

Prediction of Phase Ratio of Conductive Polymer Blends with Impedance Spectroscopy and Artificial Intelligence

Parsa Dadashi¹ and Ghodratollah Hashemi Motlagh^{1,2 *}

1. Advanced Polymer Materials & Processing Lab (APlabUT), School of Chemical Engineering, College of Engineering, University of Tehran, Postal Code: 57131-14399, Tehran, Iran
2. Azmoon Dana Plastic Co., 3rd Sanaat St., Qale-e-Hassan Khan, Postal Code: 31148-14738, Tehran, Iran

Received: 19 May 2025, accepted: 18 October 2025

ABSTRACT

Hypothesis: The combination of impedance spectroscopy with artificial intelligence models can predict the composition of polymer blends containing conductive nanoparticles. Such method with the capabilities of machine learning provides a possibility for more precise and faster analysis for the microstructure of conductive polymer blend composites and can replace traditional time-consuming methods.

Methods: Polypropylene/ poly(ethylene-co-vinyl acetate) blends in composition ratios of 60/40, 50/50, 40/60, 30/70, and 10/90 containing 4% by vol conductive carbon black were prepared by melt-mixing method, and their composition percentages were evaluated using impedance data in the laboratory and through measurement of frequency, real impedance, imaginary impedance, and phase shift parameters. Artificial intelligence models, including Random Forest, k-Nearest Neighbor, Support Vector Regression, Decision Tree, and XGBoost, were used for prediction of the percentage of each polymer in the blend.

Findings: The results show that polypropylene (PP) containing conductive carbon black, compared to poly(ethylene-co-vinyl acetate) (EVA), has a lower impedance level and a higher critical frequency, which is attributed to the higher crystallinity of polypropylene. By blending EVA and PP, the impedance decreased compared to EVA containing carbon black particles. Among the blends, the 60/40 blend had the lowest impedance (40 Ω) and the highest critical frequency (106 Hz), which was attributed to phase refinement in the co-continuous morphology. In addition, the artificial intelligence results showed that the Random Forest model, with a mean absolute error of 4, had better performance than other models in predicting the composition percentages of the blends. This study suggests that combining impedance spectroscopy methods and artificial intelligence can be used as a novel and accurate method for predicting the percentages of each polymer in conductive polymer blends.

Keywords:

artificial intelligence;
impedance spectroscopy
method;
conductive polymer blends;
nanoparticles;
machine learning

(*)To whom correspondence should be addressed.

E-mail: ghmotlagh@ut.ac.ir

Please cite this article using:

Dadashi P., Hashemi Motlagh. Gh., Prediction of Phase Ratio of Conductive Polymer Blends with Impedance Spectroscopy and Artificial Intelligence, *Iran. J. Polym. Sci. Technol. (Persian)*, **38**, 17-30, 2025.

پیش بینی نسبت فاز نانو کامپوزیت آمیخته های پلیمری رسانا با روش طیف سنجی امپدانس و هوش مصنوعی

پارسا داداشی^۱، قدرت اله هاشمی مطلق^{۲،*}

۱- تهران، دانشگاه تهران، دانشکده گان فنی، دانشکده مهندسی شیمی، آزمایشگاه تحقیقاتی مواد و فرایندهای پیشرفته پلیمری،

کد پستی ۵۷۱۳۱-۱۴۳۹۹

۲- تهران، آزمایشگاه آزمون دانا پلاستیک (آزمون، پژوهش، آموزش)، کد پستی ۳۱۱۴۸-۱۴۷۳۸

دریافت: ۱۴۰۴/۲/۲۹، پذیرش: ۱۴۰۴/۷/۲۶

چکیده

فرضیه: ترکیب طیف سنجی امپدانس با مدل های هوش مصنوعی می تواند ترکیب درصد هر یک از فازها در آمیخته پلیمری دارای نانوذرات رسانا را پیش بینی کند. این روش با بهره گیری از قابلیت های یادگیری ماشین، امکان تحلیل دقیق تر و سریع تر ریزساختارهای آمیخته پلیمری پیچیده را فراهم می آورد و می تواند جایگزین روش های قبلی زمان بر و پرهزینه شود.

روش ها: آمیخته های پلی پروپیلن-پلی (اتیلن-*CO*-وینیل استات) در ترکیب درصد ۴۰/۶۰، ۵۰/۵۰، ۶۰/۴۰، ۷۰/۳۰ و ۹۰/۱۰ دارای ۴٪ حجمی دوده رسانا با روش اختلاط مذاب تهیه شدند و ترکیب درصد آنها با استفاده از داده های امپدانس در آزمایشگاه و از راه اندازه گیری پارامترهای بسامد، امپدانس حقیقی، امپدانس موهومی و تغییر فاز ارزیابی شد. مدل های هوش مصنوعی شامل الگوریتم های جنگل تصادفی، K-نزدیک ترین همسایه، رگرسیون بردار پشتیبان، درخت تصمیم و XGBoost به منظور پیش بینی ترکیب درصد اجزا استفاده شدند.

یافته ها: نتایج نشان داد، پلی پروپیلن دارای دوده رسانا، نسبت به پلی (اتیلن-*CO*-وینیل استات)، دارای سطح امپدانس کمتر و بسامد بحرانی بیشتری است. این پدیده به بلورینگی بیشتر پلی پروپیلن نسبت داده می شود. با آمیخته سازی پلی (اتیلن-*CO*-وینیل استات) با پلی پروپیلن، مقدار امپدانس نسبت به پلی (اتیلن-*CO*-وینیل استات) دارای ذرات دوده کاهش یافت. در میان آمیخته ها، آمیخته ۶۰/۴۰ کمترین امپدانس (40Ω) و بیشترین بسامد بحرانی (10^6 Hz) را نشان داد که ناشی از ریزش دگی فاز در شکل شناسی هم پیوسته است. افزون بر این، نتایج هوش مصنوعی نشان داد، مدل جنگل تصادفی ترکیب درصد پلیمر را با میانگین خطای مطلق ۴٪ پیش بینی کرده و عملکرد بهتری نسبت به سایر مدل ها در پیش بینی ترکیب درصد آمیخته ها داشت. این مطالعه پیشنهاد می کند، ترکیب روش های طیف سنجی امپدانس و هوش مصنوعی می تواند به عنوان روشی نوین و دقیق برای ارزیابی ترکیب درصد آمیخته های پلیمری رسانا به کار گرفته شود.

واژه های کلیدی

هوش مصنوعی،
روش طیف سنجی امپدانس
الکتریکی،
آمیخته های پلیمری رسانا،
نانوذرات،
یادگیری ماشین

* مسئول مکاتبات، پیام نگار:

ghmotlagh@ut.ac.ir

مقدمه

نانوکامپوزیت‌های پلیمری رسانا به دلیل قابلیت‌های متنوع و عملکردهای ویژه، همچنان مورد توجه گسترده پژوهشگران و صنعتگران قرار دارند [۱، ۲]. با توجه به اهمیت رسانندگی الکتریکی در این مواد، طراحی ساختارهای بهینه و کنترل دقیق فرایندهای تولیدی از موضوعات کلیدی در این حوزه به‌شمار می‌آیند. افزون بر این، بهینه‌سازی ترکیب درصد آمیخته‌های پلیمری چندجزئی، نه تنها به کاهش آستانه رسانایی کمک می‌کند، بلکه به بهبود خواص مکانیکی، گرمایی و فرایندپذیری این مواد نیز منجر می‌شود [۳].

رویکردهای نوین برای شکل‌شناسی آمیخته‌های پلیمری مانند طیف‌سنجی امپدانس الکتریکی، امکان بررسی دقیق اثرهای عوامل مختلف مانند نسبت حجمی ذرات رسانا، هندسه و سطح ذرات و برهم‌کنش‌های میان ذرات و ماتریس را فراهم کرده‌اند [۴، ۵]. داداشی و همکاران [۶] سازوکار رسانندگی الکتریکی در آمیخته پلیمری پلی‌پروپیلن (PP) و پلی (اتیلن-کو-وینیل استات) (EVA) را بررسی کرده و برای افزودن نانوذرات رسانا از پیمانانه اصلی (master batch) نانولوله‌های کربنی چنددیواره (MWCNTs) بر پایه پلی‌پروپیلن پیوندخورده با مالئیک انیدرید (PP-g-MA) استفاده کردند. زمان اختلاط پیمانانه اصلی با آمیخته ذوب‌شده PP/EVA به‌عنوان پارامتری کلیدی برای کنترل خواص الکتریکی، مکانیکی و دی‌الکتریک بررسی شد. نتایج طیف‌سنجی امپدانس نشان داد، سازوکار رسانندگی الکتریکی در کامپوزیت‌های PP/EVA/PP-g-MA/MWCNTs با تغییر زمان اختلاط پیمانانه اصلی دچار تحول می‌شود. در زمان کوتاه اختلاط (1 min)، رسانندگی الکتریکی به‌طور عمده مبتنی بر تماس مستقیم ذرات رسانا بود و شبکه‌های پیوسته‌تر یا با تعداد بیشتر پیمانانه اصلی موجب افزایش رسانایی در بسامدهای کم شدند. در حالی که در زمان‌های طولانی‌تر اختلاط (۲/۵ و ۴/۵ min)، سازوکار رسانندگی الکتریکی به سمت تونل‌زنی الکترونی تغییر کرد و پراکندگی بهتر پیمانانه اصلی به رسانایی بیشتر در بسامدهای زیاد منجر شد. قطر دایره‌های نایکوئیست با افزایش زمان اختلاط از 0.75×10^6 به 3×10^7 افزایش یافت که این موضوع ناشی از کاهش پیوستگی شبکه رسانا و در نتیجه افزایش مقاومت بود. همچنین، ثابت دی‌الکتریک (ϵ') با افزایش زمان آمیخته‌سازی به دلیل تقویت قطبش بین‌سطحی طبق نظریه Maxwell-Wagner-Sillars افزایش یافت و شیب نمودار اتلاف دی‌الکتریک (ϵ'') نشان داد، در زمان‌های کوتاه‌تر، تماس مستقیم ذرات و در زمان‌های طولانی‌تر، تونل‌زنی الکترونی سازوکار غالب رسانندگی الکتریکی بوده است. این نتایج نشان داد، طیف‌سنجی امپدانس ابزار کارآمدی برای تحلیل تغییرات شکل‌شناسی و سازوکار رسانندگی در

کامپوزیت‌های پلیمری است [۶].

در مطالعه دیگری، با استفاده از طیف‌سنجی امپدانس، نقش سازگارکننده PP-g-MA در پراکندگی نانوذرات MWCNT در آمیخته‌های پلیمری PP/EVA بررسی شد. افزایش غلظت سازگارکننده به بهبود شایان توجه پراکندگی MWCNTها و تغییر رفتار امپدانس نمونه‌ها منجر شد. با افزایش مقدار سازگارکننده، مقاومت واقعی (Z') کاهش یافت و بسامد بحرانی با افزودن ۲۰٪ حجمی سازگارکننده حدود ۱۰ برابر افزایش یافت. این تغییر به دلیل تشکیل فاز پیوسته‌ای از سازگارکننده دارای نانوذرات در مرز فازهای PP و EVA بود. همچنین، افزایش سازگارکننده باعث افزایش ثابت دی‌الکتریک (ϵ') به مقدار چهار مرتبه شد، در حالی که اتلاف دی‌الکتریک (ϵ'') کاهش یافت. نتایج نشان داد، مقدار ۲۰٪ سازگارکننده بیشترین اثر را داشته و افزون بر کاهش مقاومت الکتریکی، پراکندگی بهینه‌ای از نانوذرات MWCNT فراهم کرده است. نمودار نایکوئیست نیز کاهش قطر نیم‌دایره‌ها با افزایش سازگارکننده را نشان داد، که به معنای کاهش مقاومت و پراکندگی بهتر MWCNTها بود. این تغییرات، سازوکار رسانندگی را از ناحیه مقاومتی به ناحیه ظرفیت خازنی منتقل کرده و تشکیل شبکه‌های رسانای پیوسته را تأیید کرد [۷].

هوش مصنوعی به‌عنوان یکی از پیشرفته‌ترین فناوری‌های عصر حاضر، اثرهای عمیقی بر حوزه‌های مختلف علمی، صنعتی و اجتماعی داشته است. این فناوری با تقلید از الگوهای تصمیم‌گیری و یادگیری انسان، امکان تحلیل داده‌های پیچیده، پیش‌بینی الگوهای آینده و خودکارسازی فرایندهای مختلف را فراهم کرده است [۸-۱۰].

در علم مواد و مهندسی پلیمر، هوش مصنوعی به دلیل قابلیت‌های برجسته‌ای که در پردازش حجم عظیمی از داده‌ها و شناسایی روابط پنهان میان متغیرها دارد، به سرعت در حال گسترش است. یکی از بزرگ‌ترین چالش‌ها در این حوزه، پیش‌بینی خواص مواد براساس ترکیب درصد و شرایط فرایندی آن‌هاست. هوش مصنوعی با استفاده از الگوریتم‌های یادگیری ماشین و یادگیری عمیق می‌تواند این چالش را به فرصتی برای نوآوری تبدیل کند. یکی از قابلیت‌های کلیدی هوش مصنوعی، تحلیل داده‌های بزرگ است [۱۱-۱۳]. در پژوهش‌های علمی، به‌ویژه در حوزه‌های مرتبط با نانوکامپوزیت‌ها، داده‌های زیادی از آزمایش‌های مختلف جمع‌آوری می‌شود. این داده‌ها شامل اطلاعاتی درباره ساختار مواد، خواص الکتریکی، مکانیکی و فرایندهای تولید است. هوش مصنوعی با استفاده از الگوریتم‌های پیشرفته می‌تواند الگوها و روابط پیچیده‌ای را که به‌طور مستقیم قابل مشاهده نیستند، شناسایی کرده و از آن‌ها برای پیش‌بینی نتایج آینده استفاده کند [۱۱-۱۳]. در طراحی مواد جدید، پژوهشگران معمولاً

(random forest)، k-نزدیک‌ترین همسایه (k-nearest neighbor)، رگرسیون بردار پشتیبان (support vector regression)، درخت تصمیم (decision tree) و XGBoost استفاده شد.

الگوریتم درخت تصادفی یک الگوریتم یادگیری ماشین مبتنی بر درخت‌های تصمیم‌گیری است که برای رگرسیون و طبقه‌بندی استفاده می‌شود. این الگوریتم از مجموعه‌ای از درخت‌های تصمیم‌گیری تشکیل شده است که هریک روی زیرمجموعه‌ای از داده‌ها آموزش می‌بینند. پیش‌بینی نهایی به‌صورت میانگین یا اکثریت آرا از پیش‌بینی‌های درخت‌ها به‌دست می‌آید. یکی از مزایای اصلی این روش، توانایی مقابله با بیش‌برازش (overfitting) و دقت زیاد آن در پیش‌بینی است [۱۵].

الگوریتم k-نزدیک‌ترین همسایه یکی از الگوریتم‌های ساده و قدرتمند در یادگیری ماشین است که برای رگرسیون و طبقه‌بندی داده‌ها استفاده می‌شود. در این الگوریتم، پیش‌بینی برای یک نقطه جدید با استفاده از k-نزدیک‌ترین همسایگان آن نقطه در فضای ویژگی‌ها انجام می‌شود. این روش به مدل‌سازی پیچیده‌ای نیازی ندارد و معمولاً برای مجموعه داده‌هایی کاربرد دارد که تصمیم‌گیری براساس شباهت‌ها در آن‌ها منطقی است [۱۶].

رگرسیون بردار پشتیبان روشی است که با هدف ساخت یک تابع رگرسیونی، حداکثر دقت را در پیش‌بینی فراهم می‌کند. این الگوریتم با محدود کردن خطاهای بزرگ و به‌کارگیری کرنل‌ها (kernel)، قادر است داده‌های پیچیده و غیرخطی را نیز مدل‌سازی کند. یکی از ویژگی‌های برجسته این الگوریتم، قابلیت آن در جلوگیری از بیش‌برازش است [۱۷]. درخت تصمیم یکی از مدل‌های یادگیری ماشین است که برای مسائل رگرسیون و طبقه‌بندی به‌کار گرفته می‌شود. این مدل با انجام مجموعه‌ای از تقسیمات متوالی، داده‌ها را براساس ویژگی‌های آن‌ها به شاخه‌های مختلف تفکیک می‌کند. درخت‌های تصمیم از سادگی و قابلیت زیاد تفسیر و نمایش بصری برخوردارند. با وجود این، با بهره‌گیری از روش‌های اصلاحی همچون هرس کردن (pruning) می‌توان دقت مدل را به مقدار شایان توجهی افزایش داد [۱۸].

الگوریتم XGBoost یکی از روش‌های پیشرفته یادگیری ماشین است که بر پایه مدل‌های درختی عمل کرده و از روش تقویت بهره می‌گیرد. هدف از طراحی آن، مقابله با مسائلی همچون بیش‌برازش و در نتیجه افزایش دقت مدل است. این الگوریتم به‌ویژه در رقابت‌های داده‌کاوی و یادگیری ماشین عملکرد بسیار موفقی داشته است. در مجموع، این الگوریتم از مقیاس‌پذیری زیادی برخوردار است و به‌دلیل سرعت و دقت چشمگیر خود، محبوبیت فراوانی یافته است [۱۹].

در این پژوهش، از الگوریتم‌های یادگیری ماشین شامل جنگل تصادفی

به آزمایش‌های متعدد و زمان‌بر نیاز دارند تا ترکیب و ساختار بهینه را بیابند. با استفاده از هوش مصنوعی، این فرایند می‌تواند تا حد شایان توجهی بهینه شود. مدل‌های یادگیری ماشین می‌توانند براساس داده‌های موجود، ترکیبات بهینه را پیشنهاد دهند، اثرهای تغییرات در ترکیب درصد را پیش‌بینی کرده و حتی خواص مواد جدید را با دقت زیاد شبیه‌سازی کنند. این نه تنها هزینه‌ها و زمان را کاهش می‌دهد، بلکه امکان نوآوری‌های بیشتری را فراهم می‌آورد. هوش مصنوعی از مجموعه‌ای از الگوریتم‌ها و روش‌ها تشکیل شده است که یادگیری ماشین و یادگیری عمیق از مهم‌ترین آن‌ها هستند. یادگیری ماشین به رایانه‌ها این امکان را می‌دهد که از داده‌ها بیاموزند و پیش‌بینی کنند، در حالی که یادگیری عمیق با استفاده از شبکه‌های عصبی چندلایه، قابلیت شناسایی روابط پیچیده‌تری را فراهم می‌کند. این روش‌ها در علم مواد برای تحلیل داده‌های تجربی، شناسایی عوامل کلیدی مؤثر بر خواص مواد و حتی کشف مواد جدید به‌کار گرفته می‌شوند [۱۴]. هوش مصنوعی به‌طور ویژه در حوزه نانوکامپوزیت‌های پلیمری نیز توانسته است، ابزاری تحول‌آفرین باشد. با تلفیق هوش مصنوعی و روش‌های تحلیلی تجربی مانند طیف‌سنجی امپدانس، می‌توان به درک عمیق‌تری از سازوکارهای رسانندگی الکتریکی و پراکندگی ذرات در ماتریس پلیمری دست یافت. این تلفیق، زمینه‌ساز پیش‌بینی ترکیب درصد بهینه پلیمرها در آمیخته، کاهش آستانه رسانایی و بهبود خواص نهایی مواد می‌شود. در این پژوهش، داده‌های تجربی آزمایشگاهی امپدانس الکتریکی شامل بخش حقیقی و موهومی امپدانس به‌همراه اختلاف فاز آن‌ها برحسب بسامد برای نمونه‌های PP/EVA در ۱۱ ترکیب درصد ۰، ۱۰، ۴۰، ۵۰، ۵۵، ۶۰، ۶۵، ۷۰، ۸۰، ۹۰ و ۱۰۰٪ تولید شد. حجم این داده‌ها هر چند شایان توجه است، اما گستردگی متداول در استفاده از ابزار هوش مصنوعی را ندارد. حجم این گونه از اطلاعات آن چنان در دسترس نیست، زیرا از این روش تاکنون استفاده نشده است. امید است، با ادامه مسیر و تولید داده‌های بیشتر برای سایر پلیمرها و ذرات رسانا، قابلیت تلفیق هوش مصنوعی و طیف‌سنجی امپدانس در سطح گسترده‌تری مورد توجه این گروه و سایر پژوهشگران قرار گیرد. خروجی قابل پیش‌بینی ترکیب درصد پلیمرها در آمیخته در نظر گرفته شده است. هدف از این کار ارائه مدلی است که بتواند براساس داده‌های ورودی امپدانس، کسر حجمی پلیمر در آمیخته پلیمری را پیش‌بینی کند. پیش‌بینی ترکیب درصد آمیخته‌های پلیمری با استفاده از داده‌های امپدانس الکتریکی می‌تواند به معرفی روشی نوین برای ارزیابی ترکیب درصد آمیخته‌های پلیمری امتزاج‌ناپذیر منجر شود. بدین منظور، در این پژوهش از چند مدل پرکاربرد یادگیری ماشین شامل جنگل تصادفی

Hz ۰/۱ تا ۱۰۰۰۰۰۰ Hz اندازه‌گیری شد. این آزمون به صورت دوالکترودی انجام شد، بدین صورت که نمونه جامد با قطر ۲/۵ cm و ضخامت ۰/۸ mm بین دو الکترود دایره‌ای قرار گرفت. سپس، جریان ورودی سینوسی به نمونه اعمال و خروجی به صورت موج سینوسی با اختلاف فاز مشخص ثبت شد که در نهایت به کمک روابط مربوط به امپدانس تبدیل شد. آزمون‌های امپدانس برای تمام نمونه‌ها سه مرتبه تکرار شد.

به منظور بررسی تغییرات گرانروی با سرعت برش، پلیمرهای پلی‌پروپیلن و پلی(اتیلن-وینیل استات) با استفاده از گرانروی سنج Physica MCR 300 ساخت آلمان در حالت سرعت برشی پایا تا برش ۵۰/۱ s در دمای ۱۹۰ °C بررسی شدند. آزمون گرماسنجی تفاضلی با گرماسنج DSC-D2 ساخت شرکت Zoufa چین روی نمونه پلی‌پروپیلن با سرعت گرمایش ۱۰ °C/min انجام شد.

برای تعیین شکل‌شناسی آمیخته پلیمری، تصویربرداری میکروسکوپی الکترونی به طور گزینشی انجام شد. برای آماده‌سازی نمونه‌ها به منظور انجام میکروسکوپی الکترونی پویشی (SEM)، ابتدا نمونه‌ها به شکل میله مستطیلی با ابعاد ۱۰×۱۰×۴۰ mm³ در دمای ۱۹۰ °C و فشار ۱۵۰ bar به مدت ۵ min پیش‌گرمایش و ۳ min تحت فشار قالب‌گیری شدند. سپس، نمونه‌های قالب‌گیری شده پس از غوطه‌وری به مدت ۵ min در نیتروژن مایع، بلافاصله شکسته شدند. به منظور آشکارسازی فازها و افزایش قدرت تشخیص آن‌ها، قطعات شکسته شده به مدت ۱ h در حلال ۲،۱-دی‌کلرواتان تحت دمای ۷۰ °C و هم‌زدن قرار گرفتند تا فاز پلی(اتیلن-کو-وینیل استات) استخراج شود. انتخاب حلال برای حکاکی فاز پلی(اتیلن-کو-وینیل استات) در آمیخته پلی‌پروپیلن/پلی(اتیلن-کو-وینیل استات) براساس پژوهش‌های پیشین انجام شد [۲۴-۲۱]. از دیدگاه نظری، حلال ۲،۱-دی‌کلرومتان با اختلاف پارامتر هانسن ۶ MPa^{1/2} نسبت به پلی(اتیلن-کو-وینیل استات)، در مقایسه با اختلاف پارامتر هانسن ۸/۵ MPa^{1/2} برای پلی‌پروپیلن، مناسب‌ترین حلال برای انحلال گزینشی پلی(اتیلن-کو-وینیل استات) است [۲۵، ۲۶]. از دیدگاه تجربی نیز، آزمایش‌هایی با قراردادن دانه‌های هر یک از پلیمرها در حلال ۲،۱-دی‌کلرومتان در شرایط مدنظر انجام شد. نتایج نشان داد، پلی(اتیلن-کو-وینیل استات) به طور کامل در این حلال حل شد، در حالی که پلی‌پروپیلن حل نشد و حتی پدیده تورم دانه‌ها نیز در مجاورت حلال برای دانه‌های پلی‌پروپیلن رخ نداد. پس از آن، سطح مقطع نمونه‌ها با لایه‌ای از طلا پوشش‌دهی شد و با میکروسکوپ الکترونی پویشی مدل MIRA 3، ساخت شرکت TESCAN جمهوری چک با ولتاژ ۱۵ kv ارزیابی شد.

پیش‌بینی ترکیب درصد آمیخته‌های پلیمری استفاده شد. سپس، دقت مدل‌ها با یکدیگر مقایسه شده و عملکرد هر یک در فرایند پیش‌بینی به طور جامع ارزیابی شد. نتایج این مقایسه می‌تواند دیدگاه روشنی در انتخاب مدل‌های بهینه برای تحلیل و پیش‌بینی رفتار آمیخته‌های پلیمری فراهم آورد.

تجربی

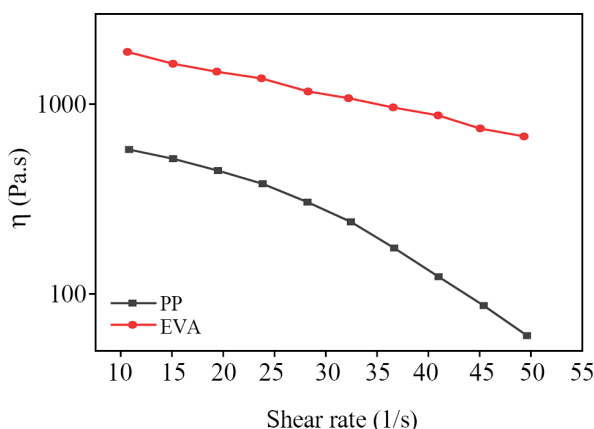
مواد

در این پژوهش از پلی‌پروپیلن شرکت Hyosung چین با نام تجاری Topilene، نوع J ۷۴۰، چگالی ۰/۹ g/cm³ و شاخص جریان مذاب ۲۵ g/۱۰ min (۲۳۰ °C و ۲/۱۶۰ kg) استفاده شد. پلی(اتیلن-کو-وینیل استات) ساخت شرکت Lotte Chemical کره جنوبی، نوع VS 430 با دمای ذوب ۸۴ °C، چگالی ۰/۹۴ g/cm³ و شاخص جریان مذاب ۲/۵ g/۱۰ min (۱۹۰ °C و ۲/۱۶ °C) به کار گرفته شد. درصد بلورینگی پلی(اتیلن-کو-وینیل استات) نام‌برده ۲۴/۶٪ گزارش شده که دمای گذار شیشه‌ای آن معادل ۶۶ °C- است [۲۰]. مقدار بلورینگی پلی‌پروپیلن استفاده شده در این پژوهش ۴۱/۹٪ و دمای ذوب ۱۷۲/۳ °C تعیین شد. از دوده رسانا با سطح ویژه معادل ۸۰۰ m²/g با نام تجاری Ketjenblack EC-300J محصول ژاپن استفاده شد.

دستگاه‌ها و روش‌ها

پیش از انجام فرایند اختلاط، پلی‌پروپیلن، پلی(اتیلن-کو-وینیل استات) و دوده رسانا به مدت ۱۲ h در دمای ۵۰ °C به منظور رطوبت‌زدایی درون گرم‌کن فن‌آزمگستر (ساخت ایران) قرار داده شدند. در تهیه تمام نمونه‌ها، سرعت چرخش مخلوط‌کن داخلی ساخت شرکت میثاق‌افزار ایران ۶۰ rpm و دما روی ۱۹۰ °C تنظیم شد. ترکیب درصد اجزای آمیخته پلیمری متغیر بود، اما مقدار دوده رسانای به کاررفته در این پژوهش ۴٪ حجمی در نظر گرفته شد.

قالب‌گیری تمام نمونه‌ها با دستگاه پرس گرم ساخت شرکت اورانوس کاسپین (ایران) در دمای ۱۹۰ °C با ۵ min پیش‌گرمایش و ۳ min تحت فشار ۱۵۰ bar انجام شد. نمونه‌ها پس از قالب‌گیری به منظور سردسازی سریع، بلافاصله درون آب با دمای ۲۵ °C غوطه‌ور شدند و به مدت ۵ min در آن باقی ماندند. برای بررسی خواص الفاکر-خازنی نمونه‌ها، تغییرات رسانایی الکتریکی بخش موهومی و واقعی برحسب بسامد با دستگاه پتانسیواستات شرکت سولار شریف ایران با نام تجاری ایراسول، در حالت آزمون امپدانس و در بازه بسامدی



شکل ۱- گرانروی پلی پروپیلن و پلی (اتیلن-*co*-وینیل استات) برحسب سرعت برش.

Fig. 1. Viscosity versus shear rate for polypropylene and poly(ethylene-*co*-vinyl acetate).

co-وینیل استات) و فاز روشن تر نشان دهنده پلی پروپیلن است. با توجه به شکل ۲، نانوذرات دوده به طور عمده در فاز پلی (اتیلن-*co*-وینیل استات) مشاهده می شوند. شایان ذکر است، پس از حکاکی، به دلیل خاصیت چسبندگی زیاد فاز، مقدار اندک باقی مانده این فاز سبب می شود، نانوذرات دوده رسانا به صورت شبکه ای و به هم پیوسته دیده شوند. با وجود این، بخشی از نانوذرات دوده در فاز پلی پروپیلن نیز مشاهده می شود که ناشی از دو عامل است. اول تمایل سینتیکی ذرات دوده به جاگیری در فاز پلی پروپیلن و دوم اختلاف کم میان انرژی بین سطحی پلی پروپیلن و دوده با انرژی بین سطحی پلی (اتیلن-*co*-وینیل استات) و دوده (جدول ۱). مقدار نسبتاً زیاد ۴٪ حجمی دوده نیز می تواند وجود دوده در هر دو فاز را تقویت کند [۲۸].

شکل ۳ شکل شناسی آمیخته های پلی پروپیلن/پلی (اتیلن-*co*-وینیل استات) با نسبت های ۵۰/۵۰، ۶۰/۴۰، ۷۰/۳۰، ۸۰/۲۰ و ۹۰/۱۰، دارای ۴٪ حجمی نانوذرات دوده رسانا را نشان می دهد. در نمونه هایی که پلی پروپیلن فاز ماتریس را تشکیل می دهد، نمونه ها حکاکی شده اند، اما در نمونه هایی که پلی (اتیلن-*co*-وینیل استات) فاز ماتریس است، امکان حکاکی وجود نداشت و این نمونه ها حکاکی نشدند. نمونه های دارای ۴۰، ۵۰ و ۶۰٪ حجمی پلی پروپیلن دارای شکل شناسی با ساختار هم پیوسته هستند، در حالی که نمونه ۷۰٪ حجمی شکل شناسی قطره جزیره-دریا و نمونه های با ۸۰ و ۹۰٪ حجمی پلی پروپیلن دارای شکل شناسی قطره-ماتریس هستند. شکل ۴ کلوخه شدن دوده رسانا در آمیخته پلی پروپیلن/پلی (اتیلن-*co*-وینیل استات) را در مقیاس ۵۰۰ nm و ۱ μm نشان می دهد. به دلیل حکاکی فاز پلی (اتیلن-*co*-وینیل استات)، دوده های رسانا

به منظور پیش بینی داده ها با مدل مدنظر، داده ها از فایل CSV پیوست شده به کمک کد پایتون موجود فراخوانی شدند. ستون ویژگی ها (X) شامل متغیرهای R، Re، Im، Fre و Theta است که به ترتیب بیانگر بسامد، بخش موهومی امپدانس، بخش حقیقی امپدانس، امپدانس مختلط و اختلاف فاز هستند. ستون هدف مربوط به پارامتر Com است. برای هر مدل، شاخص های ارزیابی شامل ضریب تعیین (R-Squared)، متوسط مربعات خطا و متوسط خطای مطلق محاسبه شدند.

نتایج و بحث

شکل ۱ تغییرات گرانروی برحسب سرعت برش را برای نمونه های پلی پروپیلن و پلی (اتیلن-*co*-وینیل استات) نشان می دهد. گرانروی پلی پروپیلن استفاده شده به ویژه در سرعت برش های بیشتر، به طور محسوس کمتر از گرانروی پلی (اتیلن-*co*-وینیل استات) است. در نتیجه، نانوذرات دوده رسانا از نظر سینتیکی تمایل بیشتری به جای گیری در فاز پلی پروپیلن دارند [۲۷].

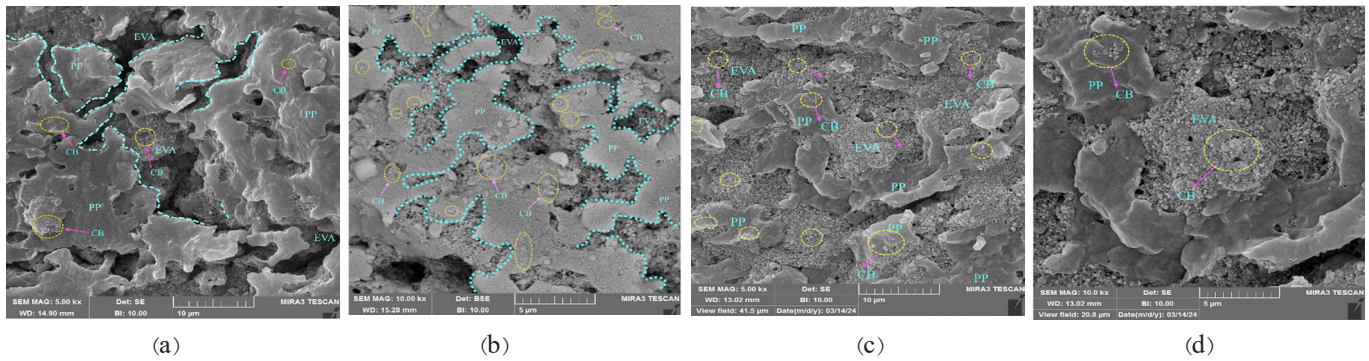
جدول ۱ مقادیر کشش بین سطحی اجزای مختلف پلی پروپیلن، پلی (اتیلن-*co*-وینیل استات) و دوده رسانا را مقایسه می کند. همان طور که داده ها نشان می دهد، مقدار کشش بین سطحی ۲۳/۹۳ mN/m بین پلی پروپیلن و پلی (اتیلن-*co*-وینیل استات) حاکی از تمایل ترمودینامیکی ضعیف بین این دو فاز است. کشش بین سطحی بین پلی (اتیلن-*co*-وینیل استات) و دوده رسانا ۳۲/۱۴ mN/m است که از کشش بین سطحی پلی پروپیلن و دوده رسانا ۳۸/۶۴ mN/m کمتر است. بنابراین، از نظر ترمودینامیکی دوده رسانا به جای گیری در فاز پلی (اتیلن-*co*-وینیل استات) تمایل بیشتری دارد [۷، ۲۱].

شکل ۲ تصاویر میکروسکوپی الکترونی نمونه ها را نشان می دهد. با توجه به حکاکی (etch) فاز پلی (اتیلن-*co*-وینیل استات) در تصاویر میکروسکوپی الکترونی پویشی، فاز تیره رنگ نشان دهنده پلی (اتیلن-

جدول ۱- کشش بین سطحی اجزا دوتایی.

Table 1. Interfacial tension between components.

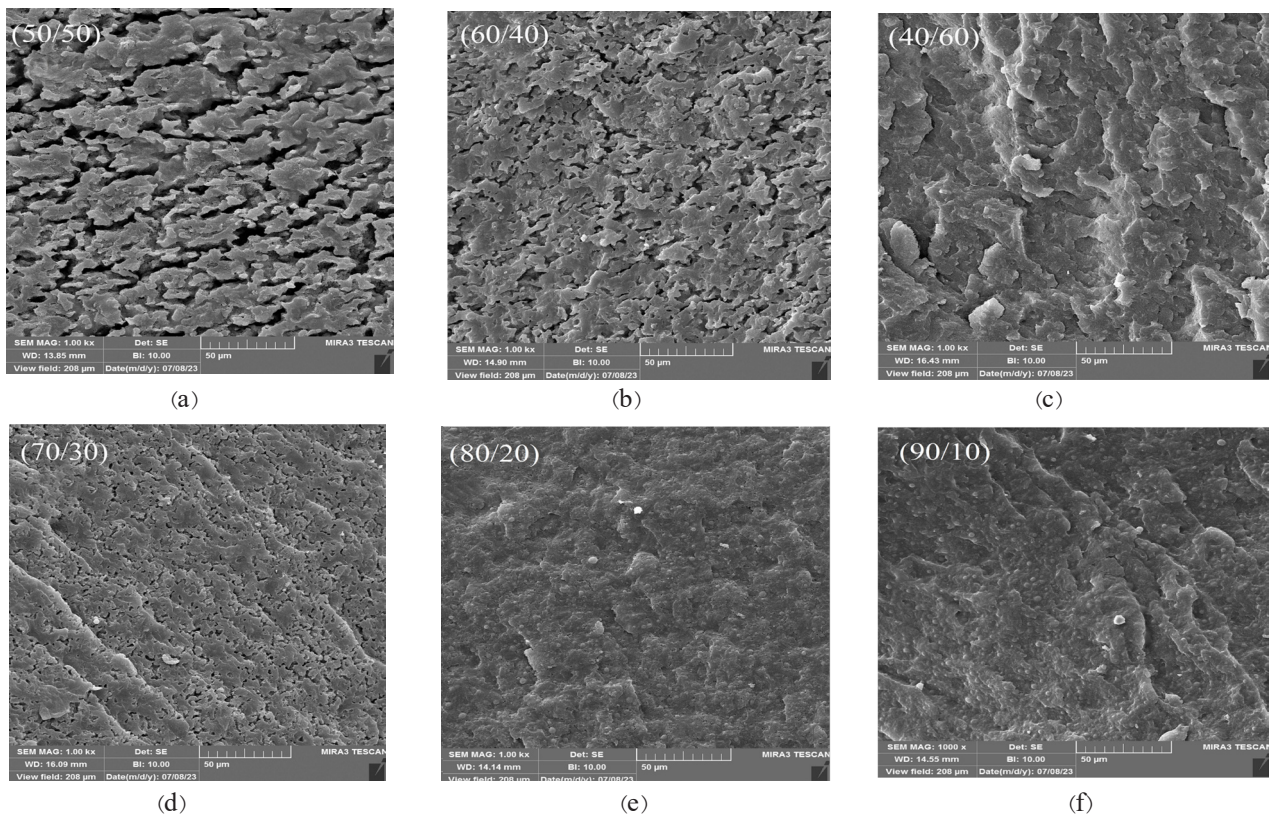
Material pair	Interfacial Energy (mN/m)
PP/EVA	23.93
PP/CB	38.64
EVA/CB	32.14



شکل ۲- تصاویر SEM آمیخته پلیمری پلی‌پروپیلن/پلی(اتیلن-وینیل استات) دارای ۴٪ حجمی نانوذرات دوده رسانا در ترکیب درصد ۵۰/۵۰ با (a) بزرگ‌نمایی ۱۰ μm و (b) بزرگ‌نمایی ۵ μm و ترکیب درصد ۶۰/۴۰ با بزرگ‌نمایی (c) ۱۰ μm و (d) ۵ μm.

Fig. 2. FE-SEM images of polypropylene/poly(ethylene-vinyl acetate) polymer blend containing 4 vol% conductive carbon black nanoparticles in morphology: (a) 50/50 composition with 10 μm magnification, (b) 50/50 composition with 5 μm magnification, (c) 40/60 composition with 10 μm magnification, and (d) 40/60 composition with 5 μm magnification.

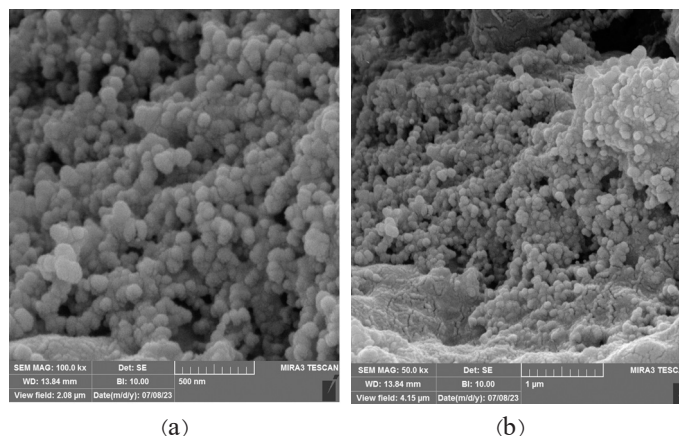
در این فاز قابل مشاهده هستند. اندازه‌گیری‌های آزمون امپدانس به‌منظور بررسی تغییرات مقاومت الکتریکی نمونه‌ها برحسب بسامد، برای نانوکامپوزیت‌های پلی‌پروپیلن، پلی(اتیلن-وینیل استات) و نیز آمیخته‌های پلی‌پروپیلن/پلی(اتیلن-وینیل استات) دارای



شکل ۳- تصاویر FE-SEM آمیخته‌های پلیمری با نسبت حجمی (a) ۵۰/۵۰، (b) ۶۰/۴۰، (c) ۴۰/۶۰، (d) ۷۰/۳۰، (e) ۸۰/۲۰ و (f) ۹۰/۱۰ دارای ۴٪ حجمی دوده رسانا.

Fig. 3. FE-SEM micrographs of (a) 50/50, (b) 60/40, (c) 40/60, (d) 70/30, (e) 80/20, and (f) 90/10 vol% blends containing 4 vol% of CB.

بسیار شایان توجه است نمونه هایی که فاز هم پیوسته داشته اند، به مراتب انحراف معیار بیشتری نیز داشته اند. با توجه به نتایج، سطح بخش حقیقی امپدانس پلی (اتیلن- CO -وینیل استات) دارای ۴٪ حجمی ذرات رسانا، 600Ω و نقطه بسامد بحرانی آن CO 3×10^4 است. در حالی که در پلی پروپیلن، امپدانس 75Ω و نقطه بسامد بحرانی 3×10^5 Hz است. کاهش سطح امپدانس از 600Ω به 75Ω و نیز انتقال نقطه بسامد بحرانی به سمت بسامدهای بیشتر (معادل یک مرتبه ده تایی) به بلورینگی زیاد پلی پروپیلن و برهم کنش ضعیف تر نانوذرات دوده رسانا با پلی پروپیلن نسبت داده می شود که هر دو عامل باعث جدایی فاز موضعی ذرات دوده از پلیمر و در نتیجه افزایش غلظت موضعی دوده می شود [۷]. بلورینگی زیاد پلی پروپیلن به افزایش مسیرهای رسانا منجر می شود، زیرا فضاهای محتمل برای جای گیری نانوذرات دوده رسانا محدود می شود [۲۱]. در آمیخته پلیمری با کسر حجمی ۵۰/۵۰، سطح امپدانس به 300Ω می رسد و نقطه بسامد بحرانی آن 6×10^4 Hz است. این مقدار نسبت به پلی (اتیلن- CO -وینیل استات) کاهش یافته اما در مقایسه با پلی پروپیلن افزایش نشان می دهد. در واقع، این رفتار بیانگر آن است که وجود فاز پلی پروپیلن به دلیل بلورینگی زیاد ساختار آن، می تواند نقش شایان توجهی در کاهش امپدانس الکتریکی و افزایش بسامد بحرانی ایفا کند. نمونه با کسر حجمی ۶۰/۴۰ کمترین سطح امپدانس (40Ω) و بیشترین بسامد بحرانی را نشان می دهد. مطابق شکل ۳، این نمونه دارای شکل شناسی هم پیوسته با فازی ریزتر از سایر ترکیب در صدهاست. از سوی دیگر، افزایش سهم فاز پلی پروپیلن، به عنوان فازی با بلورینگی بیشتر موجب کاهش سطح امپدانس شده است. در نمونه با ترکیب درصد ۷۰/۳۰، برآمدگی در بسامدهای کمتر



شکل ۴- کلوخه شدن دوده رسانا مشاهده شده در فاز پلی (اتیلن- CO -وینیل استات) در دو مقیاس (a) ۵۰۰ nm و (b) ۱ μm .

Fig. 4. Agglomeration of carbon black (CB) in poly(ethylene-co-vinyl acetate) at two scales (a) 500 nm, and (b) 1 μm .

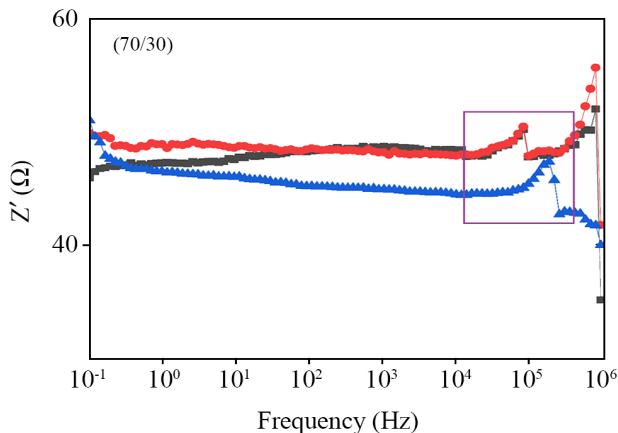
نانوذرات دوده رسانا انجام شد. در نمودار امپدانس بر حسب بسامد، رفتار مستقل از بسامد نشان دهنده ماهیت مقاومتی (مقاومت گون) و رفتار وابسته به بسامد که به صورت کاهش امپدانس با افزایش بسامد ظاهر می شود، بیانگر ماهیت خازنی (خازن گون) است. نقطه ای که در آن رفتار مقاومتی به رفتار خازنی تغییر می کند، به بسامد بحرانی معروف است.

شکل ۵ امپدانس الکتریکی بخش حقیقی بر حسب بسامد برای آمیخته های پلی پروپیلن-پلی (اتیلن- CO -وینیل استات) دارای ۴٪ حجمی نانوذرات دوده رسانا را نشان می دهد. میانگین مقادیر سطح امپدانس با سه بار تکرار در جدول ۲ نشان داده شده است.

جدول ۲- متوسط قسمت حقیقی سطح امپدانس و انحراف معیار برای نمونه های مختلف به منظور نشان دادن دقت اندازه گیری.

Table 2. Average of the real part of impedance level and its standard deviation for different samples.

Sample name	Mean of real part of impedance level, Z' (Ω)	Standard deviation	Standard deviation (%)
PP	75	2.6	3.5
EVA	600	25.3	4.2
PP/EA 50/50	300	30.1	10
PP/EA 60/40	40	5	12.5
PP/EA 70/30	55	4	7.3
PP/EA 80/20	56	2	3.6
PP/EA 90/10	55	3	3.6

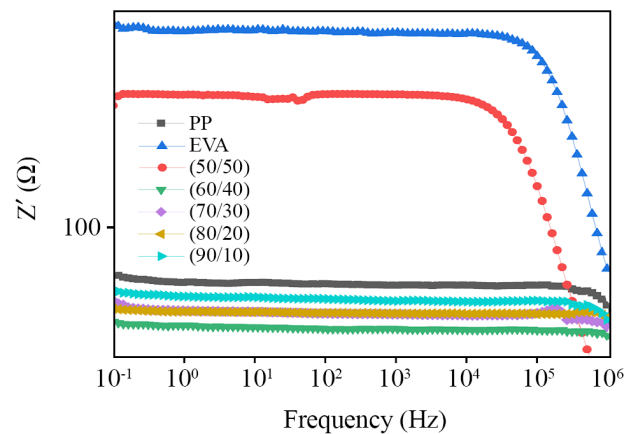


شکل ۶- بخش حقیقی امپدانس برحسب بسامد برای سه نمونه مختلف آمیخته (۷۰/۳۰).

Fig. 6. Real part of impedance versus frequency for 3 different samples of (70/30) blend.

نشان می‌دهد، پلی‌پروپیلن خالص نسبت به آمیخته‌های ۶۰، ۷۰، ۸۰ و ۹۰٪ حجمی امپدانس موهومی بیشتری دارد، اما نسبت به پلی (اتیلن-*CO*-وینیل استات) و آمیخته ۵۰/۵۰ مقادیر کمتری نشان می‌دهد. این رفتار ناشی از تجمع نانوذرات رسانا در فاز پلی‌پروپیلن و کاهش مسیرهای پیوسته برای اتلاف انرژی است، به‌طوری که سازوکار اصلی اتلاف به‌طور عمده به‌صورت گرمایی رخ می‌دهد. در مقابل، وجود پلی (اتیلن-*CO*-وینیل استات) در آمیخته‌های توزیع ذرات را محدود و کنترل می‌کند و باعث تقویت عملکرد اتلاف امواج الکترومغناطیس می‌شود [۲۹].

شکل ۸ نمودار نایکوئیست نمونه‌ها را نشان می‌دهد. نمودار نایکوئیست اطلاعات مهمی از جمله رفتار دی‌الکتریک، ویژگی‌های مدار معادل نانوکامپوزیت و رابطه آن با کاربردهای مدنظر ارائه می‌دهد. مرکز نیم‌دایره نایکوئیست نشان‌دهنده متوسط فاصله بین ذرات و قطر نیم‌دایره بیانگر مقدار ظرفیت خازنی نمونه است. مطابق شکل، نمونه پلی (اتیلن-*CO*-وینیل استات) بیشترین فاصله بین ذرات را نشان می‌دهد که بیانگر توزیع یکنواخت‌تر و پراکندگی بهتر ذرات رسانا در این نمونه است. با افزودن فاز پلی‌پروپیلن، نیم‌دایره نایکوئیست به سمت چپ منتقل شده و مرکز آن به مقادیر کمتر کاهش یافته است که نشان‌دهنده کاهش فاصله بین ذرات دوده رسانا در آمیخته است. در شکل ۸ (b)، بزرگ‌نمایی نمودارهای نایکوئیست داده شده است. برای ارزیابی کمی مقاومت و ظرفیت خازنی، از نرم‌افزار ZView استفاده شد و مقاومت و ظرفیت خازنی نمونه‌ها براساس مدار معادل نشان داده شده در شکل ۸ (b) محاسبه و در

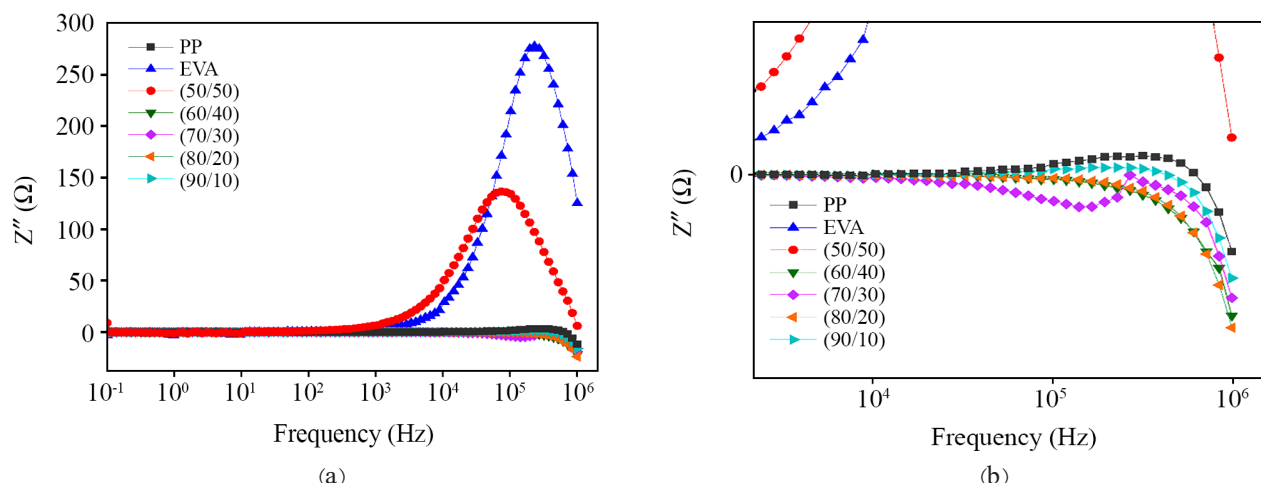


شکل ۵- نمودارهای بخش حقیقی امپدانس برحسب بسامد برای آمیخته‌های پلی‌پروپیلن/پلی (اتیلن-*CO*-وینیل استات) در ترکیب‌درصدهای مختلف آمیخته.

Fig. 5. Real part of impedance versus frequency for polypropylene/poly (ethylene-co-vinyl acetate) at varying blend compositions.

مشاهده می‌شود. برای اطمینان از صحت این مشاهده، آزمایش سه بار برای سه نمونه با همین ترکیب‌درصد تکرار شد که نتایج آن در شکل ۶ نشان داده شده است. همچنین، در ترکیب‌درصد ۷۰/۳۰، همان‌طور که در شکل دیده می‌شود، شکل‌شناسی ساختار به‌طور عمده به‌صورت جزیره دریا ظاهر می‌شود. این ترکیب‌درصد نقطه‌ای است که از آن به بعد شکل‌شناسی به سمت ساختار قطره-ماتریس تغییر می‌کند [۲۹].

شکل ۷ نتایج بخش موهومی امپدانس را برحسب بسامد برای نمونه‌هایی با ترکیب‌درصدهای مختلف نشان می‌دهد. رفتار بخش موهومی امپدانس بیانگر ویژگی‌های خازنی و مقدار اتلاف نمونه‌هاست. هرچقدر سطح زیر پیک اتلاف بزرگ‌تر باشد، قابلیت نمونه در جذب و اتلاف امواج الکترومغناطیس بیشتر خواهد بود. نتایج بخش موهومی امپدانس نشان می‌دهد، فاز پلی (اتیلن-*CO*-وینیل استات) پیک اتلاف بزرگ‌تری نسبت به آمیخته ۵۰/۵۰ دارد. این موضوع ناشی از توزیع بهتر نانوذرات رسانا در فاز پلی (اتیلن-*CO*-وینیل استات) است که امکان شکل‌گیری مسیرهای اتلاف مؤثر انرژی را فراهم می‌کند. در آمیخته ۵۰/۵۰، وجود پلی‌پروپیلن باعث محدود شدن مسیرهای توزیع ذرات و کاهش نسبی شدت پیک می‌شود. با وجود این، ساختار دوفازی آمیخته، شرایط مناسبی برای ترکیب اثرهای انتقال بار و اتلاف دی‌الکتریک ایجاد می‌کند و عملکرد مناسبی در جذب امواج الکترومغناطیس ارائه می‌دهد. مقایسه سایر آمیخته‌ها

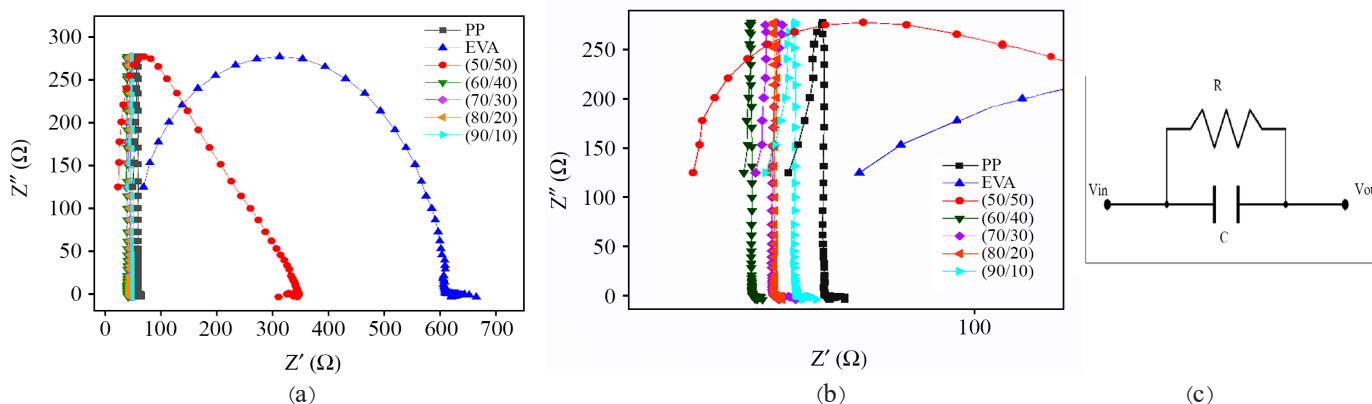


شکل ۷- نمودار (a) امپدانس بخش موهومی (اتلاف) برحسب بسامد نمونه‌های پلی پروپیلن، پلی (اتیلن- co -وینیل استات) و آمیخته پلی پروپیلن / پلی (اتیلن- co -وینیل استات) دارای نانوذرات دوده رسانا و (b) بزرگ‌نمایی نمودار بخش موهومی امپدانس.

Fig. 7. Graph (a) of the imaginary part impedance (loss) versus frequency of polypropylene, poly(ethylene- co -vinyl acetate) and polypropylene/poly(ethylene- co -vinyl acetate) blends containing conductive carbon black nanoparticles and (b) zoomed-in imaginary part impedance graph.

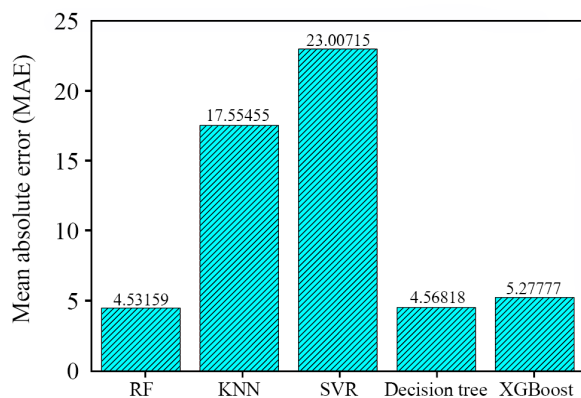
مقاومت به نمونه با ترکیب درصد ۶۰/۴۰ تعلق دارد. به منظور بررسی ارتباط بین پارامترهای امپدانس الکتریکی، از داده‌های تجربی اندازه‌گیری شده در این مطالعه به عنوان مجموعه داده برای مدل‌های مختلف یادگیری ماشینی استفاده شد. این مجموعه داده‌ها به شکل فایل CSV در صورت مکاتبه با نویسنده، برای خواننده ارسال می‌شود. شکل ۹

جدول ۳ ارائه شده است. مطابق جدول، بیشترین مقاومت و کمترین ظرفیت خازنی به نمونه پلی (اتیلن- co -وینیل استات) مربوط است. برای نمونه پلی پروپیلن، مقاومت کاهش یافته و ظرفیت خازنی نیز کاهش یافته است. آمیخته‌های پلیمری نیز مقاومت و ظرفیت خازنی کمتری نسبت به پلی (اتیلن- co -وینیل استات) دارند و کمترین

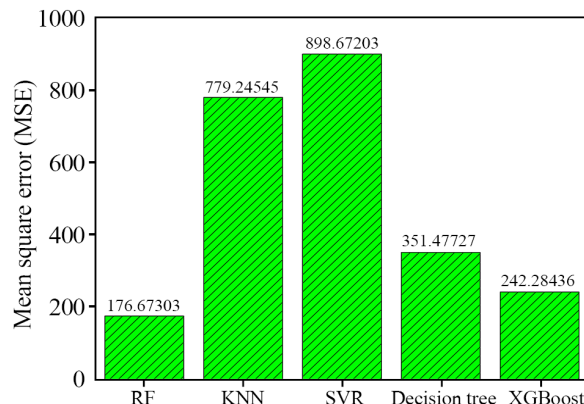


شکل ۸- (a) نمودار نایکوئیست نمونه‌های پلی پروپیلن، پلی (اتیلن- co -وینیل استات) و آمیخته‌های پلی پروپیلن / پلی (اتیلن- co -وینیل استات) دارای نانوذرات دوده رسانا، (b) بزرگ‌نمایی نمودار نایکوئیست و (c) مدار معادل مقاومت و خازن موازی برای نمونه‌های مدنظر.

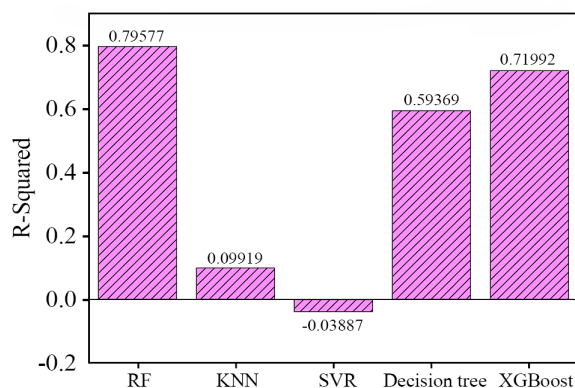
Fig. 8. (a) Nyquist plots of polypropylene, poly(ethylene- co -vinyl acetate), and polypropylene/poly(ethylene- co -vinyl acetate) composites containing conductive carbon black nanoparticles; (b) magnified view of the Nyquist plots; (c) equivalent circuit consisting of a parallel resistor and capacitor for the studied samples.



(a)



(b)



(c)

شکل ۹- نمودارهای خطای میانگین مطلق، خطای میانگین متوسط، و مربع R برای پیش‌بینی ترکیب درصد آمیخته پلی پروپیلن/پلی (اتیلن وینیل استات) دارای ۴٪ حجمی دوده رسانا با مدل‌های Support Vector Regression (SVR)، K-Nearest Neighbor (KNN)، Random Forest (RF)، Decision Tree و XGBoost.

Fig. 9- Mean absolute error (MAE), mean square error (MSE), and R-squared bar charts for prediction of the composition of PP/EVA polymer blends containing 4 vol% of CB with random forest (RF), K-Nearest neighbor (KNN), Support vector regression (SVR), decision tree, and XGBoost models.

نمودارهای میله‌ای خطاهای مختلف مدل‌های هوش مصنوعی را نشان می‌دهد. میان مدل‌های بررسی شده، جنگل تصادفی بهترین عملکرد را نشان داد، به‌طوری که مقدار میانگین خطای مطلق ۴٪ (برای درصد پلیمر در آمیخته)، میانگین مربعات خطا ۱۷۶/۶۷ و ضریب تعیین ۰/۸ به‌دست آمد. مدل جنگل تصادفی با استفاده از ساختار مجموعه‌ای از درخت‌های تصمیم، قابلیت زیادی در شناسایی روابط پیچیده و غیرخطی بین ویژگی‌ها و متغیر هدف دارد. این مدل به‌صورت تصادفی زیرمجموعه‌ای از داده‌ها و ویژگی‌ها را برای هر درخت انتخاب می‌کند و سپس پیش‌بینی‌ها را با میانگین‌گیری یا رأی‌گیری اکثریت ترکیب می‌کند. این روش باعث می‌شود، مدل مقاومت زیادی در برابر بیش‌برازش داشته باشد و عملکردی پایدار ارائه دهد. افزون بر این، جنگل تصادفی در مدیریت داده‌های پرنویز و دارای نقاط پرت نیز بسیار موفق عمل می‌کند، زیرا هر درخت تنها بخشی از

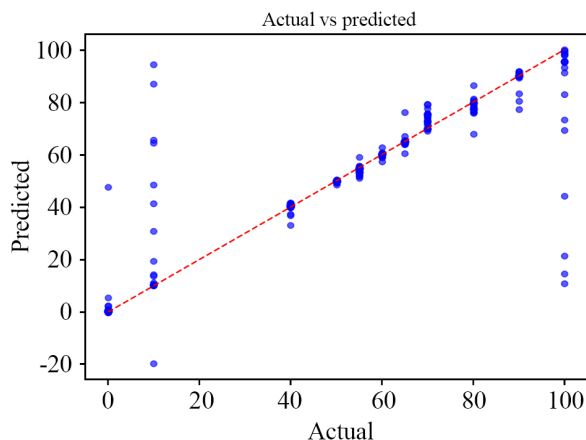
جدول ۳- مقادیر مقاومت و خازن به‌دست آمده از برازش مدار موازی R-C روی داده‌های خام نایکوئیست برای تمام نمونه‌ها.

Table 3. Resistance and capacitance values obtained by fitting a parallel R-C circuit to the raw Nyquist data for all samples.

Sample name	R (Ω)	C (F)
PP	62.93	3.72×10^{-10}
EVA	648.78	3.28×10^{-12}
PP/EVA 50/50	342.79	1.20×10^{-11}
PP/EVA 60/40	41.05	8.64×10^{-10}
PP/EVA 70/30	63.74	6.65×10^{-10}
PP/EVA 80/20	54.83	4.88×10^{-10}
PP/EVA 90/10	48.24	6.40×10^{-10}

نتیجه‌گیری

در این مطالعه، نانوکامپوزیت‌های پلی‌پروپیلن، پلی(اتیلن- CO -وینیل استات) و آمیخته‌های آن‌ها دارای نانوذرات دوده رسانا از نظر رفتار امپدانسی و شکل‌شناسی بررسی شد. نتایج نشان داد، ریزساختار هم‌پیوسته در نمونه‌های با کسر حجمی $60/40$ باعث کاهش فاصله بین ذرات رسانا و افزایش نقطه بسامد بحرانی می‌شود، در حالی که نمونه‌های با درصد زیاد پلی‌پروپیلن ($90-70$) به ساختار قطره-ماتریس منتقل می‌شود و اتلاف امواج به‌طور عمده به‌صورت گرمایی رخ می‌دهد. نمونه پلی(اتیلن- CO -وینیل استات)، بیشترین سطح پیک بخش موهومی امپدانس را نشان داد که بیانگر توزیع یکنواخت‌تر ذرات و ظرفیت زیاد اتلاف دی‌الکتریک است. تحلیل نایکوئیست نشان داد، افزودن فاز پلی‌پروپیلن باعث کاهش نیم‌دایره‌ها و انتقال مرکز آن به مقادیر کمتر شد که نشان‌دهنده کاهش فاصله بین ذرات رسانا و تغییر مسیرهای انتقال بار در آمیخته‌هاست. مقایسه مقاومت و ظرفیت خازنی نمونه‌ها نیز نشان داد، بیشترین مقاومت و کمترین ظرفیت خازنی به پلی(اتیلن- CO -وینیل استات) خالص مربوط است و با افزودن پلی‌پروپیلن، مقاومت و ظرفیت خازنی کاهش می‌یابد و آمیخته‌های $60/40$ حداقل مقاومت را نشان دادند. به‌دلیل روابط پیچیده بین پارامترهای امپدانس و ویژگی‌های ریزساختار و ترکیب درصد آمیخته پلیمری، از روش یادگیری ماشین برای تحلیل داده‌ها استفاده شد. در میان مدل‌های مختلف بررسی‌شده، مدل جنگل تصادفی بهترین عملکرد را داشت؛ به‌طوری که کمترین خطای میانگین مطلق (4% برای درصد فاز)، کمترین خطای مربعی میانگین $176/67$ و ضریب تعیین (R^2)، $0/8$ به‌دست آمد. ویژگی خاص این مدل استفاده از مجموعه‌ای از درخت‌های تصمیم است که امکان شبیه‌سازی روابط پیچیده و غیرخطی را فراهم کرده و مقاومت زیادی در برابر بیش‌برازش ایجاد می‌کند. همچنین، جنگل تصادفی در مواجهه با داده‌های پرنویز و نقاط پرت نیز عملکرد مناسبی دارد، زیرا هر درخت تنها بخشی از داده‌ها را می‌بیند و اثر نقاط پرت بر کل مدل کاهش می‌یابد. از دیگر مزایای آن، قابلیت مدیریت داده‌های با ابعاد بزرگ و امکان تعیین اهمیت ویژگی‌ها برای تحلیل پیش‌بینی‌هاست. در مقایسه با مدل‌های دیگر مانند نزدیک‌ترین همسایه، ماشین بردار پشتیبان، درخت تصمیم و XGBoost، جنگل تصادفی عملکرد بهتری در پیش‌بینی خواص آمیخته‌های پلی‌پروپیلن-پلی(اتیلن- CO -وینیل استات)، دارای 4%



شکل ۱۰- نمودار پراکنده مقادیر پیش‌بینی شده برحسب مقادیر واقعی و بررسی انطباق آن با خط عبوری از مبدأ.

Fig. 10. Scatter data for predicted and actual data and investigating its valid ability with line crossed from (0,0) point.

داده‌ها را مشاهده می‌کند و اثر نقاط پرت بر کل مدل کاهش می‌یابد. یکی دیگر از مزایای این مدل، قابلیت پردازش داده‌های با ابعاد بزرگ است، انتخاب تصادفی زیرمجموعه‌ای از ویژگی‌ها برای هر درخت موجب کاهش همبستگی بین درخت‌ها و افزایش توان تعمیم مدل می‌شود. همچنین، قابلیت تعیین اهمیت ویژگی‌ها در جنگل تصادفی امکان تحلیل اثر هر ویژگی بر پیش‌بینی‌ها را فراهم می‌کند که برای شناسایی پارامترهای کلیدی در امپدانس الکتریکی بسیار مفید است. برای ارزیابی بصری عملکرد مدل، نمودار پراکنده داده‌های پیش‌بینی شده برحسب داده‌های واقعی برای مدل جنگل تصادفی رسم شد (شکل ۱۰). در این نمودار، هر نقطه نمایانگر یک نمونه از داده‌هاست که محور افقی مقادیر واقعی و محور عمودی مقادیر پیش‌بینی شده را نشان می‌دهد. نقاط نزدیک به خط ایده‌آل 45° نشان‌دهنده دقت زیاد مدل و نقاط دور از خط نشان‌دهنده خطا یا عدم انطباق هستند. همان‌طور که در شکل ۱۰ دیده می‌شود، داده‌ها تقریباً با خط ایده‌آل مطابقت دارند که بیانگر عملکرد مناسب مدل جنگل تصادفی در پیش‌بینی پارامترهای امپدانس الکتریکی است. در نهایت نتایج نشان می‌دهد، مدل جنگل تصادفی می‌تواند روابط غیرخطی پیچیده بین ویژگی‌ها و امپدانس الکتریکی را به‌خوبی شناسایی کند و ابزار مناسبی برای تحلیل و پیش‌بینی عملکرد نانوکامپوزیت‌ها باشد. استفاده از این مدل امکان شناسایی پارامترهای مؤثر در رفتار الکتریکی نمونه‌ها و طراحی بهینه نانوکامپوزیت‌ها را فراهم می‌کند.

تضاد منافع

نویسندگان این مقاله اعلام می‌کنند، هیچ گونه تضاد منافی در این مقاله ندارند.

قدردانی

نویسندگان از شرکت آزمون دانا پلاستیک برای در اختیار قراردادن امکانات به‌منظور انجام آزمون امپدانس الکتریکی قدردانی می‌کنند.

مراجع

- Clingerman M.L., King J.A., Schulz K.H., and Meyers J.D., Evaluation of Electrical Conductivity Models for Conductive Polymer Composites, *J. Appl. Polym. Sci.*, **83**, 1341–1356, 2002.
- Radzuan N.A.M., Sulong A.B., and Sahari J., A Review of Electrical Conductivity Models for Conductive Polymer Composite, *Int. J. Hydrogen Energy*, **42**, 9262–9273, 2017.
- Chen J., Cui X., Sui K., Zhu Y., and Jiang W., Balance the Electrical Properties and Mechanical Properties of Carbon Black Filled Immiscible Polymer Blends with a Double Percolation Structure, *Compos. Sci. Technol.*, **140**, 99–105, 2017.
- Al-Saleh M.H., Al-Anid H.K., Husain Y.A., El-Ghanem H.M., and Abdul Jawad S., Impedance Characteristics and Conductivity of CNT/ABS Nanocomposites, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **46**, 385305, 2013.
- Jalali S., Baniadam M., and Maghrebi M., Impedance Analysis and Dielectric Performance of Microwave-Assisted Synthesized MWCNT/Polystyrene Nanocomposites: Influence of Microwave Power, *Arab. J. Sci. Eng.*, 1–12, 2024.
- Dadashi P. and Hashemi Motlagh G., Employing Impedance Spectroscopy to Investigate Electrical Conduction Mechanism in Polymer Composite Blends Containing Conductive Masterbatch: PP/EVA/(PP-g-MA/MWCNTS), *J. Thermoplast. Compos. Mater.*, 08927057231168561, 2023.
- Dadashi P. and Hashemi Motlagh G., Detection of Compatibilizer Efficiency in Conductive Polymer Blends by Impedance Spectroscopy: Microstructure Evaluation Approach, *Polym. Eng. Sci.*, **64**, 1658–1674, 2024.
- Yin J., Ngiam K.Y., and Teo H.H., Role of Artificial Intelligence Applications in Real-Life Clinical Practice: Systematic Review, *J. Med. Internet Res.*, **23**, e25759, 2021.
- Nichols J.A., Herbert Chan H.W., and Baker M.A.B., Machine Learning: Applications of Artificial Intelligence to Imaging and Diagnosis, *Biophys. Rev.*, **11**, 111–118, 2019.
- Zhao S., Blaabjerg F., and Wang H., An Overview of Artificial Intelligence Applications for Power Electronics, *IEEE Trans. Power Electron.*, **36**, 4633–4658, 2020.
- Yang Q., Vriza A., Castro Rubio C.A., Chan H., Wu Y., and Xu J., Artificial Intelligence for Conjugated Polymers, *Chem. Mater.*, **36**, 2602–2622, 2024.
- Zhou T., Lan X., and Xu C., Artificial Intelligence for Accelerating Polymer Design: Recent Advances and Future Perspectives, *CIESC J.*, **74**, 14, 2023.
- Tran H., Gurnani R., Kim C., Piliñia G., Kwon H.-K., Lively R.P., and Ramprasad R., Design of Functional and Sustainable Polymers Assisted by Artificial Intelligence, *Nat. Rev. Mater.*, 1–21, 2024.
- Dadashi D., Kaedi M., Dadashi P., and Sinha Ray S., Prediction of the Appropriate Temperature and Pressure for Polymer Dissolution Using Machine Learning Models, *Mol. Inform.*, **44**, e202400193, 2025.
- Capek M., Hazdra P., and Eichler J., A Method for the Evaluation of Radiation Q Based on Modal Approach, *IEEE Trans. Antennas Propag.*, **60**, 4556–4567, 2012.
- Syriopoulos P.K., Kalampalikis N.G., Kotsiantis S.B., and Vrahatis M.N., kNN Classification: A Review, *Ann. Math. Artif. Intell.*, 1–33, 2023.
- Awad M., and Khanna R., Support Vector Regression, Efficient Learning Machines: Theories, Concepts, and Applications for Engineers and System Designers, 67–80, 2015.
- Song Y.-Y. and Ying L.U., Decision Tree Methods: Applications for Classification and Prediction, *Shanghai Arch. Psychiatry*, **27**, 130, 2015.
- Chen T. and Guestrin C., XGBoost: A Scalable Tree Boosting System, *Proc. 22nd ACM SIGKDD, Int. Conf. Knowl. Discov.*

- Data Min.*, 785–794, 2016.
20. Razavi-Nouri M., Saeedi F., and Ziaee F., Investigation on Crystallization, Melting, Thermal Stability and Rheological Behavior of PMMA/EVA Nanocomposites Containing Different MWCNT Contents, *J. Thermoplast. Compos. Mater.*, 2025 DOI: org/10.1177/0892705725135009.
 21. Dadashi P., and Hashemi Motlagh G., Employing Impedance Spectroscopy to Investigate Electrical Conduction Mechanism in Polymer Composite Blends Containing Conductive Masterbatch: PP/EVA/(PP-g-MA/MWCNTS), *J. Thermoplast. Compos. Mater.*, **37**, 106–127, 2024.
 22. Číková E., Kuliček J., Janigová I., and Omastová M., Electrospraying of Ethylene Vinyl Acetate/Poly(lactic acid) Blends on a Water Surface, *Materials (Basel)*, **11**, 1737, 2018.
 23. George G., Selvakumar M., Mahendran A., and Anandhan S., Structure–Property Relationship of Halloysite Nanotubes/Ethylene–Vinyl Acetate–Carbon Monoxide Terpolymer Nanocomposites, *J. Thermoplast. Compos. Mater.*, **30**, 121–140, 2017.
 24. Trivedi H.K., Meshram A., and Gupta R., Removal of Encapsulant Ethylene-Vinyl Acetate (EVA) from Solar Cells of Photovoltaic Modules (PVMs), *Mater. Today Proc.*, **112**, 73–76, 2024.
 25. Van Krevelen D.W., and Te Nijenhuis K., Properties of Polymers: Their Correlation with Chemical Structure; Their Numerical Estimation and Prediction from Additive Group Contributions, Elsevier, Amsterdam, 4th ed., 1–1000, 2009.
 26. Barton A.F.M., *CRC Handbook of Solubility Parameters and Other Cohesion Parameters*, Routledge, Boca Raton, 3rd ed., 1–500, 2017.
 27. Salehiyan R. and Ray S.S., Tuning the Conductivity of Nanocomposites through Nanoparticle Migration and Interface Crossing in Immiscible Polymer Blends: A Review on Fundamental Understanding, *Macromol. Mater. Eng.*, **304**, 1800431, 2019.
 28. Fenouillot F., Cassagnau P., and Majesté J.C., Uneven Distribution of Nanoparticles in Immiscible Fluids: Morphology Development in Polymer Blends, *Polymer (Guildf)*, **50**, 1333–1350, 2009.
 29. Zhang X., Xiang D., Zhou L., Li D., Zhao C., Li H., Wang B., Wang P., Li Y., and Wu Y., Effect of Melt Mixing Conditions on the Mechanical, Electrical, and Strain Sensing Properties of Carbon Nanotube–Styrene Butadiene Styrene/Thermoplastic Polyurethane Nanocomposites with a Double-Percolation Structure, *J. Mater. Eng. Perform.*, **34**, 1916–1926, 2025.