

УДК 531.8:621.785.5:004.032.26
DOI: 10.7868/S25000640260305

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ОПТИМИЗАЦИИ И УСКОРЕНИЯ ПРОЕКТИРОВАНИЯ DLC-ПОКРЫТИЙ В УСЛОВИЯХ ДЕФИЦИТА ДАННЫХ С ПОМОЩЬЮ ПОПАРНЫХ СРАВНЕНИЙ БОЛЬШИМИ ЯЗЫКОВЫМИ МОДЕЛЯМИ И ТОПОЛОГИЧЕСКОГО РАЗРЕШЕНИЯ КОНФЛИКТОВ

© 2026 г. И.И. Гребнев¹, С.А. Гуда¹, И.В. Колесников²,
академик В.И. Колесников²

Аннотация. Алмазоподобные углеродные покрытия, получаемые методом магнетронного распыления, востребованы в промышленности благодаря превосходным трибомеханическим свойствам. Однако оптимизация параметров их газофазного синтеза представляет собой сложную задачу «черного ящика» со смешанным пространством параметров (напряжение смещения, температура подложки, концентрация легирующего металла) в условиях острого дефицита данных («холодный старт»). Для преодоления этих ограничений разработан метод активной оптимизации на основе обучения предпочтениям, привлекающий большие языковые модели (LLM) в качестве экспертов для попарного сравнения. Вместо предсказания абсолютных свойств материалов подход задействует LLM в рамках парадигмы генерации, дополненной поиском, используя априорные физические знания о процессах осаждения (влияние напряжения смещения на sp^3 -гибридизацию, легирования – на термическую стабильность) для определения качественных отношений предпочтений. Присущие LLM-оценкам циклические противоречия ($A > B > C > A$) устраняются с помощью модели Брэдли – Терри с якорной регуляризацией, реализующей топологическое разрешение конфликтов на ориентированных графах, ребра которых взвешены по откалиброванным логитам правдоподобия токенов. Экспериментальная валидация на бенчмарке из 16 реальных наборов данных газофазного осаждения (17 выборок) показала, что интеграция топологического консенсуса в процесс принятия решений LLM существенно повышает точность предсказаний и ускоряет проектирование материалов при дефиците экспериментальных данных.

Ключевые слова: алмазоподобные углеродные покрытия, большие языковые модели, обучение на предпочтениях, минимальное разрывающее множество дуг, оптимизация «черного ящика».

DEVELOPMENT OF A METHODOLOGY FOR OPTIMIZING AND ACCELERATING THE DESIGN OF DLC COATINGS UNDER DATA SCARCITY USING PAIRWISE COMPARISONS BY LARGE LANGUAGE MODELS AND TOPOLOGICAL CONFLICT RESOLUTION

I.I. Grebnev¹, S.A. Guda¹, I.V. Kolesnikov², Academician RAS V.I. Kolesnikov²

Abstract. Diamond-like carbon coatings deposited by magnetron sputtering are highly demanded in industry due to their superior tribomechanical properties. However, optimizing their vapor-phase synthesis parameters represents a challenging black-box problem with a mixed parameter space (bias voltage, substrate temperature, and metal dopant concentration) under acute data scarcity (a “cold-start” scenario). To overcome

¹ Институт математики, механики и компьютерных наук Южного федерального университета (Institute of Mathematics, Mechanics and Computer Sciences of Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russian Federation), Российская Федерация, 344090, г. Ростов-на-Дону, ул. Мильчакова, 8а, e-mail: gre@sfsu.ru

² Ростовский государственный университет путей сообщения (Rostov State Transport University, Rostov-on-Don, Russian Federation), Российская Федерация, 344038, г. Ростов-на-Дону, пл. Ростовского Стрелкового Полка Народного Ополчения, 2

these limitations, we developed a preference-learning-based active optimization method that leverages large language models (LLMs) as experts for pairwise comparison. Rather than predicting absolute material properties, our approach utilizes LLMs within a retrieval-augmented generation paradigm, employing prior physical knowledge of deposition processes (e.g., the influence of bias voltage on sp^3 -hybridization and of doping on thermal stability) to determine qualitative preference relations. The cyclic inconsistencies inherent in LLM evaluations ($A > B > C > A$) are resolved using an anchor-regularized Bradley-Terry model that implements topological conflict resolution on directed graphs, the edges of which are weighted by calibrated token likelihood logits. Experimental validation on a benchmark of 16 real-world vapor deposition datasets (comprising 17 samples) demonstrates that integrating topological consensus into the LLM decision-making process significantly improves prediction accuracy and accelerates materials design under experimental data scarcity.

Keywords: diamond-like carbon coatings, large language models, preference learning, minimum feedback arc set, black-box optimization.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ (REFERENCES)

1. Беляк О.А., Колесников В.И., Колесников И.В., Аникина Е.Д., Политыко К.Н., Четверик М.М. 2026. Структура, механические и трибологические свойства дисперсно-наполненной эпоксидной смолы. *Наука Юга России*. 22(1): 8–17. doi: 10.7868/S25000640260102
Belyak O.A., Kolesnikov V.I., Kolesnikov I.V., Anikina E.D., Polityko K.N., Chetverik M.M. 2026. [Structure, mechanical and tribological properties of a dispersion-filled epoxy resin]. *Nauka Yuga Rossii*. 22(1): 8–17. (In Russian). doi: 10.7868/S25000640260102
2. Liu T., Astorga N., Seedat N., van der Schaar M. 2024. Large language models to enhance bayesian optimization. *arXiv*. URL: <https://arxiv.org/abs/2402.03921>. doi: 10.48550/arXiv.2402.03921
3. Yuan X., Chen Z., Zhang J., Xiong H., Ye N., Li Y., Gu Q. 2026. Unleashing LLMs in Bayesian optimization: preference-guided framework for scientific discovery. *arXiv*. Available at: <https://arxiv.org/abs/2605.17976>. doi: 10.48550/arXiv.2605.17976
4. Bradley R.A., Terry M.E. 1952. Rank analysis of incomplete block designs: I. The method of paired comparisons. *Biometrika*. 39(3/4): 324–345. doi: 10.2307/2334029
5. Ignatenko T., Kondrashov K., Cox M., de Vries B. 2025. On preference learning based on sequential Bayesian optimization with pairwise comparison. *Artificial Intelligence*. 348: 104400. doi: 10.1016/j.artint.2025.104400
6. Younger D.H. 1963. Minimum feedback arc sets for a directed graph. *IEEE Transactions on Circuit Theory*. 10(2): 238–245. doi: 10.1109/TCT.1963.1082116
7. Brin S., Page L. 1998. The anatomy of a large-scale hypertextual web search engine. *Computer Networks and ISDN Systems*. 30(1–7): 107–117. doi: 10.1016/S0169-7552(98)00110-X
8. Kang X., Deng X. 2020. Design and analysis of computer experiments with quantitative and qualitative inputs: a selective review. *WREs Data Mining and Knowledge Discovery*. 10(3): e1358. doi: 10.1002/widm.1358
9. Lekivetz R., Jones B. 2015. Fast flexible space-filling designs for nonrectangular regions. *Quality and Reliability Engineering International*. 31(5): 829–837. doi: 10.1002/qre.1640
10. Joseph V.R., Gul E., Ba S. 2015. Maximum projection designs for computer experiments. *Biometrika*. 102(2): 371–380. doi: 10.1093/biomet/asv002
11. Jiang J., Huang H., Wang Q., Zhu W., Hao J., Liu W. 2014. Comparative study on structure and properties of titanium/silicon mono- and co-doped amorphous carbon films deposited by mid-frequency magnetron sputtering. *Surface and Interface Analysis*. 46(3): 139–144. doi: 10.1002/sia.5361
12. Guo Y., Guo P., Sun L., Li X., Ke P., Li Q., Wang A. 2019. Tribological properties of Ti-doped diamond-like carbon

- coatings under dry friction and PAO oil lubrication. *Surface and Interface Analysis*. 51(3): 361–370. doi: 10.1002/sia.6588
13. Wang S., Liao Z., Liu Y., Liu W. 2015. The tribological behaviors of three films coated on biomedical titanium alloy by chemical vapor deposition. *Journal of Materials Engineering and Performance*. 24(11): 4462–4474. doi: 10.1007/s11665-015-1732-6
 14. Jang Y.-J., Kim J.-I., Lee W., Kim J. 2021. Tribological properties of multilayer tetrahedral amorphous carbon coatings deposited by filtered cathodic vacuum arc deposition. *Friction*. 9(5): 1292–1302. doi: 10.1007/s40544-020-0476-y
 15. Zhang X., Yi Z., Zhang T., Wu X., Wang G., Zhang H. 2002. Wear performance of tetrahedral amorphous carbon films prepared by filtered cathodic vacuum arc technique. *Surface and Coatings Technology*. 161(2–3): 120–124. doi: 10.1016/S0257-8972(02)00514-5
 16. Cui J., Qiang L., Zhang B., Ling X., Yang T., Zhang J. 2012. Mechanical and tribological properties of Ti-DLC films with different Ti content by magnetron sputtering technique. *Applied Surface Science*. 258(12): 5025–5030. doi: 10.1016/j.apsusc.2012.01.072
 17. Bootkul D., Saenphinit N., Supsermpol B., Aramwit C., Intarasiri S. 2014. Synthesis of Ti-doped DLC film on SS304 steels by Filtered Cathodic Vacuum Arc (FCVA) technique for tribological improvement. *Applied Surface Science*. 310: 293–299. doi: 10.1016/j.apsusc.2014.04.053
 18. Cao H., Ye X., Li H., Qi F., Wang Q., Ouyang X., Zhao N., Liao B. 2021. Microstructure, mechanical and tribological properties of multilayer Ti-DLC thick films on Al alloys by filtered cathodic vacuum arc technology. *Materials and Design*. 198: 109320. doi: 10.1016/j.matdes.2020.109320
 19. Ouyang J.H., Sasaki S. 2005. Friction and wear characteristics of a Ti-containing diamond-like carbon coating with an SRV tester at high contact load and elevated temperature. *Surface and Coatings Technology*. 195(2–3): 234–244. doi: 10.1016/j.surfcoat.2004.06.041
 20. Yu X., Zhang X., Wang C., Hua M., Wang L. 2004. A tribological study of tetrahedral amorphous carbon films prepared by filtered cathodic vacuum arc technique. *Vacuum*. 75(3): 231–236. doi: 10.1016/j.vacuum.2004.03.003
 21. Iyer A., Kaskela A., Novikov S., Etula J., Liu X., Kauppinen E.I., Koskinen J. 2016. Effect of tetrahedral amorphous carbon coating on the resistivity and wear of single-walled carbon nanotube network. *Journal of Applied Physics*. 119(18): 185306. doi: 10.1063/1.4948672
 22. Wang Y., Li H., Ji L., Liu X., Wu Y., Lv Y., Fu Y., Zhou H., Chen J. 2012. Synthesis and characterization of titanium-containing graphite-like carbon films with low internal stress and superior tribological properties. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 45(29): 295301. doi: 10.1088/0022-3727/45/29/295301
 23. Dai W., Shi Y., Wang Q., Wang J. 2024. Tetrahedral amorphous carbon coatings with Al incorporation deposited by a hybrid technique of sputtering and arc evaporation. *Coatings*. 14(1): 142. doi: 10.3390/coatings14010142
 24. Zhang B., Zhang L., Wu S., Peng X., Ouyang X., Liao B., Zhang X. 2025. A study on the structure and properties of NiCr-DLC films prepared by filtered cathodic vacuum arc deposition. *Coatings*. 15(10): 1136. doi: 10.3390/coatings15101136
 25. Bouabibsa I., Lamri S., Sanchette F. 2018. Structure, mechanical and tribological properties of Me-doped Diamond-Like Carbon (DLC) (Me = Al, Ti, or Nb) hydrogenated amorphous carbon coatings. *Coatings*. 8(10): 370. doi: 10.3390/coatings8100370
 26. Huang Y., Li J., Wang X., Liu X., Li H., Ren P., Sun C. 2023. Tribological properties and corrosion resistance of multilayer a-C:H:Ti films at different target currents. *Metals*. 13(7): 1274. doi: 10.3390/met13071274
 27. Platt J.C. 2000. Probabilities for SV machines. In: *Advances in Large Margin Classifiers*. Cambridge, London, MIT Press: 61–74.

Поступила 28.05.2026

Принята 31.07.2026