

Е.А. ЛИСЕНКОВ, О.В. КОЗЛОВ

Чорноморський національний університет імені Петра Могили
(Вул. Десантників, 68, Миколаїв 54003; e-mail: ealysenkov@ukr.net)**ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕМПЕРАТУРИ
ПЛАВЛЕННЯ ПОЛІМЕРНИХ НАНОКОМПОЗИТІВ
З ВИКОРИСТАННЯМ НЕЧІТКО-ЛОГІЧНОГО
ПІДХОДУ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ**УДК 539.2:541.64:
546.26:678.742

У роботі запропоновано нечітко-логічний підхід із застосуванням штучного інтелекту для прогнозування температури плавлення полімерних нанокомпозитів на основі полімолочної кислоти й вуглецевих нанотрубок (ВНТ). Розроблено модель нечіткого висновку типу Мамдані, в якій ступінь кристалічності, концентрацію та діаметр ВНТ використано як вхідні параметри. Побудована модель дала змогу відтворити нелінійний характер взаємозв'язку між структурними параметрами й термічними властивостями нанокомпозитів і продемонструвала хорошу узгодженість з експериментальними калориметричними даними. Отримані поверхні відгуку виявили існування оптимального діапазону концентрацій ВНТ, в якому реалізується їхній максимальний нуклеаційний ефект. Прогностична здатність моделі підтверджується значенням скоригованого коефіцієнта детермінації $R^2 = 0,86$, що свідчить про перспективність застосування нечіткої логіки для моделювання полімерних нанокомпозитних систем.

Ключові слова: полімолочна кислота, полімерні нанокомпозити, вуглецеві нанотрубки, температура плавлення, штучний інтелект, моделі нечіткої логіки, прогнозування властивостей.

1. Вступ

Полімерні нанокомпозити, наповнені вуглецевими наноструктурами, становлять значний науковий і технологічний інтерес завдяки своїм покращеним механічним, електричним і тепловим властивостям [1, 2]. Серед різних нанонаповнювачів вуглецеві нанотрубки (ВНТ) вважаються особливо перспективними завдяки їхньому високому аспектно-му співвідношенню, винятковій механічній міцності та високій теплопровідності. Включення ВНТ у полімерні матриці дає змогу формувати багатофункціональні матеріали для застосування в електроніці, системах накопичення енергії, сенсорах, біомедичній інженерії та адитивному виробництві [3]. Водночас дедалі більше уваги приділяють біорозкладним полімерним матрицям, особливо полі-

молочній кислоті (ПМК), завдяки її відновлюваному походженню, біосумісності, біорозкладності та сприятливим характеристикам обробки [4]. Нанокомпозити на основі ПМК, армовані ВНТ, становлять перспективний клас матеріалів з покращеними функціональними характеристиками порівняно з чистою ПМК [5].

Одним із ключових наукових і практичних завдань у розробці нанокомпозитів ПМК/ВНТ є прогнозування та контроль їхніх фізико-хімічних і теплофізичних властивостей [6]. Здатність проектувати матеріали зі заздалегідь визначеними характеристиками є критично важливою для сучасного матеріалознавства, оскільки вона значно зменшує кількість дорогих експериментальних ітерацій і прискорює цикл розробки передових функціональних матеріалів. Особливу увагу приділяють тепловим характеристикам, зокрема температурі плавлення нанокомпозитної системи. Температура плавлення є важливим параметром, що визначає умови обробки, термостійкість, стабільність розмірів, поведінку під час кристалізації та експлуатаційну надійність полімерних виробів [7]. У таких технологіях, як екструзія, лиття під ти-

Цитування: Лисенков Е.А., Козлов О.В. Дослідження температури плавлення полімерних нанокомпозитів з використанням нечітко-логічного підходу штучного інтелекту. *Укр. фіз. журн.* **71**, № 9, 749 (2026).

© Видавець ВД "Академперіодика" НАН України, 2026. Стаття опублікована за умовами відкритого доступу за ліцензією CC BY-NC-ND (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

ISSN 2071-0194. *Укр. фіз. журн.* 2026. Т. 71, № 9

ском і адитивне виробництво, точне прогнозування поведінки під час плавлення необхідне для оптимізації режимів обробки та запобігання термічній деградації полімерної матриці [8].

Температура плавлення ПМК/ВНТ нанокомпозитів залежить від багатьох взаємопов'язаних факторів, включно зі ступенем кристалічності полімерної матриці, концентрацією наповнювача й геометричними характеристиками ВНТ [9, 10]. Вуглецеві нанотрубки можуть одночасно сприяти кристалізації, діючи як зародкоутворювачі, та обмежувати рухливість полімерного ланцюга через міжфазні взаємодії [11]. У результаті загальна теплова поведінка таких систем стає дуже нелінійною та складною для опису за допомогою звичайних аналітичних моделей.

Незважаючи на численні експериментальні дослідження, наразі не існує універсальної моделі, здатної одночасно враховувати комбінований вплив ступеня кристалічності, концентрації ВНТ і їхнього діаметра на температуру плавлення нанокомпозитів на основі ПМК. Останніми роками методи штучного інтелекту (ШІ) та підходи, керовані даними, стають дедалі важливішими інструментами в полімерній науці та матеріалознавстві [12, 13]. Алгоритми машинного навчання активно використовуються для прогнозування механічних, теплових, реологічних та електричних властивостей полімерних композитів, оптимізації складу матеріалів, ідентифікації прихованих залежностей у багатовимірних наборах даних і прискорення відкриття матеріалів [14, 15]. Моделі на основі ШІ особливо перспективні для систем, що характеризуються нелінійними взаємодіями між численними змінними, де класичні аналітичні методи стають недостатніми. Навчаючись на експериментальних даних, такі моделі можуть встановлювати функціональні зв'язки між параметрами обробки, структурними характеристиками та кінцевими властивостями матеріалу [16].

Однак, традиційні методи машинного навчання зазвичай вимагають великих експериментальних масивів даних, які часто недоступні в дослідженнях полімерних нанокомпозитів. Моделювання на основі нечіткої логіки продемонструвало значний потенціал у розв'язанні задач матеріалознавства, що передбачають погано формалізовані залежності й частково невизначені експериментальні дані [17]. У полімерних композитних системах методи

нечіткого висновку дають змогу інтегрувати гетерогенні параметри в єдину прогностичну структуру та оцінювати властивості матеріалу, навіть коли точні аналітичні зв'язки невідомі. Це створює сприятливі умови для побудови прогностичних моделей, здатних описувати теплову поведінку нанокомпозитних систем з високою гнучкістю та достатньою точністю [18].

Таким чином, ця робота присвячена розроблянню моделі нечіткої логіки для прогнозування температури плавлення нанокомпозитів ПМК/ВНТ як функції ступеня кристалічності матриці й концентрації та діаметра нанотрубок. Очікується, що таке моделювання сприятиме оптимізації рецептур нанокомпозитів і покращить розуміння складних взаємодій, що регулюють теплову поведінку полімерних систем, армованих ВНТ.

2. Теоретичний підхід до прогнозування температури плавлення

2.1. Підхід на основі нечіткої логіки для моделювання властивостей полімерних нанокомпозитів

Основною проблемою моделювання та прогнозування властивостей полімерних нанокомпозитів є обмежена доступність експериментальних даних, що знижує ефективність традиційного машинного навчання та методів глибоких нейронних мереж в умовах малої кількості даних [12]. Тому значна увага зосереджена на методах нечіткої логіки, здатних працювати в умовах невизначеності й неповної експериментальної інформації [17]. Нечіткі моделі можуть зберігати задовільну прогностичну здатність навіть для відносно невеликих наборів даних [19]. Крім того, системи нечіткого висновку мають високу інтерпретованість, оскільки їхня логіка ухвалення рішень може бути представлена за допомогою зрозумілих лінгвістичних правил ЯКЩО–ТОДІ, такі системи також стійкі до шуму в експериментальних вимірюваннях [20, 21].

У цьому дослідженні розроблено інтелектуальну модель для прогнозування температури плавлення полімерних нанокомпозитів на основі механізму нечіткого висновку типу Мамдані [22]. Простори входових і виходових параметрів були розділені на відповідні лінгвістичні терміни (ЛТ) зі заздалегідь визначеними функціями на-

лежності (ФН), тоді як базу нечітких правил (БНП) побудовано з використанням експериментально спостережуваних залежностей і відомих фізико-хімічних закономірностей, що регулюють поведінку наноккомпозиту. Завдяки прозорій структурі системи нечіткого висновку, розроблена модель зберігає високу інтерпретованість, відтворюючи складні нелінійні зв'язки між параметрами, що впливають на температуру плавлення полімерного наноккомпозиту.

2.2. Побудова основної логіки моделі нечітких висновків

У запропонованій моделі нечіткої логіки температура плавлення полімерного наноккомпозиту розглядалася як функція трьох ключових параметрів: ступеня кристалічності полімерної матриці χ , концентрації вуглецевих нанотрубок C і їхнього діаметра D . Ці параметри визначають надмолекулярну організацію полімеру і міжфазні взаємодії в системі “матриця–нанонаповнювач”, безпосередньо впливаючи на термодинамічну стабільність і температуру плавлення композиту. Для забезпечення універсальності моделі за різних умов усі вхідні й виходні змінні представлено в нормалізованих відносних одиницях в інтервалі від 0 до 1.

Для побудови моделі нечіткого висновку кожен вхідний параметр поділено на кілька характерних піддоменів, що описуються відповідними лінгвістичними термінами. Ступінь кристалічності полімерної матриці поділено на три піддомени, що відповідають низькому, середньому й високому рівням структурного впорядкування. Такого поділу достатньо для відтворення загального впливу кристалічності на теплову поведінку наноккомпозиту, зберігаючи водночас інтерпретованість бази нечітких правил. На противагу цьому, концентрація вуглецевих нанотрубок потребувала більш детального розбиття через її сильний нелінійний вплив на теплофізичні властивості матеріалу. Діаметр нанотрубки описано за допомогою помірної кількості нечітких піддоменів, достатніх для розмежування різних геометричних масштабів нанонаповнювачів і їхнього впливу на міжфазні взаємодії в полімерній матриці. Виходний параметр, що відповідає температурі плавлення, також поділено на кілька піддоменів, що дало змогу системі нечіткого висновку відтворювати поступові нелі-

нійні переходи в термофізичній реакції полімерного наноккомпозиту.

Базу нечітких правил побудовано відповідно до відомих фізико-хімічних закономірностей, що регулюють полімерні наноккомпозити, наповнені вуглецевими нанотрубками, і на основі тенденцій, виявлених під час аналізу експериментальних даних для системи ПМК/ВНТ [6, 9, 11, 23–29]. У моделі припускалось, що збільшення кристалічності полімерної матриці зумовлює підвищення температури плавлення завдяки вищому рівню упорядкованості макромолекулярної структури й більшій енергії, необхідній для руйнування кристалічної фази. Вплив концентрації нанотрубок визначено як нелінійний: низькі й помірні концентрації покращують кристалізацію та міжфазні взаємодії, що приводить до підвищення температури плавлення, тоді як надмірно високі концентрації сприяють агрегації нанотрубок і структурній гетерогенності, зменшуючи ефект підсилення. Крім того, менші діаметри нанотрубок пов'язані з вищими температурами плавлення через збільшення питомої площі міжфазної поверхні й посилення взаємодії між нанонаповнювачем і полімерною матрицею.

3. Результати та обговорення

3.1. Нечітка модель на основі штучного інтелекту для прогнозування температури плавлення полімерних наноккомпозитів

Нечітка модель типу Мамдані характеризується базою правил, в якій як попередня, так і наступна частини представлені нечіткими пропозиціями, визначеними над відповідними вхідними й виходними змінними [19]. Кожне нечітке правило зазвичай має таку форму:

$$\begin{aligned} &\text{якщо} \\ &“x_1 \in A_1^i”, \text{ та } \dots, \text{ та } “x_n \in A_n^i”, \\ &\text{тоді} \\ &“y \in B_i”, \end{aligned} \quad (1)$$

де A_1^i і B_i позначають нечіткі множини, пов'язані з відповідними лінгвістичними термінами для вхідних і виходних параметрів. Обчислювальна процедура механізму висновку Мамдані складається з п'яти окремих етапів: створення нечіткості, агрегації, активації правил, накопичення та усереднення нечіткості. Під час створення нечіткості чи-

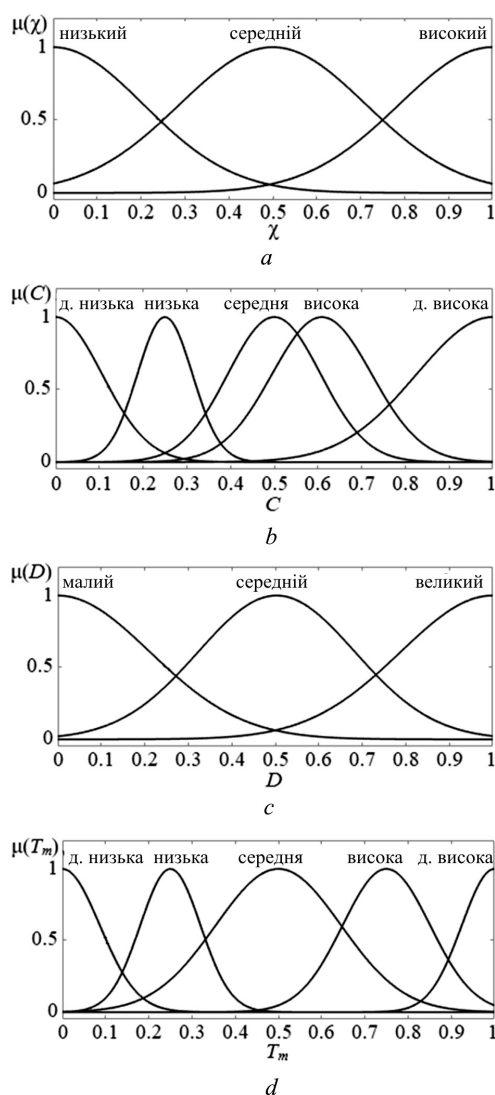


Рис. 1. Означення лінгвістичних термінів для входкових і виходкових змінних у моделі нечітких висновків

ткі входові змінні перетворюються на ступені належності за допомогою попередньо визначених функцій належності. На етапі агрегації нечіткі набори попередників готуються та об'єднуються відповідно до структури БНП, формуючи початкове нечітке представлення умов, керованих входовими даними. На етапі активації правил сила спрацювання кожного правила обчислюється шляхом оцінки попередньої частини з використанням мінімального оператора як стандартної t -норми для кон'юнкції. На етапі накопичення внески всіх

активованих правил об'єднуються в єдиний інтегрований нечіткий виходовий набір, зазвичай це робиться з використанням максимального оператора для забезпечення когерентного представлення реакції системи. Нарешті, виконується усунення нечіткості для перетворення виходового нечіткого набору в чітке числове значення, найчастіше з використанням методу центроїда (центру тяжіння) [22].

Завдяки своїй прозорій структурі на основі правил і здатності відтворювати складні нелінійні залежності в умовах невизначеності, нечітка модель Мамдані особливо придатна для задач інтелектуального моделювання, що використовують обмежені та частково невизначені експериментальні набори даних.

Під час розроблення моделі на основі основної логіки, викладеної в підрозділі 2.2.2, для кожної входової та виходової змінної обрано такі лінгвістичні терміни (ЛТ): три ЛТ для ступеня кристалічності полімерної матриці χ : низький, середній, високий; п'ять ЛТ для концентрації вуглецевих нанотрубок C : дуже низька (д. низька), низька, середня, висока, дуже висока (д. висока); три ЛТ для діаметра нанотрубок D : малий, середній, великий; п'ять ЛТ для температури плавлення T_m : дуже низька (д. низька), низька, середня, висока, дуже висока (д. висока). Для всіх лінгвістичних термінів усіх (входових і виходових) змінних обрано гаусівські функції належності μ 1-го типу. Для першої входової змінної χ ця функція $\mu(\chi)$ описується виразом

$$\mu(\chi) = \exp \left[-\frac{(\chi - b)^2}{2a^2} \right], \quad (2)$$

де a та b – параметри налаштування ФН. Вигляд ЛТ входових і виходових змінних із налаштованими параметрами їхні ФН представлено на рис. 1.

Використовуючи представлені на рис. 1 ЛТ і на основі вищезазначених фізичних представлень, сформовано повну базу нечітких правил моделі типу Мамдані, що описують взаємодію між ступенем кристалічності, концентрацією та діаметром нанотрубок. Такий підхід дав змогу врахувати складний нелінійний характер впливу структурних параметрів на температуру плавлення полімерного наноккомпозиту й надати фізично обґрунтований опис системи навіть за обмеженої кількості експериментальних даних.

Синтезована база правил представлена у скороченій матричній формі (для зручності) в табл. 1. Ця БНП складається з 45 правил, кожне з яких задане у вигляді виразу (1). У свою чергу, внутрішні комірки табл. 1 містять ЛТ виходової змінної T_m , які є відповідними наслідками. Наприклад, перше правило у повній формі відповідно до табл. 1 задається таким виразом:

якщо “ χ – низький”, та “ C – дуже низька”,
та “ D – малий”, тоді “ T_m – дуже низька”. (3)

3.2. Результати теоретичного моделювання та їхня фізична інтерпретація

Отримані поверхні відгуку (рис. 2), побудовані на основі системи нечітких правил типу Мамдані для композитів ПМК/ВНТ, демонструють складний нелінійний характер зв'язку між ступенем кристалічності полімерної матриці χ , концентрацією C і діаметром D вуглецевих нанотрубок і температурою плавлення композиту T_m . Аналіз сформованих поверхонь показує, що запропонована нечітка модель адекватно відтворює основні фізичні закономірності, характерні для полімерних нанокомпозитів на основі ПМК, отриманих методом розплавленого змішування [23–29].

Таблиця 1. База правил для моделі нечітких висновків

χ	C				
	д. низька	низька	середня	висока	д. висока
D малий					
Низький	Д. низька	Середня	Середня	Середня	Низька
Середній	Д. низька	Середня	Висока	Висока	Середня
Високий	Д. низька	Висока	Д. висока	Д. висока	Висока
D середній					
Низький	Д. низька	Низька	Середня	Середня	Низька
Середній	Д. низька	Середня	Середня	Висока	Середня
Високий	Д. низька	Середня	Висока	Висока	Середня
D великий					
Низький	Д. низька	Д. низька	Низька	Низька	Д. низька
Середній	Д. низька	Низька	Середня	Середня	Низька
Високий	Д. низька	Середня	Середня	Висока	Середня

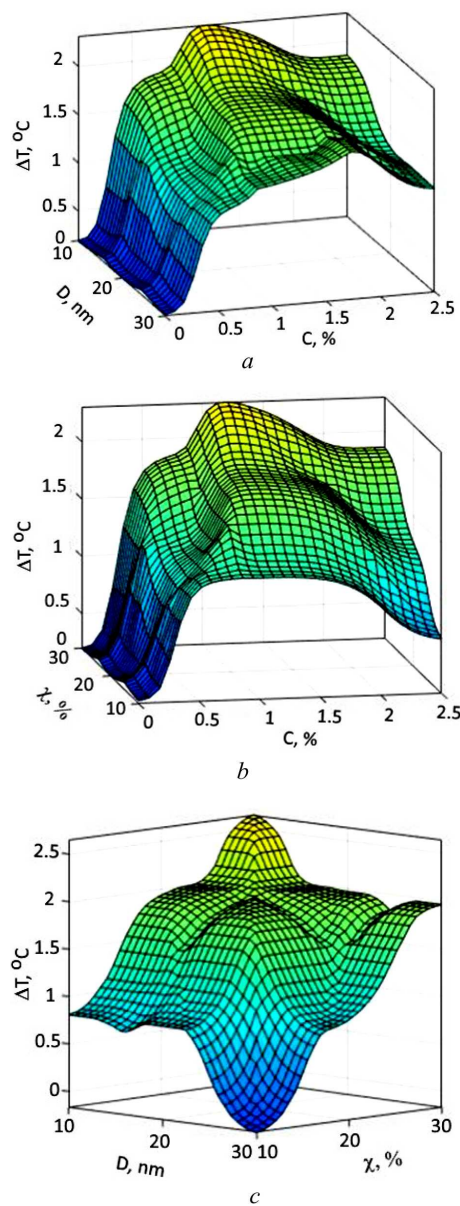


Рис. 2. Характерні поверхні залежностей $\Delta T = \Delta T(C, D)$ (a), $\Delta T = \Delta T(\chi, C)$ (b) і $\Delta T = \Delta T(\chi, D)$ (c) для полімерних нанокомпозитів

Поверхня $\Delta T = f(\chi, D)$ характеризується переважно монотонним характером зміни температури плавлення (рис. 2, a). Зі збільшенням кристалічності χ спостерігається поступове збільшення T_m , що узгоджується з класичними уявленнями про термодинамічну стабільність кристалічної фази полімеру. Збільшення частки впорядкованих

областей у структурі ПМК зумовлює формування досконаліших пластинчастих структур, руйнування яких потребує більшої теплової енергії. У межах сконструйованої поверхні цей ефект проявляється у вигляді висхідного градієнта температури плавлення вздовж осі кристалічності. Водночас спостерігається чіткий вплив діаметра нанотрубок D . Для систем з меншим діаметром ВНТ температура плавлення T_m вища, ніж для композитів з більшими нанотрубками. Така поведінка пояснюється збільшенням питомої поверхні наноаповнювача зі зменшенням діаметра ВНТ, результатом чого є збільшення міжфазної взаємодії між полімерною матрицею та нанотрубками [30]. У результаті ефективність обмеження сегментарної рухливості макроланцюгів ПМК зростає, а кристалічна структура полімеру стабілізується. Водночас, характер поверхні вказує на те, що вплив діаметра D менш виражений, ніж вплив ступеня кристалічності χ , що добре узгоджується з експериментальними даними для систем ПМК/ВНТ, в яких зміни температури плавлення зазвичай не перевищують 0,5–2 °C [23, 26, 29].

Поверхня $\Delta T = f(C, D)$ відображає найскладніший і фізично значущий характер зміни температури плавлення (рис. 2, *b*). У центральній області поверхні спостерігається локальний максимум, що відповідає малим діаметрам нанотрубок і помірним концентраціям ВНТ. Така форма поверхні вказує на існування оптимальної області вмісту наноаповнювача, в якій зародкоутворювальний ефект ВНТ є максимальним. Введення невеликої кількості нанотрубок у матрицю ПМК сприяє утворенню додаткових центрів кристалізації, що прискорює впорядкування макромолекулярних ланцюгів і зумовлює часткове підвищення температури плавлення [24, 27, 29]. Найбільш виражений ефект спостерігається за концентрацій 1–1,5%, що повністю узгоджується з експериментальними даними ДСК [26]. Однак подальше збільшення концентрації ВНТ зумовлює поступове зниження температури плавлення, що проявляється у вигляді пониження поверхні з високими значеннями C . Така поведінка може бути пов'язана з агрегацією нанотрубок і погіршенням їхньої дисперсії в полімерній матриці. За високих концентрацій ВНТ зростає ймовірність утворення локальних агломератів, які виступають структурними дефектами й перешкоджають формуванню ре-

гулярної кристалічної морфології ПМК [24, 28]. Крім того, це може супроводжуватися локальним обмеженням дифузійної рухливості макроланцюгів під час кристалізації, що знижує ефективність зародження [29]. Збільшення діаметра нанотрубок також спричиняє зниження температури плавлення, оскільки зі зменшенням питомої площі поверхні ВНТ міжфазна взаємодія з полімером послаблюється та зменшується їхня здатність виступати центрами кристалізації.

Поверхня $\Delta T = f(\chi, C)$ також має виражений нелінійний характер (рис. 2, *c*). Зі збільшенням ступеня кристалічності χ температура плавлення T_m закономірно зростає, що підтверджує вирішальну роль надмолекулярної організації ПМК у формуванні теплових властивостей композиту [25]. Водночас залежність від концентрації ВНТ C має екстремум. У діапазоні низьких і помірних концентрацій спостерігається підвищення температури плавлення, тоді як подальше збільшення вмісту ВНТ супроводжується поступовим зменшенням T_m . Така форма поверхні свідчить про конкуренцію двох фізичних механізмів. З одного боку, нанотрубки виконують функцію ефективних центрів гетерогенної кристалізації, сприяючи формуванню більш впорядкованої структури ПМК [27, 29]. З іншого боку, надлишок ВНТ може викликати формування неоднорідної морфології композиту, виникнення локальних дефектів пакування макромолекул і часткового порушення регулярності кристалічної структури. Саме тому температура плавлення досягає максимального значення лише в певному діапазоні концентрацій нанотрубок.

Загалом, утворені поверхні відгуку підтверджують, що температура плавлення композитів ПМК/ВНТ визначається складною взаємодією між ступенем кристалічності полімерної матриці, геометричними характеристиками нанотрубок і їхньою концентрацією. У рамках нечіткої моделі Мамдані стало можливим не лише узагальнити експериментальні тенденції, але й відобразити фізично обґрунтований нелінійний характер впливу структурних параметрів на теплові властивості нанокомпозитів. Особливо важливо, щоб модель адекватно відтворювала існування оптимальної концентрації вуглецевих нанотрубок, за якої ефект нуклеації максимальний без значного розвитку процесів агрегації.

3.3. Порівняння між прогнозами моделі й експериментальними даними

Розроблена база правил і вибрані параметри лінгвістичних функцій належності забезпечили достатньо високу прогностичну точність моделі на основі штучного інтелекту. Ефективність системи нечіткого висновку Мамдані, що використовується для прогнозування зміни температури плавлення в нанокомпозитах ПМК/ВНТ, представлена на рис. 3. Рисунок демонструє чітку позитивну кореляцію між значеннями ΔT , прогнозованими моделлю, та експериментально отриманими в роботах [6, 9, 11, 23–29]. Більшість експериментальних точок розташована близько до лінії регресії, що вказує на гарну відповідність між нечіткою моделлю та експериментальними даними ДСК у досліджуваному діапазоні параметрів. Отриманий скоригований коефіцієнт детермінації ($\text{Adj. } R^2 = 0,86$) підтверджує, що модель адекватно відтворює основні закономірності, що визначають теплову поведінку систем ПМК/ВНТ.

Водночас спостерігається певний розкид експериментальних точок відносно лінії регресії, особливо в області вищих значень ΔT . Такі відхилення є очікуваними для полімерних нанокомпозитних систем і можуть бути пов'язані з кількома фізичними факторами, які важко явно описати в рамках спрощеної моделі нечітких висновків. Зокрема, на поведінку плавлення композитів ПМК/ВНТ сильно впливає локальна гетерогенність дисперсії нанотрубок, часткова агрегація ВНТ, зміни в морфології кристалів і відмінності в міжфазних взаємодіях між полімерною матрицею та нанонаповнювачем [31]. Крім того, поведінка кристалізації ПМК дуже чутлива до термічної передісторії та умов обробки, що також може збільшувати експериментальну невизначеність [6, 32].

Однак загальна тенденція, відтворена моделлю, вказує на те, що підхід нечіткої логіки успішно фіксує нелінійний зв'язок між кристалічністю, концентрацією ВНТ, діаметром нанотрубок і виходовою зміною температури плавлення. Отримана точність прогнозування свідчить про те, що розроблена нечітка модель Мамдані може вважатися ефективним інструментом для опису складних взаємозв'язків між структурою та властивостями

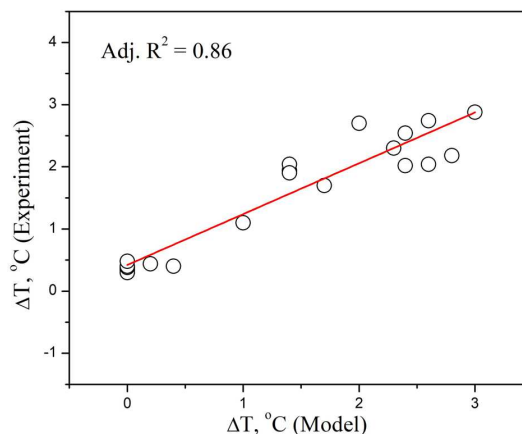


Рис. 3. Порівняння експериментальних значень T_m і значень T_m , прогнозованих за допомогою моделі нечітких висновків

в нанокомпозитах ПМК/ВНТ, особливо в умовах, коли застосування традиційних аналітичних моделей стає складним через багатовимірну й нелінійну природу системи.

4. Висновки

У цій роботі розроблено підхід із застосуванням штучного інтелекту на основі нечіткої логіки для прогнозування температури плавлення полімерних нанокомпозитів ПМК/ВНТ. Запропоновану модель нечітких висновків Мамдані побудовано з використанням експериментально обґрунтованих фізико-хімічних взаємозв'язків між ступенем кристалічності полімерної матриці, концентрацією ВНТ, діаметром нанотрубок і кінцевою тепловою поведінкою нанокомпозитної системи.

Розроблена модель нечітких висновків продемонструвала здатність адекватно відтворювати складні нелінійні залежності, характерні для композитів ПМК/ВНТ. Отримані поверхні відгуку показали, що температура плавлення визначається комбінованим впливом надмолекулярної організації ПМК і структурних характеристик вуглецевих нанотрубок. Збільшення ступеня кристалічності спричинило систематичне підвищення температури плавлення завдяки утворенню більш термодинамічно стабільних кристалічних областей. Водночас вплив концентрації вуглецевих нанотрубок мав виражений нелінійний характер, пов'язаний з конкуренцією між зародкоутворювальним ефектом нанотрубок і структурною гетерогенністю

стю, індукованою агрегацією з підвищеним вмістом наповнювача.

Результати моделювання також показали, що менші діаметри нанотрубок сприяють частковому підвищенню температури плавлення завдяки більшій питомій площі міжфазної поверхні й посиленій міжфазній взаємодії між полімерною матрицею та нанонаповнювачем. Модель нечітких висновків успішно відтворила існування оптимальної області концентрації вуглецевих нанотрубок, що відповідає максимальній ефективності зародкоутворення нанотрубок, без значних ефектів агрегації.

Порівняння між прогнозами моделі й експериментальними даними ДСК продемонструвало хорошу узгодженість зі скоригованим коефіцієнтом детермінації $\text{Adj. } R^2 = 0,86$. Отримана точність прогнозування підтверджує, що розроблена система нечіткого висновку здатна описувати основні закономірності, що визначають теплову поведінку нанокомпозитів ПМК/ВНТ, навіть за умов обмежених експериментальних масивів даних і частково невизначеної інформації.

Тому запропонований підхід до нечіткого моделювання на основі штучного інтелекту може вважатися перспективним інструментом для інтелектуального прогнозування та оптимізації теплофізичних властивостей полімерних нанокомпозитів. Розроблену методологію потенційно можна поширити на інші багатофункціональні полімерні системи, армовані нанорозмірними наповнювачами, і вона може сприяти прискореному проектуванню матеріалів у сучасній полімерній інженерії та нанокомпозитній науці.

1. M. Mubasshira, M.M. Rahman, M.N. Uddin, M. Rhaman, S. Roy, M.S. Sarker. Next-generation smart carbon-polymer nanocomposites: Advances in sensing and actuation technologies. *Processes* **13** (9), 2991 (2025).
2. E.A. Lysenkov, I. Melnyk, L. Bulavin, V. Klepko, N. Lebovka. Structure of polyglycols doped by nanoparticles with anisotropic shape. In: *Physics of Liquid Matter: Modern Problems*. Edited by L. Bulavin, N. Lebovka. *Phys. Liq. Matter: Modern Problems. Springer Proceedings in Phys.* **171**, Springer, 69 (2015).
3. Y.-J. Yim, Y.-H. Yoon, S.-H. Kim, J.-H. Lee, D.-C. Chung, B.-J. Kim. Carbon nanotube/polymer composites for functional applications. *Polymers* **17** (1), 119 (2025).
4. B.M. Campos, J.-B. Jouenne, S. Begrem, P. Jouannot-Chesney, R. Mosrati, J. Bréard. Bio-based and biodegradable polymers for composites: Sustainability, challenges,

- and future perspectives. *J. Environmental Chem. Engin.* **13** (6), 119306 (2025).
5. M.S. Islam, G.M.F. Elahee, Y. Fang, X. Yu, R.C. Advincula, C. Cao. Polylactic acid (PLA)-based multifunctional and biodegradable nanocomposites and their applications. *Composites Part B: Engin.* **112842**, (2025).
 6. E.A. Lysenkov, I.P. Lysenkova. Microstructure and features of thermal behavior of polymer composites based on polylactic acid and carbon nanotubes. *Composit. Theor. Pract.* **2025** (2), 123 (2025).
 7. I.M. Kastiawan *et al.* Effect of melt temperature and holding time on mechanical properties of polypropylene composites bottom ash reinforced. *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.* **988**, 012117 (2020).
 8. A. Gaspar-Cunha, J. Covas, J. Sikora. Optimization of polymer processing: ArReview (Part II-molding technologies). *Materials* **15** (3), 1138 (2022).
 9. E.A. Lysenkov, V.L. Demchenko, M.M. Lazarenko. Structure-properties relationship in polymer nanocomposites based on polylactic acid and carbon nanotubes. *Funct. Mater.* **32** (3), 397 (2025).
 10. B.M. Bharti, N. Sinha. Mechanical and thermal characterization of additively manufactured CNT/PLA nanocomposites. In: *2023 IEEE 23rd International Conference on Nanotechnology (NANO)*, Jeju City, Republic of Korea (2023), p. 833.
 11. E.A. Lysenkov, O.V. Striutskyi, V.L. Demchenko, M.M. Lazarenko. The effect of ultra-low concentrations of aramid nanofibers on the structural and thermal characteristics of polylactic acid-based nanocomposites. *J. Composite Mater.*, 00219983251399800 (2025).
 12. K.P. Logakannan *et al.* A review of artificial intelligence (AI)-based applications to nanocomposites. *Composites Part A: Appl. Sci. Manufact.* **197**, 109027 (2025).
 13. T. Long, Q. Pang, Y. Deng, X. Pang, Y. Zhang, R. Yang, C. Zhou. Recent progress of artificial intelligence application in polymer materials. *Polymers* **17** (12), 1667 (2025).
 14. Z. Shahroodi *et al.* Data-driven prediction of mechanical properties in recycled fibre-reinforced polymer composites: Integrating machine learning with material-processing feature importance analysis. *J. Mater. Res. Techn.* **41**, 687 (2026).
 15. M. Karuppusamy, R. Thirumalaisamy, S. Palanisamy, S. Nagamalai, E.E.S. Massoud, N. Ayrilmis. A review of machine learning applications in polymer composites: advancements, challenges, and future prospects. *J. Mater. Chem. A* **13**, 16290 (2025).
 16. V.G. Kamble. A multiscale review of magnetic permeability in polymer composites: Theory, simulation, and machine learning frontiers. *Next Mater.* **10**, 101450 (2026).
 17. M.A. Ouali *et al.* Lattice constant prediction of ABX_3 and A_2BBX_6 perovskites using autoregressive type 3 fuzzy model optimized by extended Kalman filter. *Comput. Mater. Sci.* **262**, 114397 (2026).
 18. S. Solanki *et al.* Accurate data prediction by fuzzy inference model for adsorption of hazardous azo dyes by novel algal

- doped magnetic chitosan bionanocomposite. *Environm. Res.* **214** (Part 2), 113844 (2022).
19. O.V. Kozlov. Information technology for designing rule bases of fuzzy systems using ant colony optimization. *Intern. J. Comput.* **20** (4), 471 (2021).
 20. O.V. Kozlov, Y.P. Kondratenko, O.S. Skakodub. Information technology for parametric optimization of fuzzy systems based on hybrid grey wolf algorithms. *SN Computer Sci.* **3** (6), 463 (2022).
 21. O. Skakodub, O. Kozlov, Y. Kondratenko. Optimization of linguistic terms' shapes and parameters: fuzzy control system of a quadrotor drone. In: *11th IEEE International Conference on Intelligent Data Acquisition and Advanced Computing Systems: Technology and Applications* (2021), p. 566.
 22. K. Pujaru *et al.* A Mamdani fuzzy inference system with trapezoidal membership functions for investigating fishery production. *Decis. Analyt. J.* **11**, 100481 (2024).
 23. T. Ceregatti, P. Pecharki, W.M. Pachekoski, D. Becker, C. Dalmolin. Electrical and thermal properties of PLA/CNT composite films. *Matéria (Rio J.)* **22** (3), (2017).
 24. C.M. Cobos, L. Garzón, J. López Martínez, O. Fenollar, S. Ferrandiz. Study of thermal and rheological properties of PLA loaded with carbon and halloysite nanotubes for additive manufacturing. *Rapid Prototyp. J.* **25** (4), 738 (2019).
 25. F.U. da Silva, C.B.B. Luna, F.S. da Silva, J.V.M. Barreto, D.P. Schmitz, B.G. Soares, R.M.R. Wellen, E.M. Araújo. Exploring the effect of annealing on PLA/carbon nanotube nanocomposites: In search of efficient PLA/MWCNT nanocomposites for electromagnetic shielding. *Polymers* **17**, 246 (2025).
 26. L. Yang, S. Li, X. Zhou, J. Liu, Y. Li, M. Yang, Q. Yuan, W. Zhang. Effects of carbon nanotube on the thermal, mechanical, and electrical properties of PLA/CNT printed parts in the FDM process. *Synthetic Metals* **253**, 122 (2019).
 27. L. Pan, Q. Lv, N. Xu. Properties and mechanism of anti-static biodegradable polylactic acid/multi-walled carbon nanotube composites. *J. Eng. Fibers Fabrics* **15**, 1 (2020).
 28. T. Vu, P. Nikaeen, W. Chirdon, A. Khattab, D. Depan. Improved weathering performance of poly(lactic acid) through carbon nanotubes addition: Thermal, microstructural, and nanomechanical analyses. *Biomimetics* **5** (4), 61 (2020).
 29. S.H. Park, S.G. Lee, S.H. Kim. Isothermal crystallization behavior and mechanical properties of polylactide/carbon nanotube nanocomposites. *Composites Part A: Appl. Sci. Manufacturing* **46**, 11 (2013).
 30. J. Chen, B. Liu, X. Gao, D. Xu. A review of the interfacial characteristics of polymer nanocomposites containing carbon nanotubes. *RSC Advances* **8**, 28048 (2018).
 31. S. Barrau, C. Vanmansart, M. Moreau, A. Addad, G. Stoclet, J.-M. Lefebvre, R. Seguela. Crystallization behavior of carbon nanotube – polylactide nanocomposites. *Macromolecules* **44** (16), 6496 (2011).
 32. F. De Santis, R. Pantani, G. Titomanlio. Nucleation and crystallization kinetics of poly(lactic acid). *Thermochim. Acta* **522** (1–2), 128 (2011).

Одержано 12.05.26

Переклад українською мовою О. Войтенка

E.A. Lysenkov, O.V. Kozlov

STUDY OF MELTING TEMPERATURE BEHAVIOR OF POLYMER NANOCOMPOSITES USING FUZZY LOGIC-BASED APPROACH OF ARTIFICIAL INTELLIGENCE

This work presents a fuzzy logic-based artificial intelligence approach for predicting the melting temperature of polymer nanocomposites based on polylactic acid and carbon nanotubes (CNTs). A Mamdani-type fuzzy inference model was developed using the degree of crystallinity, carbon nanotube concentration, and nanotube diameter as input parameters. The constructed model reproduced nonlinear relationships between the structural characteristics and the thermal behavior of the nanocomposites and demonstrated good agreement with experimental calorimetric data. The resulting response surfaces revealed the existence of an optimal CNT concentration range associated with the maximum nucleating effect of the nanotubes. The predictive capability of the model was confirmed by an adjusted coefficient of determination $R^2 = 0.86$, indicating the applicability of fuzzy logic methods for intelligent modeling of polymer nanocomposite systems.

Keywords: polylactic acid, polymer nanocomposites, carbon nanotubes, melting temperature, artificial intelligence, fuzzy logic models, property prediction.