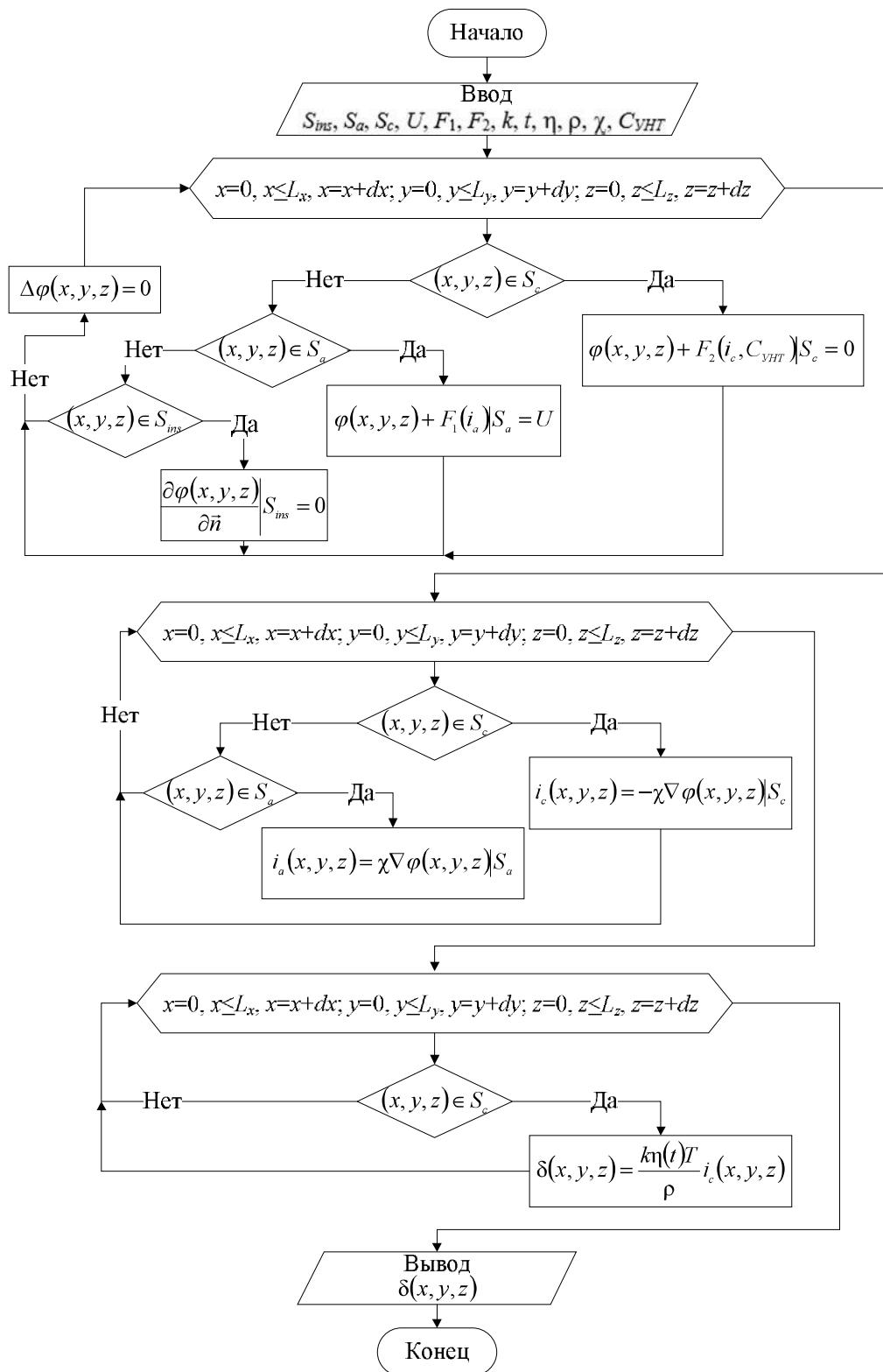


Рисунок 2 – Схема организации расчета по уравнениям математической модели

Отыскать значение концентрации $C_{\text{УНТ}}^*$, для которой коэффициент R в (1) минимален:

$$R \rightarrow \min, \quad (3)$$

при уравнениях связи (2) и следующих ограничениях:

$$\begin{cases} 0 \leq C_{\text{УНТ}} \leq C_{\text{УНТ}}^{\max}, \\ \delta^{\min} \geq \delta^{\text{зад}}, \end{cases} \quad (4)$$

где $\max, \min, \text{зад}$ – максимальное, минимальное и заданное значение.

Решение поставленной (прямой) задачи (3) может быть найдено с использованием методов нелинейного программирования [15]. Однако из-за того в присутствии УНТ в электролите функция F_2 изменяется, а известная аппроксимирующая зависимость для нее отсутствует. Поэтому сначала необходимо решить обратную задачу. Ее решение осложняется наличием в математической модели (2) уравнения в частных производных. Для отыскания аппроксимирующей зависимости воспользуемся методом Ритца [16] и представим функцию F_2 следующим образом:

$$F_2(i_c, C_{\text{УНТ}}) = F_2(i_c) + \sum_{j=0}^{N-1} a_j C_{\text{УНТ}}^j + a_N F_2(i_c) C_{\text{УНТ}}, \quad (5)$$

где $\vec{a} = (a_0, \dots, a_N)$ – неизвестные коэффициенты; $F_2(i_c)$ – функция поляризации без добавления УНТ.

Тогда обратную задачу можно сформулировать следующим образом.

Необходимо отыскать такие значения $\vec{a}^* = (a_0^*, \dots, a_N^*)$ в (5), для которых отклонение локальных значений толщины покрытия в выбранных точках поверхности для эксперимента и результатов моделирования являются минимальными:

$$\Lambda = \frac{1}{HS_c} \sum_{h=1}^H \int \frac{|\delta_h^{\text{o}}(x, y, z) - \delta_h^{\text{p}}(x, y, z)|}{\delta_h^{\text{o}}(x, y, z)} dS_c \rightarrow \min, \quad (6)$$

где H – количество экспериментов; индексы o, p – соответственно экспериментальное и расчетное значения.

Для увеличения быстродействия нахождения решения задачи (6) возможно применение распараллеливания вычислений при определении критерия Λ ввиду независимости вычисления слагаемых H в нем. Пусть количество параллельных потоков вычислений G совпадает с количеством ядер процессора. Тогда разобьем диапазон $[1; H]$ на G равных частей, в каждой из которых вычисляется значение критерия Λ_g :

$$\Lambda_g = \frac{1}{S_c} \sum_{h=\frac{H}{G}(g-1)+1}^{\frac{H}{G}g} \int \frac{|\delta_h^{\text{o}}(x, y, z) - \delta_h^{\text{p}}(x, y, z)|}{\delta_h^{\text{o}}(x, y, z)} dS_c, \quad (7)$$

оформленное в отдельный поток. По завершении вычислений во всех G потоках определяется величина критерия Λ :

$$\Lambda = \sum_{g=1}^G \Lambda_g. \quad (8)$$

На рисунке 3 показана блок-схема основных шагов алгоритма решения прямой и обратной задач.

Поиск решения задачи оптимизации (6) предполагает значительный объем вычислений. Однако это не является недостатком, поскольку определение функции F_2 , согласно (5), на основе экспериментальных данных осуществляется однократно с последующим использованием в математической модели (2) для получения решения прямой задачи (3).

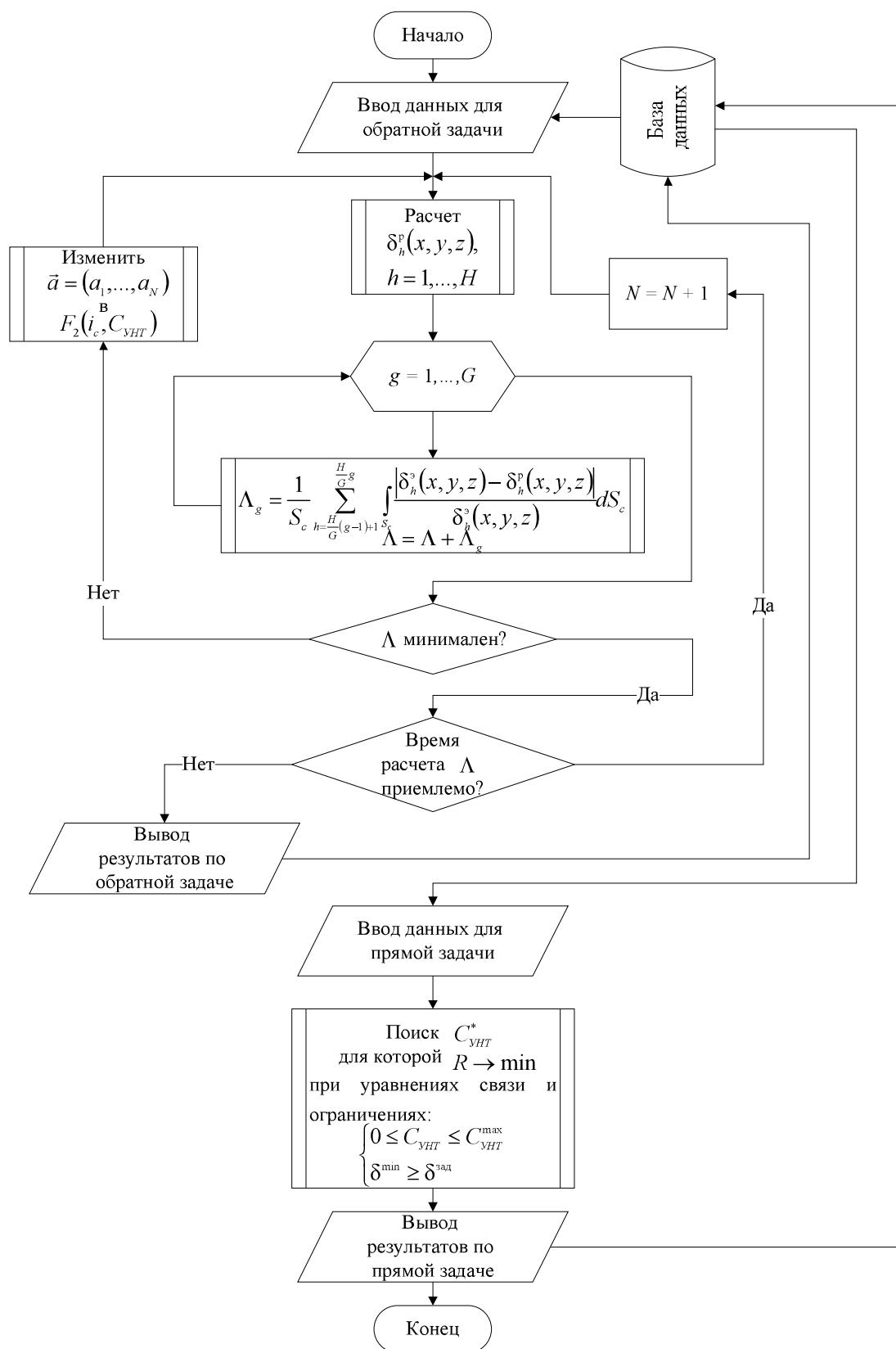


Рисунок 3 – Блок-схема алгоритма решения прямой и обратной задач

Даталогическая модель базы данных. Для реализации решения задач оптимизации была выбрана реляционная модель базы данных (БД). Она получила широкое распространение вследствие наиболее простой формы представления данных и является привычной для специалиста, пользующегося различной справочной литературой. В рамках этой модели все данные, необходимые в процессе решения задач, легко представляются в табличной форме. Кроме того, реляционная модель достаточно проста в реализации с помощью современных средств разработки приложений, она проста и в отношении ведения БД. Для хранения значительного объема требуемой информации в результате решения сформулированных прямой и обратной задач необходимы следующие БД [17]: готовых проектов, оборудования, электролитов и экспериментов.

Даталогическая модель базы данных приводится на рисунке 4.

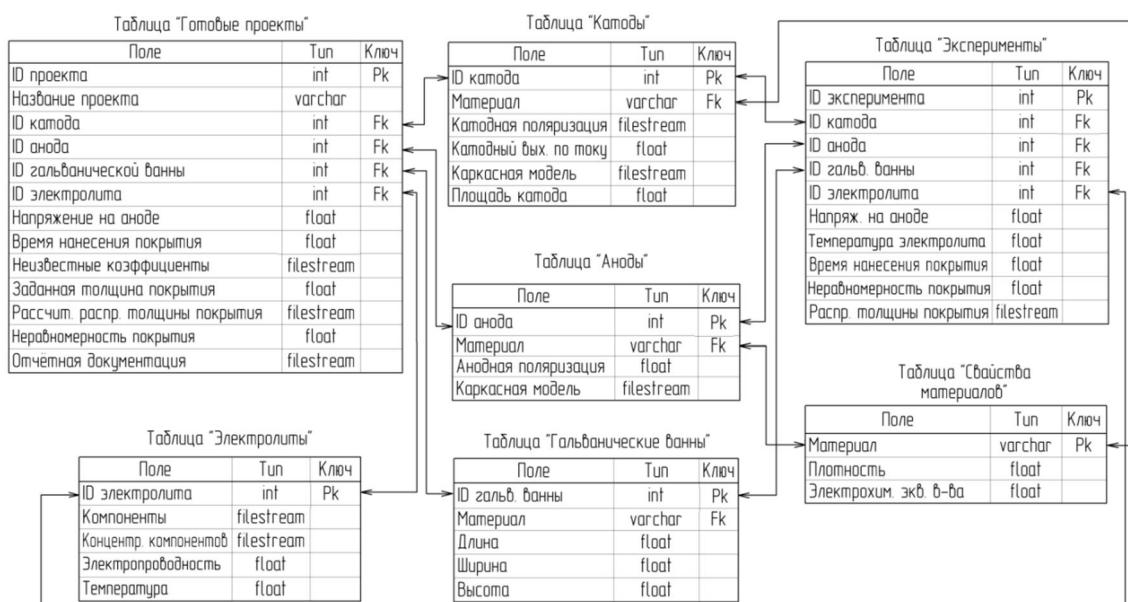


Рисунок 4 – Даталогическая модель базы данных

БД «Готовые проекты» содержит сведения об оптимизированных наномодифицированных гальванопокрытиях с найденной F_2 .

БД «Оборудование» состоит из таблиц «Гальванические ванны», «Катоды», «Аноды» и «Свойства материалов». Таблица «Гальванические ванны» содержит сведения об используемых ваннах: размерах и материалах, из которых они изготовлены. В таблице «Катоды» описаны применяемые катоды – в частности описывается материал катода, каркасная модель катода, катодная поляризация без учета $C_{\text{унт}}$. Таблица «Аноды» содержит сведения об используемых анодах и аналогична по составу таблице «Катоды». В таблице «Свойства материалов» описаны физико-химические характеристики применяемых материалов.

БД «Электролиты» включает одноименную таблицу, содержащую сведения о составе электролита и его физико-химических характеристиках.

В БД «Эксперименты» содержится таблица, поля которой отражают сведения о проводимых экспериментах: используемые ванны, катоды, аноды, электролиты; режимные параметры; распределение покрытия по катоду.

В связи с тем, что было отдано предпочтение реляционной модели данных, в качестве наиболее подходящей системы управления БД была выбрана программа Microsoft SQL Server 2019 15.0. Она имеет широкий спектр функций, а также используется для взаимодействия с БД размером от персональных до крупных, применяемых на предприятиях; является удобной в использовании.

Экспериментальная часть. Для решения сформулированных задач была проведена серия из $H = 20$ экспериментов по нанесению гальванического покрытия при различных концентрациях $C_{\text{унт}}$ из диапазона $[0; 400]$ мг/л на стальные образцы квадратной формы S_c размером $L_1 \times L_2 = 30 \times 30 \text{ мм}^2$ с шероховатостью до $Rz = 10 \text{ мкм}$ и плотностью тока $i_c = 3 \text{ A}/\text{дм}^2$ при времени покрытия $T = 20 \text{ мин}$ для получения $\delta^{\text{зад}} = 6 \text{ мкм}$ [18]. Подготовка поверхности катода включает в себя: очистку; обезжиривание; кислотное протравливание; промывку под проточной водой. В качестве металла покрытия выступал цинк, раствора – электролит для блестящего цинкования, УНТ «Таунит» – одномерные

наномасштабные нитевидные образования поликристаллического графита длиной более 2 мкм с наружными диаметрами от 15 до 40 нм в виде сыпучего порошка черного цвета [19]. Температура электролита $t = 20^{\circ}\text{C}$ при напряжении $U = 1$ В. Размеры ванны, в которой проходил процесс, представлены на рисунке 5 в миллиметрах.

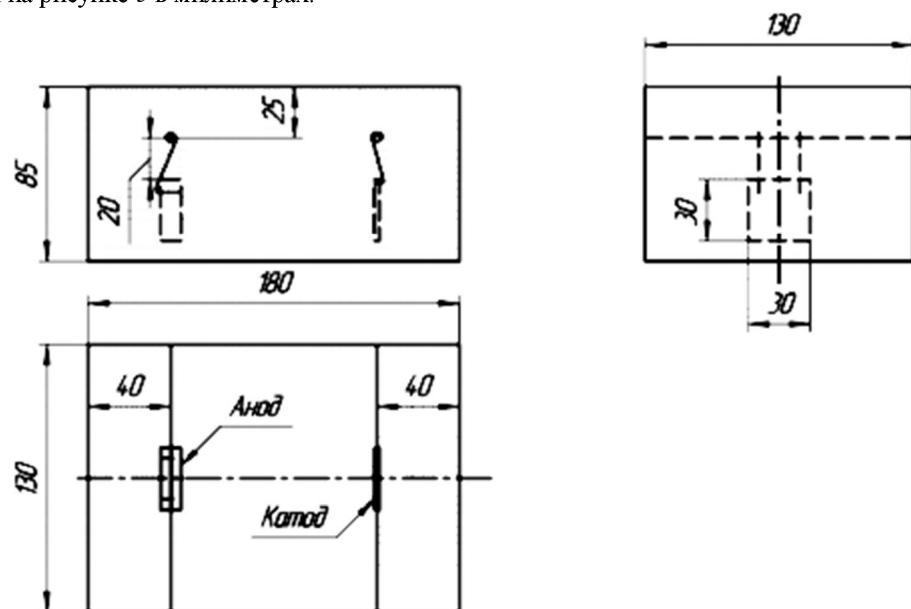


Рисунок 5 – Схема экспериментальной установки

Анод, изготовленный из цинка марки Ц0, при соотношении $S_a:S_c = 2:1$ с помощью двух токо-проводящих крючков, закреплялся на медном проводнике, соединенном через клеммы с источником питания. Стенка катода, не обращенная к аноду, изолировалась. Перед началом нанесения гальванического покрытия в электролит вводился УНТ «Таунит». Дозирование исходного количества УНТ «Таунит» в электролит осуществлялось с использованием дозатора QUANTOS. При введении УНТ в виде порошка, последний подвергался диспергированию с использованием проточного ультразвукового диспергатора ИЛ 100-6/9. Для этого организовывался циркуляционный контур, по которому электролит перекачивался из ванны через проточный диспергатор и возвращался в ванну.

В результате проведенных экспериментов измерялась толщина покрытия $\delta_h(x, y, z)$ согласно [20] с использованием прибора «Константа К5». Данный прибор реализует использование комбинации импульсного индукционного, вихревокового параметрического и фазового цифровых методов получения первичной информации, а также обладает возможностью контроля покрытий на деталях с шероховатостью до $Rz = 400$ мкм на малоразмерных деталях и внутренних поверхностях полых изделий.

Решение прямой задачи оптимизации находилось с использованием метода золотого сечения [21]:

$$\begin{cases} \alpha_{k+1} = C_{\text{УНТ1}}^{(k+1)} \\ \beta_{k+1} = C_{\text{УНТ2}}^{(k+1)} \\ C_{\text{УНТ1}}^{(k+1)} = \alpha_{k+1} + \frac{3-\sqrt{5}}{2}(\beta_{k+1} - \alpha_{k+1}) \\ C_{\text{УНТ2}}^{(k+1)} = \beta_{k+1} - \frac{3-\sqrt{5}}{2}(\beta_{k+1} - \alpha_{k+1}) \end{cases} . \quad (9)$$

Расчет уравнений распределений потенциала электрического поля в объеме электролита и плотности тока на поверхности катода в математической модели процесса осуществлялся с использованием методов конечных разностей и релаксации:

$$\varphi^{n+1}(x_i, y_j, z_k) = \omega \varphi^n(x_i, y_j, z_k) + (1-\omega) \left[\frac{\varphi^n(x_{i-1}, y_j, z_k) + \varphi^n(x_{i+1}, y_j, z_k)}{2h_x^2 \left(\frac{1}{h_x^2} + \frac{1}{h_y^2} + \frac{1}{h_z^2} \right)} + \right. \\ \left. + \frac{\varphi^n(x_i, y_{j-1}, z_k) + \varphi^n(x_i, y_{j+1}, z_k)}{2h_y^2 \left(\frac{1}{h_x^2} + \frac{1}{h_y^2} + \frac{1}{h_z^2} \right)} + \frac{\varphi^n(x_i, y_j, z_{k-1}) + \varphi^n(x_i, y_j, z_{k+1})}{2h_z^2 \left(\frac{1}{h_x^2} + \frac{1}{h_y^2} + \frac{1}{h_z^2} \right)} - \right. \\ \left. - \varphi^n(x_i, y_j, z_k) \right] \quad (10)$$

$$i_c^{m+1}(x_i, y_j, z_k) = \omega i_c^m(x_i, y_j, z_k) + (1-\omega) i_c^{m-1}(x_i, y_j, z_k) \quad (11)$$

где i, j, k – индексы дискретных значений координат (x, y, z); h_x, h_y, h_z – шаги сетки по соответствующим координатам; n, m – индексы итераций по потенциалу и плотности тока; ω – параметр релаксации, определяемый как:

$$\omega = \frac{2}{1 + \sin\left(\frac{\pi}{\max(N_x, N_y, N_z)}\right)}, \quad (12)$$

где N_x, N_y, N_z – количество узлов сетки по координатам (x, y, z).

Решение обратной задачи оптимизации отыскивалось методом Пауэлла [22] с разбиением диапазона $[1; H]$ на $G = 4$ параллельных вычислительных потока с использованием механизма *Open MP* [23] на процессоре *AMD A10-5750M 2,5 GHz* с оперативной памятью 16 ГБ под управлением 64-разрядной операционной системы *Windows 10*.

Результаты и их обсуждение. При прохождении процесса электролиза на поверхности детали осаждается металл и частицы УНТ. Осаждение металла является первой фазой или матрицей, а осаждение УНТ, которые цементируются матрицей, – второй фазой.

Нанотрубки попадают на подложку в связи со следующими факторами. Во-первых, случайное нахождение вблизи покрываемой поверхности в начальный момент времени вследствие распределения УНТ в объеме электролита. Во-вторых, в процессе осаждения покрытия кристаллы металла механически «подводят» нанотрубки к поверхности. Добавление в гальванические электролиты УНТ способствует измельчению кристаллической структуры покрытия. Наночастицы, которые осаждаются вместе с металлом покрытия, выполняют роль дополнительных центров кристаллизации, оказывая влияние на неравномерность гальванического покрытия.

По результатам проведенных экспериментов на рисунке 6 представлена полученная зависимость критерия неравномерности R от $C_{\text{УНТ}}$.

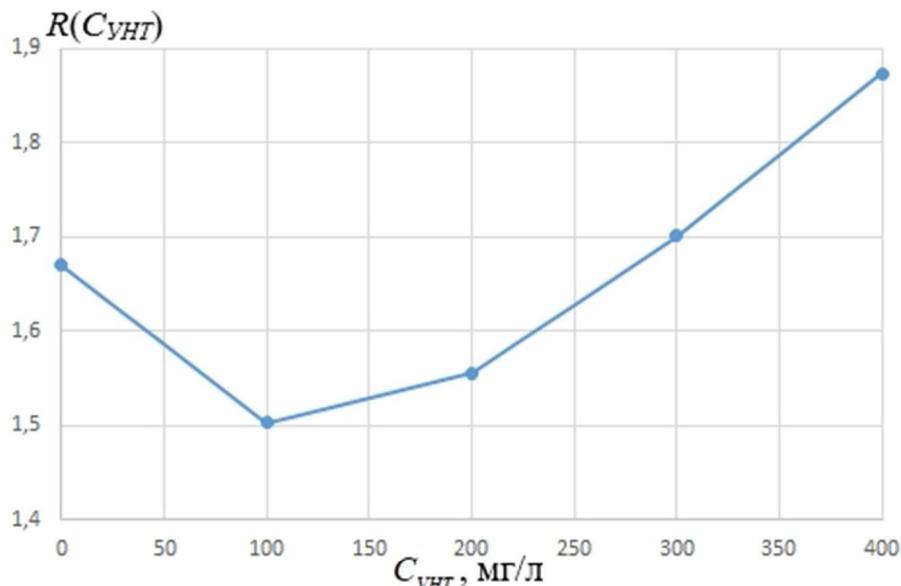


Рис. 6. Зависимость критерия неравномерности R от $C_{\text{УНТ}}$

Результаты определение количества неизвестных аппроксимирующих коэффициентов в (5) при решении обратной задачи (6) продемонстрированы на рисунке 7.

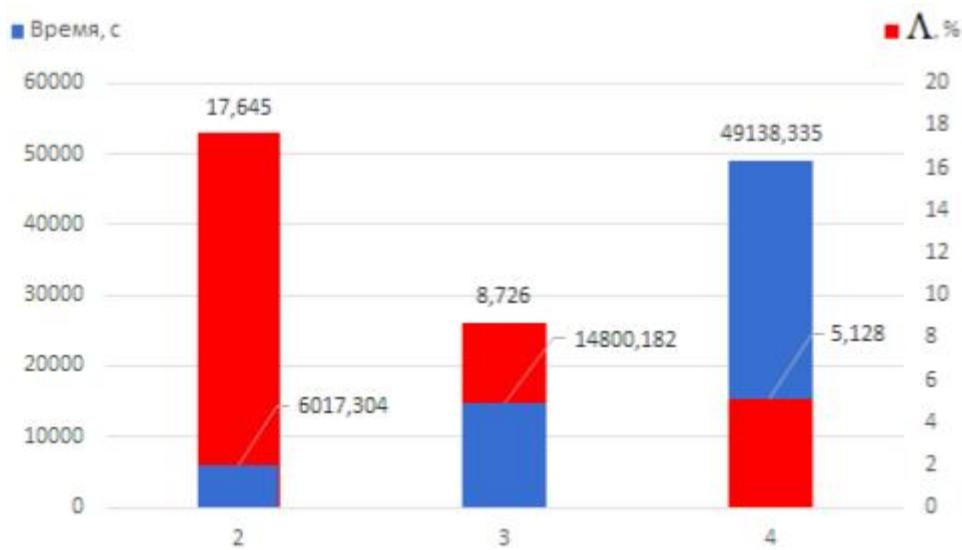


Рисунок 7 – Результаты решения обратной задачи для $N = 2$, $N = 3$ и $N = 4$

При увеличении количества элементов от $N = 2$ до $N = 3$ происходит снижение Λ на 8,91 % с увеличением времени решения задачи в 2,46 раза. При увеличении количества элементов от $N = 3$ до $N = 4$ происходит снижение Λ на 3,59 % с увеличением времени решения задачи в 3,32 раза. Поэтому в качестве количества неизвестных аппроксимирующих коэффициентов в (5) принимаем $N = 3$, которое обеспечивает $\Lambda = 8,73$ % соизмеримое отклонение результатов моделирования от точности измерительного прибора при допустимом времени решения обратной задачи.

На рисунке 8 приводится найденная функция поляризации F_2 (5) при $N = 3$, аналитическая запись которой имеет следующий вид:

$$F_2(i_c, C_{\text{УНТ}}) = F_2(i_c) + 0,9 \cdot 10^{-4} - 0,61 \cdot 10^{-2} C_{\text{УНТ}} + 0,92 \cdot 10^{-5} C_{\text{УНТ}}^2 - 0,43 \cdot 10^{-3} F_2(i_c) C_{\text{УНТ}},$$

где функция поляризации для электролита без добавления УНТ:

$$F_2(i_c) = 0,0087i_c^2 - 0,0873i_c - 0,36.$$

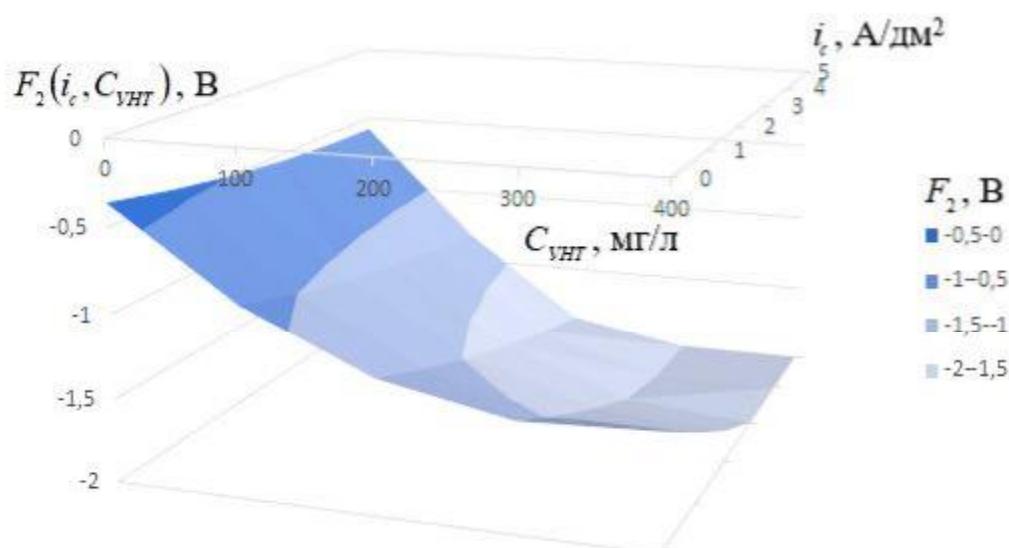


Рисунок 8 – Функция поляризации F_2

С использованием найденной $F_2(i_c, C_{\text{УНТ}})$ была решена прямая задача оптимизации (2)–(4) для рассматриваемой экспериментальной установки. На рисунке 9 демонстрируется толщина покрытия для расчета (а) и эксперимента (б) при найденном значении $C_{\text{УНТ}}^* = 179,5 \text{ мг/л}$.

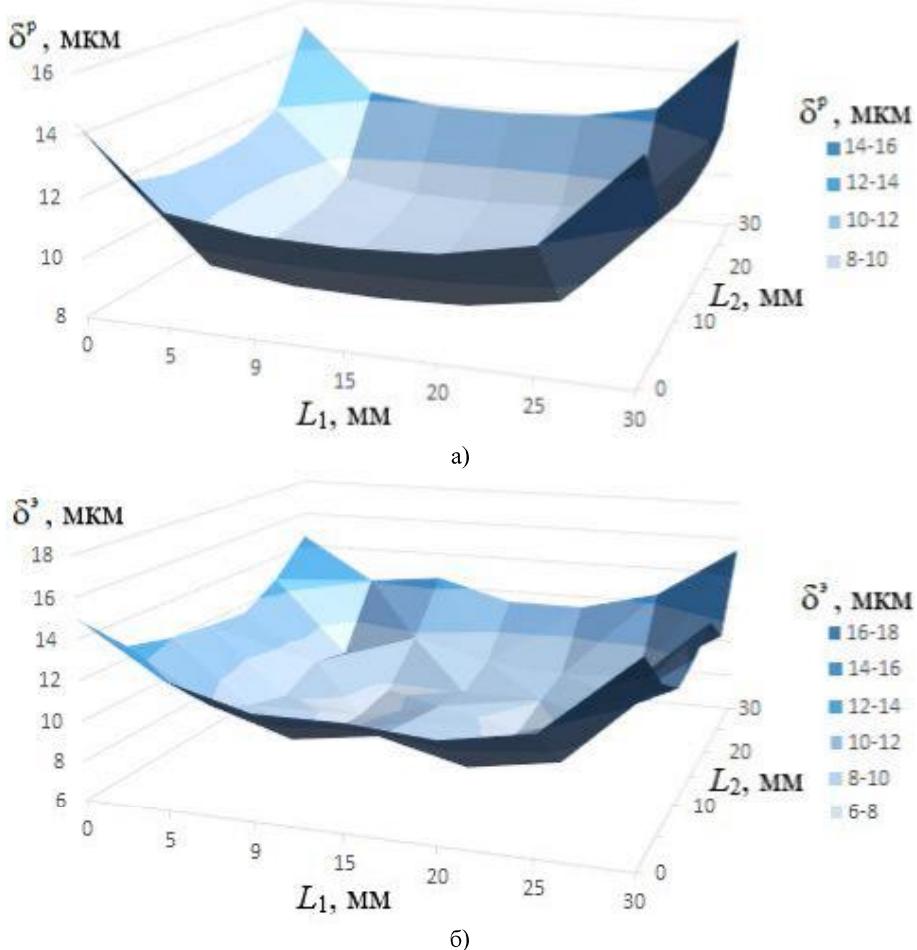


Рисунок 9 – Толщина покрытия для расчета (а) и эксперимента (б)

Расчетное и экспериментальное значение коэффициента R составляют соответственно 1,2726 и 1,3968. Для рассмотренного случая экспериментальное значение коэффициента R при добавлении УНТ снизилось на 16,7 % по сравнению с вариантом без добавления.

Заключение. Присутствие УНТ в растворе электролита способно оказывать положительный эффект на равномерность получаемого гальванического покрытия. Ввиду значительного многообразия металлов гальванических покрытий, составов электролитов и условий протекания процессов экспериментальный поиск оптимальной концентрации УНТ является неприемлемым решением. Применение методов математического моделирования, алгоритмов решения прямых и обратных задач оптимизации, реализованных с использованием современных технологий разработки программного обеспечения и баз данных, является наиболее подходящим способом поиска оптимальной концентрации УНТ для улучшения равномерности покрытия.

Полученные результаты представляют интерес для отдельных исследователей и организаций, занимающихся вопросами нанотехнологий, электрохимии, моделирования и оптимизации технологических процессов.

Библиографический список

1. Запороцкова И. В. Компьютерное моделирование взаимодействия тяжелых органических спиртов с однослойными углеродными нанотрубками / И. В. Запороцкова, Н. П. Поликарпова, Т. А. Ермакова, В. В. Яцышен // Прикаспийский журнал: управление и высокие технологии. – 2012. – № 3 (19). – С. 137–146. ([http://hi-tech.asu.edu.ru/files/3\(19\)/130-137.pdf](http://hi-tech.asu.edu.ru/files/3(19)/130-137.pdf))
2. Бадамшина Э. Р. Моделирование аномальных механических свойств полиуретана модифицированного углеродными однослойными нанотрубками / Э. Р. Бадамшина, Я. И. Эстрин, Г. С. Кулагина, С. А. Лурье, Ю. О. Соляев // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2010. – Т. 16, № 4. – С. 551–562.

3. Браже Р. А. Математическое моделирование спиральных супракристаллических нанотрубок / Р. А. Браже, А. Ф. Савин // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2015. – № 1 (33). – С. 120–129.
4. Созыкин С. А. Выбор оптимальных параметров для моделирования атомной и электронной структуры углеродных нанотрубок в пакете SIESTA / С. А. Созыкин, В. П. Бескачко, Г. П. Вяткин // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Математика. Механика. Физика. – 2015. – Т. 7, № 3. – С. 78–85.
5. Нечаева Л. С. Компьютерное моделирование сорбции аминокислот на углеродных нанотрубках / Л. С. Нечаева, Е. В. Бутырская, С. А. Запрягаев // Журнал структурной химии. – 2017. – Т. 58, № 2. – С. 233–241.
6. Попов В. И. Компьютерное моделирование процессов распылительной сушки и искрового плазменного спекания керамоматричного и оксидного композиционного материала, армированного углеродными нанотрубками / В. И. Попов, М. В. Панченко, Н. В. Мамонова, Э. М. Кольцова // Успехи в химии и химической технологии. – 2018. – Т. 32, № 11 (207). – С. 53–55.
7. Леонтьев С. В. Многокритериальная оптимизация состава теплоизоляционного автоклавного газобетона, модифицированного дисперсией углеродных нанотрубок / С. В. Леонтьев, В. А. Шаманов, А. Д. Курзанов, Г. И. Яковлев // Строительные материалы. – 2017. – № 1–2. – С. 31–40.
8. Валуев И. А. Механизмы окисления бездефектных поверхностей углеродныхnanoструктур: влияние кривизны поверхности / И. А. Валуев, Г. Э. Норман, Б. Р. Шуб // Химическая физика. – 2011. – Т. 30, № 1. – С. 82–88.
9. Бандура А. В. Моделирование структуры и устойчивости углеродных нанолент / А. В. Бандура, В. А. Шур, Р. А. Эварестов // Журнал общей химии. – 2016. – Т. 86, № 8. – С. 1233–1243.
10. Кузнецов В. В. Конформационное поведение этана в нанотрубках / В. В. Кузнецов // Журнал органической химии. – 2013. – Т. 49, № 8. – С. 1245–1249.
11. Солтани М. Структура и свойства нанокомпозита «магниевый сплав – углеродные нанотрубки» и их оптимизация с использованием метода планирования эксперимента / М. Солтани, М. Шаманьян, Б. Нируман // Металловедение и термическая обработка металлов. – 2017. – № 4 (742). – С. 59–65.
12. Хмыль А. А. Композиционные покрытия на основе проводящих металлов и углеродных кластеров для подвижных электрических контактов / А. А. Хмыль, В. Л. Ланин, Э. М. Шпилевский // Вестник Полоцкого государственного университета. Серия С: Фундаментальные науки. – 2006. – № 4. – С. 74–79.
13. Галперин В. А. Оптимизация процесса электрохимического осаждения меди в массивы углеродных нанотрубок / В. А. Галперин, П. К. Кондратьев, Д. Н. Зубов, Е. А. Кельм, А. А. Павлов // Нано- и микросистемная техника. – 2013. – № 4 (153). – С. 15–19.
14. Пэк В. В. Построение математической модели процесса нанесения наномодифицированного гальванического покрытия / В. В. Пэк, Ю. В. Литовка, Д. Ю. Попов, А. И. Хоботилина // Вестник Астраханского государственного технического университета. Серия: Управление, вычислительная техника и информатика. – 2010. – № 2. – С. 100–104.
15. Ширяев В. И. Исследование операций и численные методы оптимизации / В. И. Ширяев. – Москва : Ленанд, 2017. – 224 с.
16. Ritz W. Über eine neue methode zur lösung gewisser variationsprobleme der mathematischen physic / W. Ritz // Journal für die Reine und Angewandte Mathematik. – 1909. – Vol. 135. – pp. 1–61.
17. Голицына О. Л. Базы данных / О. Л. Голицына, Н. В. Максимов, И. И. Попов. – Москва : Форум, 2015. – 400 с.
18. Зажигаев Л. С. Методы планирования и обработки результатов физического эксперимента / Л. С. Зажигаев, А. А. Кишьян, Ю. И. Романиков. – Москва : Атомиздат, 2013. – 232 с.
19. Ткачев А. Г. Углеродный наноматериал Таунит – структура, свойства, производство и применение / А. Г. Ткачев // Перспективные материалы. – 2007. – № 3. – С. 5–9.
20. ГОСТ 9.302-88 Единая система защиты от коррозии и старения. Покрытия металлические и неметаллические неорганические. Методы контроля. – Москва : ИПК Издательство стандартов, 1990. – 40 с.
21. Kiefer J. Sequential minimax search for a maximum / J. Kiefer // Proceedings of the American Mathematical Society. – 1953. – Vol. 4 (3). – P. 502–506.
22. Powell M. J. D. An efficient method for finding the minimum of a function of several variables without calculating derivatives / M. J. D. Powell // Computer Journal. – 1964. – Vol. 7 (2). – P. 155–162.
23. Антонов А. С. Параллельное программирование с использованием технологии OpenMP : учебное пособие / А. С. Антонов. – Москва : Изд-во МГУ, 2009. – 77 с.

References

- Zaporotskova I. V., Polikarpova N. P., Ermakova T. A. Kompyuternoe modelirovaniye vzaimodeystviya tyazhelykh organicheskikh spirtov s odnosloynymi uglerodnymi nanotrubkami [Computer modeling of interaction of heavy organic alcohols with single-layer carbon nanotubes]. *Prikaspiyskiy zhurnal: upravlenie i vysokie tekhnologii* [Caspian Journal: Control and High Technologies], 2012, no. 3 (19), pp. 137–146. ([http://hi-tech.asu.edu.ru/files/3\(19\)/130-137.pdf](http://hi-tech.asu.edu.ru/files/3(19)/130-137.pdf))
- Badamshina E. R., Estrin Ya. I., Kulaagina G. S., Lurie S. A., Solyaev Yu. O. Modelirovaniye anomalnykh mekhanicheskikh svoystv poliuretana modifitsirovannogo uglerodnymi odnosloynymi nanotrubkami [Scale modelling of abnormal mechanical properties of the polyurethane at modifying by the carbon single-walled nanotubes]. *Mekhanika kompozitsionnykh materialov i konstruktsiy* [Journal on Composite Mechanics and Design], 2010, vol. 16, no. 4, pp. 551–562.

3. Brazhe R. A., Savin A. F. Matematicheskoe modelirovaniye spiralnykh suprakristallicheskikh nanotrubok [Mathematical modeling of the coiled supracrystalline nanotubes]. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [Physics and Mathematics Sciences. Physics], 2015, no. 1 (33), pp. 120–129.
4. Sozykin S. A., Beskachko V. P., Vyatkin G. P. Vybor optimalnykh parametrov dlya modelirovaniya atomnoy i elektronnoy struktury uglerodnykh nanotrubok v pakete SIESTA [Selection of the optimal parameters for simulation of atomic and electronic structure of carbon nanotubes by siesta package]. *Vestnik Yuzhno-Ural'skogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Matematika. Mekhanika. Fizika* [Bulletin of the South Ural State University. Series: Mathematics. Mechanics. Physics], 2015, vol. 7, no. 3, pp. 78–85.
5. Nechaeva L. S., Butyrskaya E. V., Zapryagaev S. A. Kompyuternoe modelirovaniye sorbtsii aminokislot na uglerodnykh nanotrubkakh [Computer simulation of amino acid sorption on carbon nanotubes]. *Zhurnal strukturnoy himii* [Journal of Structural Chemistry], 2017, vol. 58, no. 2, pp. 217–225.
6. Popov V. I., Panchenko M. V., Mamonova N. V., Koltsova E. M. Kompyuternoe modelirovaniye protsessov raspyslitelnoy ushushki i iskrovogo plazmennogo spekaniya keramomatrixnogo i oksidnogo kompozitsionnogo materiala, armirovannogo uglerodnymi nanotrubkami [Computer simulation of the process of spray-drying and spark plasma sintering of ceramomatrix and oxide composites reinforced by carbon nanotubes]. *Uspekhi v khimii i khimicheskoy tekhnologii* [Advances in Chemistry and Technologies Used], 2018, vol. 32, no. 11 (207), pp. 53–55.
7. Leontev S. V., Shamanov V. A., Kurzanov A. D., Yakovlev G. I. Mnogokriterial'naya optimizatsiya sostava teploizolyacionnogo avtoklavnogo gazobetona, modifitsirovannogo dispersiey uglerodnykh nanotrubok [Multiobjective Optimization of the Lightweight Autoclaved Aerated Concrete Modified with Carbon Nanotubes Dispersions]. *Stroitelnye materialy* [Construction Materials], 2017, no. 1–2, pp. 31–40.
8. Valuev I. A., Norman G. E., Shub B. R. Mekhanizmy okisleniya bezdefektnykh poverhnostey uglerodnykh nanostruktur: vliyanie krivizny poverhnosti [Mechanisms of the oxidation of defect-free surfaces of carbon nanostructures: The influence of surface curvature]. *Khimicheskaya fizika* [Russian Journal of Physical Chemistry], 2011, vol. 5, no. 1, pp. 156–162.
9. Bandura A. V., Shur V. A., Evarestov R. A. Modelirovaniye struktury i ustojchivosti uglerodnykh nanolent [Simulation of structure and stability of carbon nanoribbons]. *Zhurnal obshchey khimii* [Russian Journal of General Chemistry], 2016, vol. 86, no. 8, pp. 1777–1786.
10. Kuznetsov V. V. Konformacionnoe povedenie etana v nanotrubkah [Conformational behavior of ethane molecule encapsulated in a nanotube]. *Zhurnal organicheskoy khimii* [Russian Journal of Organic Chemistry], 2013, vol. 49, no. 8, pp. 1231–1235.
11. Soltani M., Shamanian M., Niroumand B. Struktura i svoystva nanokompozita "magnievyy splav – uglerodnye nanotrubki" i ikh optimizatsiya s ispolzovaniem metoda planirovaniya eksperimenta [Structure and properties of "magnesium alloy – carbon nanotubes" nanocomposite and their optimization using design of experiments]. *Metallovedenie i termicheskaya obrabotka metallov* [Metal Science and Heat Treatment], 2017, no. 4 (742), pp. 59–65.
12. Khmyl A. A., Lanin V. L., Shpilevskiy E. M. Kompozitsionnye pokrytiya na osnove provodyashchikh metallov i uglerodnykh klasterov dlya podvizhnnykh elektricheskikh kontaktov [Composite coatings based on conductive metals and carbon clusters for mobile electrical contacts]. *Vestnik Polotskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya S: Fundamental'nye nauki* [Bulletin of Polotsk State University. Series S: Basic Sciences], 2006, no. 4, pp. 74–79.
13. Galperin V. A., Kondratev P. K., Zubov D. N., Kelm E. A., Pavlov A. A. Optimizatsiya protsessa elektrokhimicheskogo osazhdeleniya medi v massivy uglerodnykh nanotrubok [Process optimization for electrochemical deposition of copper into arrays of carbon nanotubes]. *Nano- i mikrosistemnaya tekhnika* [Nano and microsystem technology], 2013, no. 4 (153), pp. 15–19.
14. Pek V. V., Litovka Yu. V., Popov D. Yu., Khobotilina A. I. Postroenie matematicheskoy modeli protsessa naneseniya nanomodifitsirovannogo galvanicheskogo pokrytiya [Formation of mathematical model of the process of applying nanomodified galvanic coating]. *Vestnik Astrakhanskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta. Seriya: Upravlenie, vychislitel'naya tekhnika i informatika* [Vestnik of Astrakhan State Technical University. Series: Management, Computer Science and Informatics], 2010, no. 2, pp. 100–104.
15. Shiryayev V. I. *Issledovanie operatsiy i chislennye metody optimizatsii* [Operations research and numerical optimization methods], Moscow, Lenand Publ., 2017. 224 p.
16. Ritz W. Über eine neue methode zur lösung gewisser variationsprobleme der mathematischen physic. *Journal für die Reine und Angewandte Mathematik*, 1909, vol. 135, pp. 1–61.
17. Golitsyna O. L., Maksimov N. V., Popov I. I. *Bazy dannyykh* [Databases]. Moscow, Forum Publ., 2015. 400 p.
18. Zazhigaev L. S., Kishyan A. A., Romanikov Yu. I. *Metody planirovaniya i obrabotki rezul'tatov fizicheskogo eksperimenta* [Methods of planning and processing the results of a physical experiment]. Moscow, Atomizdat Publ., 2013. 232 p.
19. Tkachev A. G. Uglerodnyy nanomaterial Taunit – struktura, svoystva, proizvodstvo i primenenie [Carbon nanomaterial Taunit – structure, properties, production and application]. *Perspektivnye materialy* [Promising materials], 2007, no. 3, pp. 5–9.
20. GOST 9.302-88 *Edinaya sistema zashchity ot korroziyi i stareniya. Pokrytiya metallicheskie i nemetallicheskie neorganicheskie. Metody kontrolya* [Unified system of corrosion and ageing protection. Metal and non-metal inorganic coatings. Control methods]. Moscow, IPK Izdatelstvo standartov, 1990. 40 p.
21. Kiefer J. Sequential minimax search for a maximum. *Proceedings of the American Mathematical Society*, 1953, vol. 4 (3), pp. 502–506.
22. Powell M. J. D. An efficient method for finding the minimum of a function of several variables without calculating derivatives. *Computer Journal*, 1964, vol. 7 (2), pp. 155–162.
23. Antonov A. S. *Parallelnoe programmirovaniye s ispolzovaniem tekhnologii OpenMP: uchebnoe posobie* [Parallel Programming Using OpenMP Technology: Tutorial]. Moscow, Lomonosov Moscow State University, 2009. 77 p.