

ВИСНОВОК

**про наукову новизну, теоретичне і практичне значення результатів
дисертації Коропа Миколи Миколайовича на тему:
«Використання методів штучного інтелекту та машинного навчання для
автоматизації досліджень екструдованих термоелектричних матеріалів
на основі Ві–Те»,
поданої на здобуття ступеня доктора філософії за спеціальністю
105 – Прикладна фізика та наноматеріали
в галузі знань 10 – Природничі науки**

1. Обґрунтування вибору теми дослідження та її зв'язок із планами наукових робіт Університету

Термоелектрика має широке практичне застосування, зокрема у енергетичній, метрологічній, медичній, військовій та космічній індустрії, проте пошук і синтез оптимальних термоелектричних матеріалів потребує значних часових та економічних затрат і залежить від великої кількості факторів – комбінації компонентів, технологічних процесів, методів синтезу, легуючих домішок та їх концентрації. Найширше застосовуються матеріали на основі Ві та Те, високі значення добротності яких досягаються додаванням ізовалентних домішок (Sb, Se), однак за останні 30 років помітного подальшого росту добротності не відбулось, а накопичені в літературі теоретичні й експериментальні дані залишаються фрагментарними та неструктурованими. У зв'язку з цим актуальним є застосування нових підходів на базі штучного інтелекту та машинного навчання для збору, систематизації, нормалізації та зберігання властивостей термоелектричних матеріалів, що потребує створення надійної й достатньої бази даних, а також подальшого їх використання для розв'язання оберненої багатофакторної задачі з пошуку та оптимізації

термоелектричного матеріалу за заданих граничних умов.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами та темами

Дисертаційна робота виконана під керівництвом кандидата фізико-математичних наук Прибили Андрія Вікторовича. Результати, які представлені в дисертації, пов'язані з виконанням кафедральної тематики у 2021-2025 роках «Фізика, матеріалознавство та прикладні застосування термоелектрики» (номер державної реєстрації 0121U110896) та виконанням Інститутом термоелектрики НАН України та МОН України науково-дослідних робіт за відомчим замовленням Відділення матеріалознавства НАН України «Використання методів штучного інтелекту та машинного навчання для підвищення ефективності термоелектричних матеріалів на основі телуриду вісмуту» (номер Державної реєстрації 0125U000210).

Метою роботи є розробка методів збору, систематизації, нормалізації та зберігання властивостей термоелектричних матеріалів, а також розробка прикладної програми для розв'язання оберненої багатофакторної задачі із пошуку та оптимізації термоелектричного матеріалу за заданих граничних умов.

Методами дослідження є об'єктно-орієнтоване комп'ютерне моделювання фізичних процесів гарячої екструзії термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те для встановлення оптимальних технологічних режимів синтезу. Для аналізу мікроструктури застосовано методи атомно-силової мікроскопії та оптичної металографії темного поля у поєднанні з алгоритмами комп'ютерного зору на основі згорткових нейронних мереж для автоматизованої семантичної сегментації структурних компонентів. Збір та систематизацію даних із наукової літератури реалізовано за допомогою методів обробки природної мови на базі додатково навченої мовної моделі MatSciBERT з класифікаційними головами для розпізнавання іменованих сутностей та

встановлення зв'язків між ними. Для прогнозування термоелектричних властивостей та розв'язання оберненої задачі оптимізації використано методи машинного навчання, зокрема мультимодальні регресійні моделі та генетичні алгоритми, а також статистичні та аналітичні методи для верифікації отриманих результатів.

Предметом дослідження є закономірності впливу мікроструктури, хімічного складу та технологічних параметрів екструзії на термоелектричні властивості матеріалів на основі Bi-Te та методи їх прогнозування і оптимізації на основі штучного інтелекту та машинного навчання.

Об'єктом дослідження є термоелектричні матеріали на основі Bi-Te, отримані методом екструзії.

2. Формулювання наукового завдання, нове розв'язання якого отримано в дисертації

У дисертації були поставлені наступні завдання, які необхідно було розв'язати для досягнення поставленої мети:

1. Розробити систему на основі великої мовної моделі (від англ. LLM – Large Language Model) для автоматизованого збору термоелектричних параметрів матеріалів із наукової літератури та сформувати структуру бази даних для їх зберігання.

2. Побудувати фізичну, математичну та комп'ютерну моделі процесу гарячої екструзії для встановлення оптимальних технологічних режимів синтезу.

3. Розробити інструмент на основі комп'ютерного зору для автоматизованої сегментації та класифікації мікроструктурних елементів та встановлення кореляційних залежностей між мікроструктурою та термоелектричними властивостями матеріалів.

4. Розробити мультимодальну модель для прогнозування термоелектричних властивостей матеріалів із врахуванням їх мікроструктури, хімічного складу та параметрів екструзії.

5. Реалізувати алгоритм зворотного проєктування для визначення оптимального хімічного складу та технологічних режимів за заданих цільових властивостей.

6. Поєднати розроблені методи у єдину комп'ютерну програму.

3. Наукові положення, розроблені особисто дисертантом, та їх новизна

У дисертаційному дослідженні дисертантом було розроблено та отримано такі нові і важливі результати:

1. Вперше розроблено спеціалізовану систему автоматизованого збору термоелектричних параметрів матеріалів із наукових публікацій, ядром якої є додатково навчена мовна модель MatSciBERT із двома класифікаційними головами для задач NER та RE, що дозволило сформувати структуровану базу даних властивостей екструдованих матеріалів на основі Ві-Те для подальшого прогнозування та оптимізації їх термоелектричних характеристик методами машинного навчання. На незалежній тестовій вибірці модель досягає $F1 = 0,82$ для NER та $F1 = 0,84$ для RE.

2. Вперше запропоновано методику та реалізовано мультимодальну систему комп'ютерного зору для кількісного аналізу мікроструктури екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Ві-Те, що поєднує два масштаби дослідження: атомно-силову мікроскопію для наномасштабної топографії та оптичну металографію темного поля для аналізу структури зерен, що дозволило автоматизувати сегментацію шести класів структурних компонентів та встановити кількісні кореляції між мікроструктурними характеристиками поверхні та термоелектричними властивостями матеріалу.

3. Вперше побудовано мультимодальну модель прогнозування термоелектричних параметрів (коефіцієнт Зеебека S , електропровідність σ , теплопровідність κ , фактор потужності PF , добротність ZT), яка інтегрує три паралельні вхідні гілки: мікроструктурні зображення, структуровані числові дані про хімічний склад та параметри екструзії та контрастивне навчання для узгодження латентних представлень, що дозволило розв'язати обернену багатофакторну задачу оптимізації термоелектричного матеріалу за заданих граничних умов.

4. Вперше реалізовано алгоритм зворотного проектування для екструдованих термоелектричних матеріалів на основі $Bi-Te$, який за заданими цільовими значеннями термоелектричних властивостей прогнозує оптимальний хімічний склад та параметри синтезу, що дозволяє скоротити цикл розробки нових термоелектричних матеріалів із заданими функціональними характеристиками.

Дисертант провів детальний аналіз отриманих наукових результатів і сформулював висновки до кожного розділу дисертації.

4. Обґрунтованість і достовірність наукових положень, висновків і рекомендацій, які захищаються

У ході роботи над дисертацією Короп М.М. здійснив всебічний огляд широкого масиву спеціалізованої наукової літератури, що охоплює публікації у провідних фахових журналах та наукові монографії, зазначені у бібліографічному переліку роботи.

За своєю структурою дисертація включає анотації двома мовами, перелік умовних скорочень, вступну частину, чотири основні розділи, загальні висновки, бібліографічний список, а також додатки, що містять перелік авторських публікацій за тематикою дослідження та акт використання

результатів дисертаційної роботи в Інституті термоелектрики НАН та МОН України. Робота є результатом самостійного наукового дослідження автора. Висновки, рекомендації та пропозиції, що розкривають, зокрема, наукову новизну роботи, сформульовані дисертантом особисто.

Результати дослідження знайшли відображення у наукових публікаціях автора – 8 статтях у виданнях, включених до наукометричної бази Scopus, 4 тезах доповідей у збірниках конференцій, – які висвітлюють основну проблематику та ключові результати дисертації. Апробація отриманих результатів відбувалася через виступи та доповіді на трьох наукових конференціях.

5. Рівень теоретичної підготовки здобувача та рівень його обізнаності з результатами наукових досліджень інших науковців високий. Це видно, як з великої кількості використаних для огляду наукових джерел, так і з доповіді матеріалів дисертації.

Дисертаційна робота є самостійно виконаним науковим дослідженням. Наукові результати, висновки та практичні розробки належать особисто автору. З наукових праць, опублікованих у співавторстві, в дисертації використано лише ті положення та ідеї, які є результатом власних досліджень здобувача.

Дисертантом особисто: побудовано фізичну та комп'ютерну моделі процесу гарячої екструзії у COMSOL Multiphysics та проведено параметричний розрахунок, розроблено архітектуру та програмну реалізацію системи автоматизованого збору термоелектричних параметрів із наукової літератури на основі MatSciBERT, сформовано анотований набір даних із 6000 фрагментів та виконано додаткове навчання мовних моделей, розроблено модель семантичної сегментації мікроструктури та мультимодальну модель прогнозування термоелектричних властивостей, реалізовано алгоритм

зворотного проектування матеріалів та інтегровано всі компоненти у єдину комп'ютерну програму. Спільно із співавторами публікацій проводились вимірювання термоелектричних характеристик зразків, отримання мікроструктурних зображень методами атомно-силової та металографічної мікроскопії та синтез експериментальних зразків методом гарячої екструзії. Співавторами публікацій надано консультації щодо фізичної інтерпретації отриманих результатів.

6. Наукове та практичне значення роботи

Теоретичне значення одержаних результатів. Встановлено кількісні закономірності впливу технологічних режимів гарячої екструзії на термомеханічний стан матеріалу на основі Ві–Те. Підтверджено синергетичний ефект мультимодального підходу до прогнозування термоелектричних властивостей. Встановлено, за допомогою аналізу інтерпретованості (Grad-CAM), що теплопровідність k визначається переважно мікроструктурними дефектами, тоді як коефіцієнт Зеєбека S – хімічним складом та електронною структурою, що узгоджується з фізичними механізмами формування цих властивостей.

Практичне значення одержаних результатів. Розроблено цілісну інтелектуальну систему для комплексного розв'язання оберненої багатофакторної задачі із оптимізації термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те при заданих граничних умовах, що не має аналогів як на вітчизняному, так і на міжнародному рівні. Програма забезпечує автоматизований збір даних із наукової літератури, автоматичну сегментацію мікроструктури, прогнозування термоелектричних властивостей, зворотне проектування оптимального хімічного складу та параметрів синтезу за заданими цільовими властивостями з оцінкою невизначеності прогнозу. Результати роботи

застосовуються при виконанні науково-дослідної роботи в Інституті термоелектрики НАН України та МОН України за відомчим замовленням Відділення матеріалознавства НАН України «Використання методів штучного інтелекту та машинного навчання для підвищення ефективності термоелектричних матеріалів на основі телуриду вісмуту» (номер державної реєстрації 0125U000210).

7. Повнота викладу матеріалів дисертації в публікаціях та особистий внесок здобувача в публікації

Особистий внесок здобувача в публікації такий, який вказано у пункті 5 цього висновку.

Результати перевірки тексту дисертації з використанням антиплагіатної системи Turnitin Similarity показав на 1% схожості з джерелами з Інтернету. Робота відповідає принципам академічної доброчесності.

Наукові статті, опубліковані у періодичних наукових виданнях, проіндексованих у наукометричній базі даних Scopus:

1. Korop, M. (2023). Machine learning in thermoelectric materials science. *Journal of Thermoelectricity*, (1), 44–54. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2023-1-44-54> (Scopus).

2. Anatychuk, L., Korop, M. (2023). Application of machine learning to predict the properties of Bi_2Te_3 based thermoelectric materials. *Journal of Thermoelectricity*, (2), 59–71. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2023-2-59-71> (Scopus).

3. Anatychuk, L., Prybyla, A., Korop, M., Kiziuk, Y., Konstantynovych, I. (2024). Thermoelectric power sources using low-grade heat: Part 1. *Journal of Thermoelectricity*, (1-2), 90–96. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2024-1-2-90-96> (Scopus).

4. Anatychuk, L., Prybyla, A., Korop, M., Kiziuk, Y., Konstantynovych, I.

(2024). Thermoelectric power sources using low-grade heat: Part 2. *Journal of Thermoelectricity*, (3), 36–43. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2024-3-36-43> (Scopus).

5. Anatyshuk, L., Prybyla, A., Korop, M., Kiziuk, Y., Konstantynovych, I. (2024). Thermoelectric power sources using low-grade heat: Part 3. *Journal of Thermoelectricity*, (4), 61–68. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2024-4-61-68> (Scopus).

6. Korop, M., Prybyla, A. (2025). Application of LLM to Search and Systematize the Properties of Thermoelectric Materials in Scientific Literature. *Journal of Thermoelectricity*, (1), 16–25. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2025-1-16-25> (Scopus).

7. Korop, M., Prybyla, A., Lysko, V., Pylypko, V., Khalavka, Y. (2025). Computer Vision as a Tool for Correlation Analysis of Images of the Microstructure of Bi-Te-based Thermoelectric Materials. *Journal of Thermoelectricity*, (4), 64–75. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2025-4-64-75> (Scopus).

8. Korop M., Prybyla A., and Lysko V. Optimization of spiral anisotropic thermoelectric sensors using machine learning algorithms. *Proceedings of SPIE the International Society for Optical Engineering*. 13813, Seventeenth International Conference on Correlation Optics, 138133A (10 November 2025) <https://doi.org/10.1117/12.3093323> (Scopus).

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

1. Korop M., Prybyla A., Lysko V., Methods, and equipment for optimization of Bi-Te based thermoelectric materials using artificial intelligence. *Proceedings of the 41st International and 7th Asian Conference on Thermoelectrics (ICT2025)*, Sendai, Japan, 2025. P. 64.

URL: https://ict2025.jp/item/ICT2025_Poster_abstract_protected.pdf.

2. Korop M., Prybyla A., Lysko V., Optimization of spiral anisotropic

thermoelectric sensors using machine learning algorithms. The 17th International Conference «Correlation Optics 2025», 8-12 September, Chernivtsi, Ukraine. URL: https://zoom.us/jb/doc/_1Iq9kKFROCFhBOx6QCEPg/p/238129514086400.

3. Korop M., Korop A., Vakulenko T., Khalavka Y., An extension of MNPBEM toolbox for the simulation of decahedral silver nanoparticles' electromagnetic properties. The 17th International Conference «Correlation Optics 2025», 8-12 September, Chernivtsi, Ukraine. URL: <https://zoom.us/jb/doc/jO1XWGTCT7Gcz7YDP-lghw/p/238328434720768>.

4. Korop M., Prybyla A., Lysko V., AI-Based methodology for predicting thermoelectric material performance from literature data. XX International Freik Conference on Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems, 6-10 October, Ivano-Frankivsk, Ukraine. С. 126. URL: https://conference.pnu.edu.ua/icpttfn/wp-content/uploads/sites/10/2025/10/Abstract-book_ICPTTFN-XX_2025.pdf.

8. Апробація матеріалів дисертації здійснювалася на таких конференціях:

1. The 41st International and 7th Asian Conference on Thermoelectrics (ICT2025), м. Сендай, Японія, 12-16 червня 2025 р.

2. The 17th International Conference “Correlation Optics 2025” (CORROPT-2025), м. Чернівці, 8-12 вересня 2025 р.

3. The XX International Freik Conference on Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems, м. Івано-Франківськ, 6-10 жовтня 2025 р.

9. Оцінка мови і стилю дисертації

Мова і стиль дисертації відповідають вимогам, що висуваються до праць такого рівня.

10. Відповідність змісту дисертації спеціальності з відповідної галузі знань, з якої вона подається до захисту

Зміст дисертації відповідає чинним вимогам до оформлення дисертації, встановленим освітньо-науковою програмою «Прикладна фізика та наноматеріали» галузі знань 10 – Природничі науки, спеціальності 10 – Прикладна фізика та наноматеріали.

11. Дотримання нормативних вимог щодо оформлення дисертації

Нормативні вимоги щодо оформлення дисертації дотримані повністю.

Рекомендації дисертації до захисту

Дисертаційна робота Коропа Миколи Миколайовича «Використання методів штучного інтелекту та машинного навчання для автоматизації досліджень екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те», подана на здобуття доктора філософії у галузі знань 10 – Природничі науки» за спеціальністю 105 – Прикладна фізика та наноматеріали» за її актуальністю, науково-теоретичним рівнем, новизною постановки та розв'язання проблеми, практичним значенням отриманих результатів відповідає вимогам пунктів 6, 7, 8, 9 «Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії», затвердженого Постановою КМУ від 12.01.2022 р. № 44 (зі змінами, внесеними згідно з Постановою КМУ № 507 від 03.05.2024 р.).

За результатами публічної презентації результатів дисертації та їх обговорення на засіданні кафедри термоелектрики та медичної фізики навчально-наукового інституту фізико-технічних та комп'ютерних наук Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича 13 березня 2026 року дисертацію Коропа Миколи Миколайовича рекомендовано до

захисту в разовій спеціалізованій вченій раді для здобуття ступеня доктора філософії у галузі знань 10 – Природничі науки за спеціальністю 105 – Прикладна фізика та наноматеріали.

Голова засідання,
кандидат фізико-математичних наук,
завідувач кафедри термоелектрики
та медичної фізики ННІФТКН
Чернівецького
національного університету
імені Юрія Федьковича

Роман КОБИЛЯНСЬКИЙ

25 березня 2026 р.

