

СИСТЕМА ПОДДЕРЖКИ ПРИНЯТИЯ РЕШЕНИЙ ПРИ ПРОИЗВОДСТВЕ КАТАЛИЗАТОРА СИНТЕЗА УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Е. А. Буракова, Е. Н. Туголуков, Т. П. Дьячкова

*Кафедра «Техника и технологии производства нанопродуктов»,
elenburakova@yandex.ru; ФГБОУ ВО «ТГТУ», Тамбов, Россия*

Ключевые слова: критерий оптимальности; методология; оптимизация; процесс получения катализатора; система поддержки принятия решений; углеродные нанотрубки; управление; физическое воздействие.

Аннотация: Представлена методология разработки системы поддержки принятия решений при производстве катализатора, обеспечивающего синтез углеродных нанотрубок с заданными параметрами. Методология, основанная на новом подходе к управлению параметрами наноструктур, определяет данные, необходимые для разработки информационной системы, обеспечивающей поддержку принятия решений при производстве катализатора (при создании баз данных, постановке и решении задачи оптимизации условий формирования катализатора, обеспечивающего синтез наноструктур с заданными параметрами; разработке интерфейса, обеспечивающего взаимодействие технолога с информационной системой). Использование разработанной системы поддержки принятия решений позволяет без проведения дополнительных экспериментов устанавливать состав и условия обработки катализатора, обеспечивающие синтез наноструктур с параметрами, наиболее близкими к заданным.

Введение

Катализаторы в процессе формирования углеродных нанотрубок (УНТ) играют ключевую роль. Согласно механизму карбидного цикла в результате разложения углеродсодержащего сырья именно на поверхности металлической частицы катализатора происходит образование карбидоподобных соединений, которые при разрушении насыщают ее углеродом и приводят к образованию в зоне перенасыщения нитевидных углеродных наноструктур.

Известно, что размер частиц катализатора четко коррелирует с диаметром, а соответственно и числом стенок УНТ [1, 2]. При этом не все частицы катализатора способны к формированию структурированного углерода. Так, в работе [1] утверждается, что на частицах размером менее 7 нм УНТ не формируются, а при размере более 20 нм их образование маловероятно. В других работах отмечается, что размеры частиц никеля и кобальта должны быть не более 100 нм [3], а железа – не более 1 мкм [4].

Исходя из этого, можно сделать вывод, что параметры УНТ определяются свойствами используемого в процессе их синтеза катализатора. В свою очередь свойства катализатора зависят от состава и условий получения (температуры и продолжительности термического разложения, наличия дополнительной обра-

ботки предшественника катализатора, подвода осушенного воздуха), а также восстановления.

В качестве катализатора синтеза УНТ обычно используют биметаллические системы на основе железа, кобальта или никеля, при этом часто в процессе газофазного химического осаждения (**ГФХО**) – наиболее предпочтительного метода для промышленного производства углеродных наноструктур, используют металлоксидные каталитические системы. Это объясняется тем, что металлоксидные каталитические частицы восстанавливаются до металлических водородом, выделившимся в результате разложения углеводородного сырья. Данный факт позволяет исключить стадию восстановления из процесса получения катализатора для синтеза УНТ.

Наиболее востребованным для получения катализатора синтеза УНТ является метод термического разложения. Классическая методика получения катализатора данным методом заключается в подборе его состава (выбора источников активного компонента, носителя и промотора); получении на их основе раствора-расплава (предшественника катализатора), его термическом разложении в целях получения металлоксидной каталитической системы и ее измельчении.

Согласно [5, 6], данный процесс может быть дополнен введением дополнительных стадий, обеспечивающих улучшение свойств формируемого катализатора. Дополнительно введенные стадии предусматривают обработку раствора-расплава физическим воздействием или прокаливание металлоксидной системы, полученной в результате термического разложения предшественника катализатора. Несмотря на это, при получении катализатора синтеза УНТ редко прибегают к обработке его предшественника физическим воздействием. В свою очередь поиск способов изменения свойств катализатора является весьма актуальным, так как может позволить организовать управление параметрами синтезируемых наноструктур еще на стадии формирования каталитической системы.

В случае необходимости реализации производства УНТ под конкретную область применения, перед технологом возникает проблема выбора состава катализатора и условий его получения, обеспечивающего формирование наноструктур с параметрами, значения которых наиболее близки к ожидаемым. В настоящее время данная проблема решается путем подбора оптимального варианта состава катализатора и методики его получения эмпирически, что экономически нецелесообразно, так как требует проведения большого объема экспериментов.

В связи с тем что области применения УНТ различны, и для каждой из них необходимы соответствующие наноструктуры, данный подход к решению проблемы не позволяет производителю оперативно налаживать их производство с ожидаемыми параметрами, что сдерживает развитие nanoиндустрии. Решение проблемы оперативного перехода производства к выпуску нового типа УНТ с ожидаемыми параметрами представляется возможным за счет повышения эффективности существующей системы управления с использованием систем поддержки принятия решений (**СППР**) при производстве катализатора.

Цель работы – создание информационной системы (**ИС**), обеспечивающей не только поддержку принятия решений при производстве катализатора синтеза УНТ, но и его документальное сопровождение. Основная задача ИС – упростить для технолога процесс принятия решений при выборе состава катализатора и условий его получения, обеспечивающих в процессе ГФХО формирование УНТ с параметрами, значения которых наиболее близки к ожидаемым. Для достижения цели необходимо провести анализ используемых в nanoиндустрии ИС, разработать и реализовать на практике методологию создания СППР при производстве катализатора синтеза УНТ, апробировать созданную ИС при производстве углеродных наноматериалов.

Методология СППР при производстве катализаторов

Проблема организации эффективного управления параметрами УНТ при их производстве методом ГФХО вызвана протеканием ряда многофакторных взаимосвязанных между собой процессов. В настоящее время решение данной проблемы без использования современных ИС, призванных упростить обработку и анализ имеющихся данных, снизить нагрузку на технолога при принятии решений относительно условий реализации производственного процесса, не представляется возможным.

Анализ современных ИС, используемых в области нанотехнологий и наноматериалов, выявил преобладание систем информационно-справочного типа (Nanoparticle Information Library, Nanohub, InterNano), представляющих собой каталоги изображений наноструктур, продуктов на их основе. Информационные системы такого типа, за счет содержащейся в них информации, позволяют лишь обоснованно, минуя случайный поиск [7], выбрать направление проведения экспериментальных исследований. Источники, в которых речь идет о разработке и использовании СППР при проектировании оборудования для производства углеродных наноматериалов [8] и использовании искусственного интеллекта для оптимизации параметров их синтеза с заданными свойствами [9], единичны. Данный факт говорит об актуальности разработки таких ИС, однако разработка СППР в отсутствие методологии не представляется возможной. Поэтому для повышения эффективности системы управления параметрами синтезируемых УНТ разработана методология создания СППР при производстве катализатора.

Разработка методологии создания СППР при производстве катализатора, обеспечивающего формирование наноструктур с ожидаемыми значениями основных параметров, основывалась не только на знаниях процесса синтеза УНТ методом ГФХО, опыте получения катализаторов, но и на новом методе управления параметрами синтезируемых УНТ, заключающемся в дополнительной обработке катализатора или раствора-расплава его исходных компонентов физическим воздействием.

В отличие от механоактивации и промотирования этот метод изменения свойств катализатора, а следовательно и параметров синтезированных на нем УНТ, на данный момент в наноиндустрии не имеет широкого применения. Несмотря на это, предварительно проведенные эксперименты подтверждают возможность управления за счет дополнительной обработки раствора-расплава исходных компонентов катализатора физическим воздействием не только активностью, удельной поверхностью и другими свойствами формируемой каталитической системы, но и параметрами синтезируемых на ней УНТ.

Предполагается, что наблюдаемые изменения свойств катализатора вызваны кратковременной перестройкой в растворе-расплаве относительно устойчивых ионных комплексов [10], в основе которых лежат молекулы хелатообразующего вещества. Особенностью реализации процесса получения катализатора с дополнительно введенной стадией обработки является необходимость своевременной (в течение нескольких минут) фиксации состояния раствора-расплава, преобразованного физическим воздействием, термическим разложением.

Исходя из анализа производства УНТ методом ГФХО, опыта получения катализаторов и нового метода управления параметрами синтезируемых наноструктур установлено, что добиться их формирования с ожидаемыми параметрами можно двумя способами: путем подбора состава катализатора и условий обработки его раствора-расплава физическим воздействием. При этом существующие способы управления свойствами катализатора не позволяют добиться полного совпадения значений параметров синтезируемых УНТ с ожидаемыми. Следовательно, получение катализатора, обеспечивающего синтез УНТ с параметрами, значения которых наиболее близки к ожидаемым, предусматривает постановку и решение оптимизационной задачи.

Так как механизмы наблюдаемых изменений свойств катализатора, полученного в результате обработки раствора-расплава его исходных компонентов физическим воздействием, недостаточно изучены, то для формализованной постановки задачи оптимизации условий получения катализатора, обеспечивающего формирование целевого нанопродукта, необходимо установить уравнения связей и ограничения. В силу указанных выше причин применение на данном этапе аналитических моделей управления параметрами УНТ новым методом невозможно, поэтому в качестве уравнений связей предлагается использовать аппроксимационные зависимости, установленные в результате обработки полученных экспериментальных данных.

Поэтому для создания ИС, обеспечивающей поддержку принятия решений при производстве катализатора, позволяющего синтезировать УНТ с ожидаемыми параметрами, необходимо: руководствуясь принципом конечной цели, единства и иерархии, провести декомпозицию производства УНТ методом ГФХО; установить взаимосвязи его основных элементов и составы их информационных потоков; сформулировать критерий оптимальности; осуществить постановку оптимизационной задачи; осуществить планирование эксперимента и в соответствии с ним провести исследования, направленные на получение информации о влиянии состава катализатора и условий его обработки физическим (ультразвуковым, электромагнитным и высокотемпературным) воздействием на параметры синтезируемых УНТ; провести обработку полученных экспериментальных данных и на их основе установить аппроксимационные зависимости, которые будут использоваться в качестве уравнений связей при решении оптимизационной задачи; на основе установленной информации с учетом принципа развития ИС разработать модули, обеспечивающие поддержку принятия решений при производстве катализатора синтеза УНТ и его информационное сопровождение; апробировать разработанную систему сопровождения и поддержки принятия решения при производстве катализаторов синтеза УНТ.

Таким образом, методология СППР при производстве катализатора, обеспечивающего формирование УНТ с ожидаемыми значениями основных параметров, заключается в получении информации, необходимой для достижения поставленной цели; формировании на ее основе базы данных открытого типа, допускающей ее расширение и обновление; формировании базы функциональных связей параметров, характеризующих синтезированные наноструктуры, с управляющими факторами; постановке и решении оптимизационной задачи; разработке интерфейса, обеспечивающего взаимодействие технолога с ИС.

Постановка и решение оптимизационной задачи

Производство УНТ методом ГФХО заключается в реализации взаимосвязанных определенным образом основных (процесса ГФХО и получения катализатора) и вспомогательных процессов (газоподготовки, обезвреживания газообразных продуктов и подготовки наноструктур). Анализ этой сложной технологической системы производства УНТ методом ГФХО позволил определить составы ее основных информационных потоков, необходимые для установления управляющих факторов и формулировки критерия оптимальности. Основные информационные потоки производства УНТ методом ГФХО представлены на рис. 1.

Исходя из опыта получения катализатора методом термического разложения и необходимости сохранения в интересах производителя неизменными условий реализации ГФХО, информационный поток X характеризуется входными (составом катализатора), управляющими (температурой термического разложения, расходом дополнительно подводимого в зону разложения окислителя, временем и типом обработки физическим воздействием, удельной мощностью обработки,

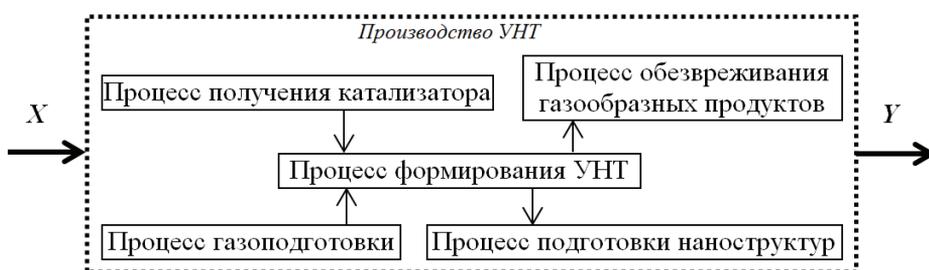


Рис. 1. Информационные потоки производства УНТ методом ГФХО

температурой прокаливания, параметрами ГФХО и др.) и возмущающими факторами (влиянием атмосферного давления, температуры окружающей среды и их изменением и др.). В соответствии с этим информационный поток X можно представить в виде

$$X = \left\langle \bar{C}, \omega_{\text{air}}, t_0, \bar{\psi}, P, t_{0,c}, t_{\text{п}}, t_{\text{к}}, c_{\text{п}}, c_{\text{к}}, \tau_{\text{об}}, t_{\text{об}}, W_{\text{об}}, P_{C_xH_y}, G_{C_xH_y}, T_{\text{ГФХО}}, \tau_{\text{ГФХО}}, P_{\text{атм}}, \Delta P_{\text{атм}}, \Delta t_{0,c} \right\rangle, \quad (1)$$

где \bar{C} – тип катализатора, определяющийся содержанием его основных компонентов; ω_{air} – расход воздуха в зону термического разложения, $\text{м}^3/\text{с}$; t_0 – температура раствора исходных компонентов катализатора, $^{\circ}\text{C}$; $\bar{\psi}$ – геометрические размеры емкости для обработки катализатора, м ; P – тип обработки физическим воздействием; $t_{0,c}$ – температура окружающей среды, $^{\circ}\text{C}$; $t_{\text{п}}, t_{\text{к}}$ – температуры среды соответственно в рабочей зоне и слое катализатора, $^{\circ}\text{C}$; $c_{\text{п}}, c_{\text{к}}$ – концентрации веществ соответственно в рабочей зоне и слое катализатора, моль/л ; $\tau_{\text{об}}$ – продолжительность обработки, с ; $t_{\text{об}}$ – температура обработки, $^{\circ}\text{C}$; $W_{\text{об}}$ – удельная мощность обработки, Вт/м^3 ; $P_{C_xH_y}$ – тип сырья; $G_{C_xH_y}$ – расход углеродсодержащего сырья, $\text{м}^3/\text{с}$; $T_{\text{ГФХО}}$ – температура ГФХО, $^{\circ}\text{C}$; $\tau_{\text{ГФХО}}$ – продолжительность ГФХО, с ; $P_{\text{атм}}$ – атмосферное давление, Па ; $\Delta P_{\text{атм}}$ – нестабильность атмосферного давления, Па ; $\Delta t_{0,c}$ – нестабильность температуры окружающей среды, $^{\circ}\text{C}$.

Оценку синтезированных УНТ осуществляли по основным параметрам, поэтому выходной информационный поток представлен

$$Y = \langle D, d, \gamma, I_{D/G} \rangle, \quad (2)$$

где D и d – соответственно внешний и внутренний диаметры УНТ, нм ; γ – удельный выход наноструктур, $\text{г}/\text{г}_{\text{cat}}$; $I_{D/G}$ – степень дефектности синтезированных наноматериалов, определяемую по результатам рамановской спектроскопии (по соотношению интенсивностей спектров, вызванных дефектами графенового слоя и колебаниями атомов углерода в нем).

В связи с тем что возмущающие факторы, такие как $t_{0,c}$, $P_{\text{атм}}$, $\Delta t_{0,c}$, $\Delta P_{\text{атм}}$, не оказывают существенного влияния на параметры синтезируемых УНТ, то в дальнейшем при изучении производственного процесса ими пренебрегаем. Согласно составу информационного потока (1) и необходимости сохранения условий его реализации, изменение свойств катализатора главным образом вызвано обработкой раствора-расплава его исходных компонентов физическим воздействием, поэтому основными управляющими факторами, кроме \bar{C} , являются P , $\tau_{\text{об}}$, $t_{\text{об}}$, $W_{\text{об}}$.

На основе состава выходного информационного потока технологической системы производства УНТ (2) с использованием метода аддитивной свертки частных критериев сформулирован комплексный критерий оптимальности процесса получения катализатора, обеспечивающего синтез наноструктур с параметрами, значения которых наиболее близки к ожидаемым. Комплексный критерий целесообразно представить в виде суммы взвешенных модулей относительных отклонений значений параметров синтезированных УНТ, характеризующих информационный поток (2), от ожидаемых. Каждый модуль имеет весовой коэффициент, значение которого определяется важностью параметра для области применения наноструктур. В связи с этим в общем виде комплексный критерий оптимальности представляет собой

$$M = \sum_{i=1}^n \alpha_i \left| \frac{z_i - z_{i0}}{z_{i0}} \right|, \quad (3)$$

где z_i – фактическое значение параметра полученных УНТ; z_{i0} – ожидаемое значение данного параметра; n – число параметров, характеризующих информационный поток Y ; α_i – весовой коэффициент.

В результате проведения экспериментальных исследований будут получены новые знания о влиянии указанных выше управляющих факторов на свойства катализатора и параметры синтезируемых на нем УНТ. Обработка полученных данных с использованием Table Curve 2D v5.01 и Table Curve 3D v4.0 позволит определить аппроксимационные зависимости, которые предлагается использовать в качестве уравнений связей при решении оптимизационной задачи.

С учетом используемого метода управления параметрами УНТ [11], полученные зависимости целесообразно представить в следующем виде:

$$Y(C, P, t_{об}, \tau_{об}, W_{об}) = \begin{cases} C = 1 : & D_1 = f_{D1}(\tau_{об}, t_{об}, W_{об}); d_1 = f_{d1}(\tau_{об}, t_{об}, W_{об}); \\ P = 1 : & \gamma_1 = f_{\gamma1}(\tau_{об}, t_{об}, W_{об}); I_{D/G1} = f_{D/G1}(\tau_{об}, t_{об}, W_{об}); \\ \\ C = 1 : & D_1 = f_{D1}(\tau_{об}, t_{об}, W_{об}); d_1 = f_{d1}(\tau_{об}, t_{об}, W_{об}); \\ P = 2 : & \gamma_1 = f_{\gamma1}(\tau_{об}, t_{об}, W_{об}); I_{D/G1} = f_{D/G1}(\tau_{об}, t_{об}, W_{об}); \\ \\ C = N_C : & D_{N_C} = f_{D_{N_C}}(\tau_{об}, t_{об}, W_{об}); d_{N_C} = f_{d_{N_C}}(\tau_{об}, t_{об}, W_{об}); \\ P = N_P : & \dots \end{cases} \quad (4)$$

где N_C, N_P – число составов катализатора и типов обработки физическим воздействием соответственно, при этом C и P являются дискретными, а управляющие факторы $\tau_{об}, t_{об}, W_{об}$ – непрерывными величинами.

С учетом методологии создания ИС, основанной на новом методе управления параметрами формируемых наноструктур, оптимизационная задача сводится к установлению условий реализации процесса получения катализатора, обеспечивающего синтез УНТ с параметрами, значения которых наиболее близки к ожидаемым. В соответствии с составом информационных потоков (1) и (2) производственной системы предлагается следующая вербальная постановка оптимизационной задачи: для формирования УНТ с ожидаемыми значениями $D_0, d_0, \gamma_0, I_{D/G0}$, необходимо определить такие значения управляющих факторов $C, P, \tau_{об}, t_{об}, W_{об}$,

при которых критерий оптимальности (3) принимает минимальное значение с учетом уравнений связей (4) и ограничений:

$$C = 1, 2, \dots, N_C; \quad P = 0, 1, \dots, N_P;$$

$$\tau_{об \min} \leq \tau_{об} \leq \tau_{об \max}; \quad t_{об \min} \leq t_{об} \leq t_{об \max}; \quad W_{об \min} \leq W_{об} \leq W_{об \max}.$$

Небольшое число переменных, наличие дискретных величин предполагает использование для решения данной оптимизационной задачи метода сканирования, который обеспечивает нахождение глобального минимума.

Система информационного сопровождения и поддержки принятия решений

Постановка оптимизационной задачи и ее решение позволяют перейти к созданию ИС, состоящей из двух модулей. Основным элементом ИС является модуль поддержки принятия решений, который, взаимодействуя с технологом через пользовательский интерфейс, по заданным параметрам УНТ определяет состав катализатора, тип и режимы его обработки физическим воздействием, обеспечивающие формирование наноструктур с параметрами, значения которых наиболее близки к ожидаемым. Структура модуля поддержки принятия решений представлена на рис. 2.

Модуль поиска минимума целевой функции перебирает все возможные варианты соотношений «Тип катализатора» – «Тип обработки» – «Тип газа» и для каждого варианта из базы данных определяет набор аппроксимационных зависимостей, полученных в результате обработки экспериментальных данных. Методом сканирования для всех вариантов определяется минимум целевой функции, и модуль поддержки принятия решений выстраивает найденные варианты по возрастанию значения критерия оптимальности.

Технологу модуль предоставляет несколько наилучших вариантов, из которых он с учетом слабо формализуемых факторов, свойственных производству, делает окончательный выбор. Выбранный вариант состава катализатора и условий обработки его раствора-расплава физическим воздействием технолог передает из модуля поддержки принятия решений в модуль сопровождения производства для заполнения технологического журнала.

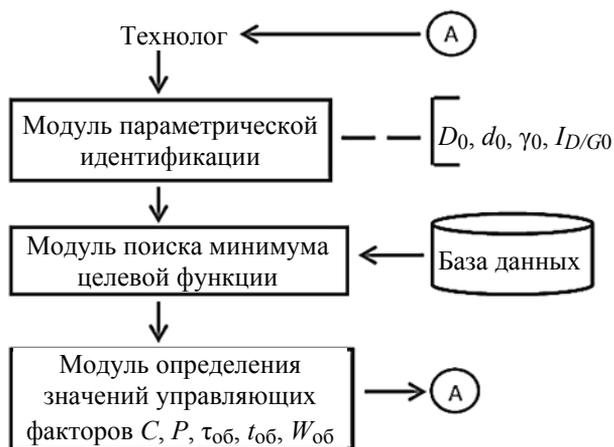


Рис. 2. Структура модуля поддержки принятия решений

Вторым элементом ИС является модуль информационного сопровождения производства, для создания которого использовали SupraSoft 1.10. Данный модуль представляет собой ряд вложенных таблиц, содержащих полную информацию о сырье для получения катализатора, характеристиках формируемых каталитических систем и синтезируемых на них УНТ. Наполнение информацией журналов данного модуля осуществляет химик-лаборант. На основе этой и переданной из модуля поддержки принятия решений информации происходит заполнение технологического журнала, в соответствии с которым и будет реализован процесс получения катализатора, способствующего синтезу УНТ со значениями параметров, наиболее близкими к ожидаемым.

Структура модуля сопровождения производства УНТ, позволяющего вести учет произведенного катализатора и синтезированных на нем УНТ, представлена на рис. 3.

Исходя из принципа развития ИС, база данных модуля поддержки принятия решений представлена в виде текстового файла определенной структуры, предусматривающей ее расширение путем внесения информации о новых составах катализатора, типах и условиях обработки раствора-расплава его исходных компонентов физическим воздействием.

Информационная система, созданная в результате реализации разработанной методологии, апробирована в ООО «НаноТЦ» (г. Тамбов) при получении катализатора для синтеза УНТ с заранее ожидаемыми параметрами ($D = 30$ нм, $I_{D/G} = 1$, $\gamma = 15$ гс/г_{кат}). В качестве углеродсодержащего сырья необходимо использовать пропан-бутановую смесь. Рекомендуемые варианты состава катализатора и условий его формирования, полученные СППР в результате обработки имеющейся информации, представлены на рис. 4.

Предложенные ИС варианты реализованы в лаборатории для сопоставления полученных значений параметров синтезированных УНТ с ожидаемыми. Обработка катализатора ультразвуковым воздействием частотой 22 кГц проводилась с использованием лабораторного диспергатора ИЛ 100 (ИНЛАБ, г. Санкт-Петербург), термообработку Co–Mo/Al₂O₃–MgO катализатора реализовывали в печи при дополнительной подаче окислителя.

Полученные катализаторы использовали в процессе синтеза УНТ при одинаковых условиях реализации ГФХО. Активность полученных катализаторов оценивали по удельному выходу наноструктур (гс/г_{кат}), который определяли как массу УНТ, сформировавшихся на одном грамме катализатора. Удельный выход и степень дефектности УНТ, синтезированных на катализаторах, полученных согласно рекомендациям СППР, представлены в табл. 1.

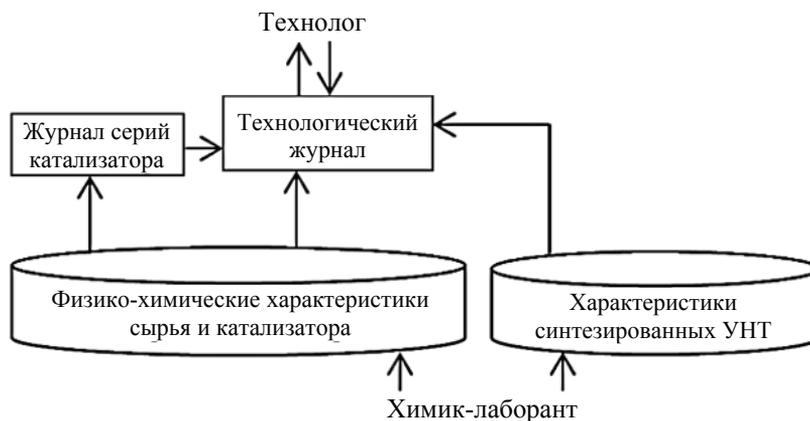


Рис. 3. Структура модуля сопровождения производства УНТ

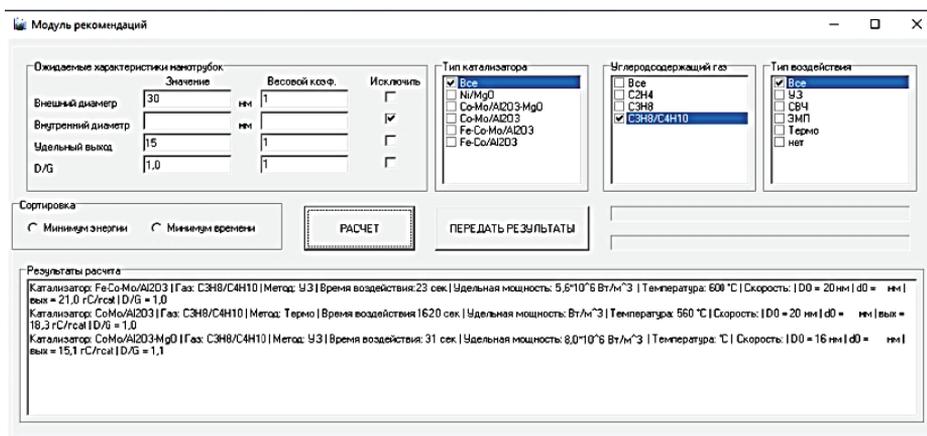


Рис. 4. Рекомендации СППР при производстве катализатора синтеза УНТ

Таблица 1

Удельный выход и степень дефектности УНТ, синтезированных на полученных катализаторах

Параметр	Тип катализатора, С		
	Fe–Co–Mo/Al ₂ O ₃	Co–Mo/Al ₂ O ₃	Co–Mo/Al ₂ O ₃ –MgO
γ , ГС/Г _{cat}	28	20,1	13,5
$I_{D/G}$	1,0	1,0	0,96

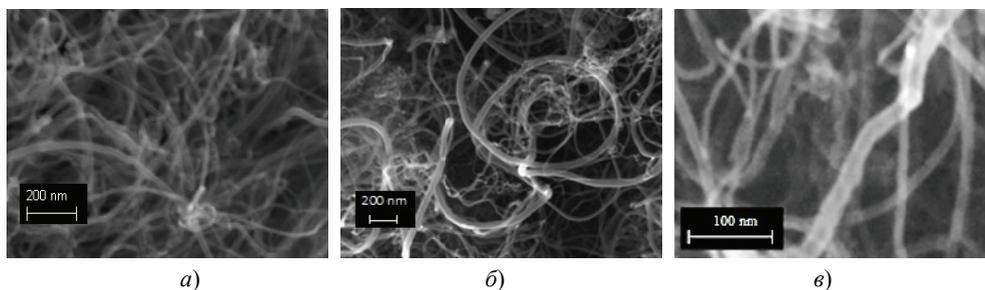


Рис. 5. СЭМ-изображения УНТ, синтезированных на катализаторе:
а – Fe–Co–Mo/Al₂O₃; б – Co–Mo/Al₂O₃; в – Co–Mo/Al₂O₃–MgO

В целях определения диаметров синтезированных УНТ, оценку их изображений, полученных с использованием сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), осуществляли с использованием программного обеспечения JMicroVision. СЭМ-изображения наноструктур, синтезированных на полученных катализаторах, представлены на рис. 5.

Сопоставление фактических значений параметров УНТ, синтезированных на катализаторах, полученных согласно рекомендациям СППР, с ожидаемыми значениями доказывает эффективность разработанной ИС.

Заключение

В данной статье представлена методология создания СППР при производстве катализаторов синтеза УНТ, основанная на новом методе управления параметрами синтезируемых наноструктур. Созданная в соответствии с данной методоло-

гией ИС позволяет упростить для технолога не только процесс принятия решений при выборе состава катализатора и условий реализации процесса его получения, в частности условий обработки его предшественника физическим воздействием, но и подготовки сопроводительной документации. Не требуя проведения многочисленных экспериментов, СППР на основе имеющейся информации позволяет установить состав и условия формирования катализатора, обеспечивающего синтез УНТ с параметрами, имеющими наиболее близкие значения к ожидаемым. Апробация ИС в ООО «НаноТЦ» подтверждает данный факт и позволяет предположить, что использование ее как дополнительного элемента рассматриваемой производственной системы будет способствовать повышению эффективности ее функционирования за счет предоставления ей возможности оперативного перехода к выпуску наноструктур под конкретную область применения.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 22-23-01072).

Список литературы

1. Булярский, С. В. Растворимость углерода в никелевом катализаторе при росте углеродных нанотрубок / С. В. Булярский, Е. П. Кицюк, А. В. Лакалин, А. А. Павлов, Р. М. Рязанов // Микроэлектроника. – 2020. – Т. 49, № 1. – С. 27 – 32.
2. Фурсиков, П. В. Каталитический синтез и свойства углеродных нановолокон и нанотрубок / П. В. Фурсиков, Б. П. Тарасов // Альтернативная энергетика и экология. – 2004. – № 10(18). – С. 24 – 40.
3. Рухов, А. В. Процессы и реакционное оборудование производства углеродных наноматериалов / А. В. Рухов. – М. : Академия Естествознания, 2013. – 133 с.
4. Раков, Э. Г. Нанотрубки и фуллерены : учеб. пособие / Э. Г. Раков. – М. : Логос, 2006. – 376 с.
5. Imran, Al. A new approach to the economic synthesis of multi-walled carbon nanotubes using a Ni/MgO catalyst / Al. Imran, T. S. AlGarni, E. Burakova, A. Tkachev, E. Tugolukov, T. Dyachkova, A. Rukhov, I. Gutnik, E. Galunin // Materials Chemistry and Physics. – 2021. – Vol. 261. – P. 124234. doi: 10.1016/j.matchemphys.2021.124234
6. Буракова, Е. А. Влияние термообработки на свойства катализатора синтеза углеродных нанотрубок / Е. А. Буракова, Г. С. Бесперстова, М. А. Неверова, А. Г. Ткачев, Н. А. Чапаксов, А. В. Рухов // Вестник ВГУИТ. – 2020. – Т. 82, № 1(83). – С. 237 – 246.
7. Шахнов, В. А. Нанотехнологическая информатика – направление развития информационных технологий / В. А. Шахнов, Л. А. Зинченко // Информационные технологии и вычислительные системы. – 2012. – № 3. – С. 84 – 92.
8. Реутова, М. В. Информационная система поддержки принятия решений при проектировании процесса производства углеродных нанотрубок и фуллеренов : дис. ... канд. техн. наук : 05.13.12 / Реутова Мария Вячеславовна. – М., 2004. – 165 с.
9. Iakovlev, V. Yu. Artificial neural network for predictive synthesis of single-walled carbon nanotubes by aerosol CVD method / V. Yu. Iakovlev, D. V. Krasnikov, E. M. Khabushev [et al.] // Carbon. – 2019. – Vol. 153. – P. 100 – 103.
10. Imran, Al. Experimental and simulation studies to determine the mechanisms of catalyst formation for the targeted synthesis of carbon nanotubes / Al. Imran, E. Burakova, A. Tkachev, E. Tugolukov, T. Dyachkova [et al.] // Journal of Nanoparticle Research. – 2021. – Vol 23, No. 9. doi: 10.1007/s11051-021-05320-3
11. Буракова, Е. А. Концепция управления технологической системой производства углеродных нанотрубок / Е. А. Буракова // Вестн. Тамб. гос. техн. ун-та. – 2022. – Т. 28, № 3. – С. 444 – 454. doi: 10.17277/vestnik.2022.03.pp.444-454

A Decision Support System for Preparation of a Catalyst for the Synthesis of Carbon Nanotubes

E. A. Burakova, E. N. Tugolukov, T. P. Dyachkova

*Department of Technology and Methods for Nanoproducts Manufacturing,
elenburakova@yandex.ru; TSTU, Tambov, Russia*

Keywords: optimality criterion; methodology; optimization; the process of obtaining a catalyst; decision support system; carbon nanotubes; control; physical impact.

Abstract: A methodology for the development of a decision support system for the production of a catalyst providing the synthesis of carbon nanotubes with specified parameters is presented. The methodology, based on a new approach to managing the parameters of nanostructures, determines the data necessary for the development of an information system that provides decision support in the production of a catalyst (when creating databases, setting and solving the problem of optimizing the conditions for the formation of a catalyst that provides the synthesis of nanostructures with specified parameters; development interface that ensures the interaction of the technologist with the information system). The use of the developed decision support system makes it possible, without additional experiments, to establish the composition and processing conditions of the catalyst that ensure the synthesis of nanostructures with parameters closest to the specified ones.

References

1. Bulyarsky S.V., Kitsyuk E.P., Lakalin A.V., Pavlov A.A., Ryazanov R.M. [Solubility of carbon in a nickel catalyst during the growth of carbon nanotubes], *Mikroelektronika* [Microelectronics], 2020, vol. 49, no. 1, pp. 27-32. (In Russ., abstract in Eng.).
2. Fursikov P.V., Tarasov B.P. [Catalytic synthesis and properties of carbon nanofibers and nanotubes], *Al'ternativnaya energetika i ekologiya* [Alternative energy and ecology], 2004, no. 10(18), pp. 24-40. (In Russ., abstract in Eng.).
3. Rukhov A.V. *Protsessy i reaktivnyye oborudovaniye proizvodstva uglerodnykh nanomaterialov* [Processes and reaction equipment for the production of carbon nanomaterials]. Moscow: Academy of Natural Sciences, 2013, 133 p. (In Russ.).
4. Rakov E.G. *Nanotrubki i fullereny : ucheb. posobiye* [Nanotubes and Fullerenes: Textbook], Moscow: Logos, 2006, 376 p. (In Russ.).
5. Imran Al., AlGarni T.S., Burakova E., Tkachev A., Tugolukov E., Dyachkova T., Rukhov A., Gutnik I., Galunin E. [A new approach to the economic synthesis of multi-walled carbon nanotubes using a Ni/MgO catalyst], *Materials Chemistry and Physics*, 2021, vol. 261, pp. 124234. doi: 10.1016/j.matchemphys.2021.124234
6. Burakova E.A., Besperstova G.S., Neverova M.A., Tkachev A.G., Chapakov N.A., Rukhov A.V. [The effect of heat treatment on the properties of the catalyst for the synthesis of carbon nanotubes], *Vestnik VGUIT* [Bulletin of VSUIT], 2020, vol. 82, no. 1(83), pp. 237-246. (In Russ., abstract in Eng.).
7. Shakhnov V.A., Zinchenko L.A. [Nanotechnological informatics - the direction of development of information technologies], *Informatsionnyye tekhnologii i vychislitel'nyye sistemy* [Information technologies and computing systems], 2012, no. 3, pp. 84-92. (In Russ., abstract in Eng.).
8. Reutova M.V. *PhD Dissertation (Eng.)*, Moscow, 2004. 165 p. (In Russ.).
9. Iakovlev V.Yu., Krasnikov D.V., Khabushev E.M. [et al.]. Artificial neural network for predictive synthesis of single-walled carbon nanotubes by aerosol CVD method, *Carbon*, 2019, vol. 153, pp. 100-103.

10. Imran Al., Burakova E., Tkachev A., Tugolukov E., Dyachkova T. [et al.] Experimental and simulation studies to determine the mechanisms of catalyst formation for the targeted synthesis of carbon nanotubes, *Journal of Nanoparticle Research*, 2021, vol. 23, no. 9. doi: 10.1007/s11051-021-05320-3

11. Burakova E.A. [The concept of managing the technological system for the production of carbon nanotubes], *Transactions of the Tambov State Technical University*, 2022, vol. 28, no. 3, pp. 444-454. doi: 10.17277/vestnik.2022.03.pp.444-454 (In Russ., abstract in Eng.).

Entscheidungsunterstützungssystem bei der Herstellung eines Katalysators für die Synthese von Kohlenstoff-Nanoröhrchen

Zusammenfassung: Es ist eine Methodik zur Entwicklung eines Entscheidungsunterstützungssystems für die Herstellung eines Katalysators vorgestellt, der die Synthese von Kohlenstoffnanoröhren mit festgelegten Parametern ermöglicht. Die auf einem neuen Ansatz zur Verwaltung der Parameter von Nanostrukturen basierende Methodik ermittelt die Daten, die für die Entwicklung eines Informationssystems erforderlich sind, das Entscheidungsunterstützung bei der Herstellung eines Katalysators bietet (bei der Erstellung von Datenbanken, der Festlegung und Lösung des Problems der Optimierung der Bedingungen zur Bildung eines Katalysators, der die Synthese von Nanostrukturen mit bestimmten Parametern ermöglicht; Entwicklung einer Schnittstelle, die die Interaktion des Technologen mit dem Informationssystem gewährleistet). Der Einsatz des entwickelten Entscheidungsunterstützungssystems ermöglicht es, ohne zusätzliche Experimente die Zusammensetzung und Verarbeitungsbedingungen des Katalysators zu ermitteln, die die Synthese von Nanostrukturen mit Parametern gewährleisten, die den angegebenen Parametern am nächsten kommen.

Système d'aide à la décision pour la production de catalyseur de synthèse de nanotubes de carbone

Résumé: Est présentée une méthodologie pour l'élaboration d'un système d'aide à la décision dans la production d'un catalyseur permettant la synthèse des nanotubes de carbone avec des paramètres spécifiques. La méthodologie, basée sur une nouvelle approche de la gestion des paramètres de nanostructures, définit les données nécessaires à la conception d'un système d'information pour soutenir la prise de décision dans la production du catalyseur (lors de la création des bases de données, de la définition et de la résolution du problème d'optimisation des conditions de la formation d'un catalyseur permettant la synthèse de nanostructures avec des paramètres spécifiques, la mise au point d'une interface permettant l'interaction du technologue avec le système d'information). L'utilisation du système d'aide à la décision mis au point permet d'établir la composition et les conditions de traitement du catalyseur sans effectuer des expériences supplémentaires, ce qui permet d'obtenir la synthèse des nanostructures avec les paramètres les plus proches de ceux spécifiés.

Авторы: *Буракова Елена Анатольевна* – кандидат технических наук, доцент кафедры «Техника и технологии производства нанопродуктов»; *Туголуков Евгений Николаевич* – доктор технических наук, профессор кафедры «Техника и технологии производства нанопродуктов»; *Дьячкова Татьяна Петровна* – доктор химических наук, профессор кафедры «Техника и технологии производства нанопродуктов», ФГБОУ ВО «ТГТУ», Тамбов, Россия.