

## **РЕЦЕНЗІЯ**

**доктора фізико-математичних наук, професора,  
завідувача кафедри комп'ютерних наук  
навчально-наукового інституту фізико-технічних та комп'ютерних наук  
Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича  
УШЕНКА Юрія Олександровича  
на дисертаційну роботу Коропа Миколи Миколайовича  
«Використання методів штучного інтелекту та машинного навчання  
для автоматизації досліджень екструдованих термоелектричних  
матеріалів на основі Ві–Те»,  
подану на здобуття наукового ступеня доктора філософії за  
спеціальністю  
105 – «Прикладна фізика та наноматеріали»,  
галузь знань 10 «Природничі науки»**

### **Актуальність дисертаційного дослідження**

Дисертаційна робота Коропа Миколи Миколайовича присвячена розв'язанню важливої науково-прикладної задачі автоматизації досліджень екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те засобами штучного інтелекту та машинного навчання. Підвищення термоелектричної добротності цих матеріалів є критично важливим для розвитку ефективних перетворювачів енергії, проте традиційний шлях «проб і помилок» залишається повільним і ресурсозатратним. Як слушно зауважує автор дисертації, накопичений у науковій літературі масив експериментальних даних є фрагментарним, неструктурованим і вузькоспеціалізованим, що суттєво ускладнює застосування методів машинного навчання у термоелектричному матеріалознавстві.

Для розв'язання цієї проблеми автором розроблено цілісну мультимодальну систему, яка вперше об'єднує в єдиному інструментальному комплексі автоматизоване формування бази даних термоелектричних властивостей на основі літературних джерел із використанням додатково навченої моделі машинного навчання, аналізі мікроструктурних зображень методами комп'ютерного зору та прогнозуванні хімічного складу оптимального матеріалу для конкретного застосування. Такий підхід дозволяє замінити систематичний перебір складів цілеспрямованим пошуком у

просторі латентних представлень, що скорочує цикл розробки нових матеріалів. З огляду на зазначене, кваліфікаційне дослідження Коропа М. М. є, безперечно, актуальним і відповідає сучасним викликам прикладної фізики та матеріалознавства.

#### **Зв'язок роботи з державними програмами, планами, темами**

Дисертаційне дослідження Коропа М. М. виконано на кафедрі термоелектрики та медичної фізики навчально-наукового інституту фізико-технічних та комп'ютерних наук Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича. Напрями досліджень безпосередньо пов'язані з виконанням кафедральної науково-дослідної теми «Фізика, матеріалознавство та прикладні застосування термоелектрики» (державний реєстраційний номер 0121U110896), а також науково-дослідної роботи Інституту 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» (державний реєстраційний номер 0125U000210). Отримані здобувачем результати є вагомим внеском у реалізацію завдань зазначених тем.

#### **Ступінь обґрунтованості наукових положень, висновків, рекомендацій, сформульованих у дисертації**

Наукові положення, висновки та рекомендації, викладені у дисертаційній роботі Коропа М. М., характеризуються високим ступенем обґрунтованості, логічною послідовністю та достовірністю. Автор поєднує фундаментальні фізичні уявлення про процеси переносу в термоелектричних матеріалах із сучасним апаратом штучного інтелекту та машинного навчання.

Обґрунтованість положень роботи підтверджується:

1. Коректністю математичного та комп'ютерного моделювання: фізична та комп'ютерна моделі гарячої екструзії побудовані у середовищі COMSOL Multiphysics, а параметричний розрахунок дозволив установити кількісні закономірності впливу технологічних режимів на

термомеханічний стан матеріалу та обґрунтувати критерії якості поверхні екструдату.

2. Верифікацією та експериментальною перевіркою: достовірність моделей збору даних і прогнозування доведено на незалежних тестових вибірках (для розпізнавання іменованих сутностей  $F1 = 0,82$ , для встановлення відношень  $F1 = 0,84$ ; для семантичної сегментації  $mIoU \approx 0,73-0,74$ ), а мультимодальна модель прогнозування досягає  $MARE = 5,3 \%$  для показника добротності ZT.
3. Фізичною інтерпретованістю результатів: застосування методу Grad-CAM засвідчило відповідність модельних залежностей реальним фізичним механізмам, а саме теплопровідність визначається переважно мікроструктурними дефектами, а коефіцієнт Зеебека хімічним складом та електронною структурою.
4. Апробацією та публікаціями: за темою дисертації опубліковано 12 наукових праць, з яких 8 статей у виданнях, проіндексованих у наукометричній базі Scopus, 4 тези доповідей. Основні результати пройшли апробацію на міжнародних наукових конференціях, зокрема ICT2025 (Sendai, Japan), Correlation Optics 2025 (Chernivtsi, Ukraine) та XX Freik Conference (Ivano-Frankivsk, Ukraine).

Усі наукові результати, висновки та розроблена інтелектуальна система отримані автором особисто. Сформульовані положення є переконливими, методологічно вивіреними та мають вагоме значення для розвитку прикладної фізики термоелектричних матеріалів.

### **Структура дисертації**

Дисертаційна робота Коропа М. М. складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел (174 найменування) та трьох додатків. Загальний обсяг дисертації становить 185 сторінок, з яких основний текст займає 135 сторінок. Структура роботи є логічною, зрозумілою та відповідає меті та завданнями дослідження.

У вступі обґрунтовано актуальність теми, визначено об'єкт, предмет, мету та задачі дослідження, сформульовано наукову новизну і практичне значення отриманих результатів, наведено дані про особистий внесок здобувача, апробацію та публікації.

У першому розділі проведено ґрунтовний аналітичний огляд сучасного стану застосування методів штучного інтелекту, машинного навчання та комп'ютерного зору в термоелектричному матеріалознавстві. Розглянуто методи прогнозування властивостей, аналізу мікроструктури, генеративні моделі та зворотне проєктування, виявлено основні обмеження наявних підходів, що обґрунтовує постановку задачі дослідження.

У другому розділі розроблено систему автоматизованого збору термоелектричних властивостей із наукової літератури на основі великих мовних моделей. Запропоновано архітектуру системи з додатково навченою моделлю MatSciBERT, оснащеною двома класифікаційними головами для розпізнавання іменованих сутностей та встановлення відношень, а також побудовано фізичну й комп'ютерну моделі гарячої екструзії у середовищі COMSOL Multiphysics.

У третьому розділі описано мультимодальну систему комп'ютерного зору та прогнозування. Розроблено модель семантичної сегментації мікроструктури на основі архітектури U-Net з енкодером ResNet-34, механізмами Attention Gates та модулем Feature Pyramid Network, а також мультимодальну модель прогнозування властивостей із крос-модальною увагою на основі архітектури Transformer і контрастивним навчанням.

У четвертому розділі представлено напрями використання розробленого програмного комплексу, а саме: зворотнє проєктування хімічного складу термоелектричних матеріалів, запропоновано алгоритм багатокритеріальної оптимізації для трьох типів термоелектричних пристроїв та концепцію автоматизованого обладнання для інтелектуального керування синтезом термоелектричних матеріалів.

Висновки містять підсумкові результати дослідження, що підтверджують виконання поставлених завдань.

### **Наукова новизна**

Дисертаційна робота Коропа М. М. містить вагомі наукові результати, що мають суттєву новизну в галузі автоматизації досліджень термоелектричних матеріалів. Основні аспекти наукової новизни полягають у наступному:

1. Вперше розроблено систему автоматизованого збору термоелектричних параметрів матеріалів із наукових публікацій, що дозволило сформувати структуровану базу даних властивостей екструдованих матеріалів на основі Ві–Те для подальшого прогнозування та оптимізації їхніх характеристик.
2. Вперше запропоновано методику та реалізовано мультимодальну систему комп'ютерного зору для кількісного аналізу мікроструктури екструдованих термоелектричних матеріалів, шлях поєднання АСМ зображень, оптичної металографії темного поля для автоматизованої сегментації структурних особливостей і встановлення кількісних кореляцій між мікроструктурою та властивостями.
3. Вперше побудовано мультимодальну модель прогнозування термоелектричних параметрів, що дозволило розв'язати обернену багатofакторну задачу оптимізації матеріалу за заданих граничних умов.
4. Вперше реалізовано алгоритм зворотного проєктування для екструдованих матеріалів на основі Ві–Те, для пошуку оптимального хімічного складу і параметрів синтезу, що дозволяє скоротити цикл розробки нових матеріалів шляхом заміни систематичного перебору цілеспрямованим пошуком.
5. Вперше створено комплексну комп'ютерну програму, що об'єднує інструменти автоматизованого збору даних, моделювання екструзії, мультимодального аналізу мікроструктури, прогнозування властивостей

та зворотного проектування, забезпечуючи автоматизацію повного циклу дослідження екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те.

Наукова новизна результатів підтверджується їх апробацією на міжнародних наукових конференціях та публікаціями у провідних рецензованих виданнях, що індексуються у базі Scopus.

### **Практичне значення одержаних результатів**

Дисертаційна робота Коропа М. М. має суттєве практичне значення, яке полягає у створенні інструментарію для автоматизації трудомістких етапів дослідження та оптимізації перспективних термоелектричних матеріалів. Основні аспекти практичної цінності роботи:

1. Розроблено цілісну інтелектуальну комп'ютерну програму для комплексного розв'язання оберненої багатофакторної задачі оптимізації термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те за заданих граничних умов, що, за оцінкою автора, не має аналогів як на вітчизняному, так і на міжнародному рівні.
2. Створено систему автоматизованого збору та систематизації даних із наукової літератури, що замінює надзвичайно трудомісткий ручний процес і дозволяє формувати масштабні структуровані бази даних властивостей матеріалів із посиланнями на першоджерела.
3. Розроблено засоби мультимодального аналізу мікроструктури та прогнозування властивостей, які забезпечують інженерам і дослідникам зручний інструмент для встановлення кількісних зв'язків «мікроструктура – склад – властивості».
4. Алгоритм зворотного проектування з оцінкою невизначеності прогнозу формує рекомендації щодо пріоритетних експериментів, що суттєво скорочує цикл розробки нових матеріалів із заданими функціональними характеристиками.
5. Результати роботи застосовуються при виконанні науково-дослідної роботи в Інституті термоелектрики НАН України та МОН України, а

також мають дидактичну цінність і можуть бути інтегровані в освітній процес при викладанні дисциплін, пов'язаних із машинним навчанням, комп'ютерним моделюванням та фізикою термоелектричних матеріалів.

Практична значущість роботи підтверджується відповідними публікаціями та використанням отриманих результатів у науково-дослідній діяльності.

### **Дискусійні положення та зауваження до змісту дисертаційного дослідження**

Оцінюючи дисертаційну роботу Коропа М. М. як глибоке та завершене наукове дослідження, водночас вважаю за доцільне висловити певні зауваження та побажання дискусійного характеру:

1. Алгоритм зворотного проєктування прогнозує потенційно досяжне значення добротності  $ZT \approx 1,15$ , що у 1,32 рази перевищує експериментальний максимум. Це результат високого практичного інтересу, проте він залишається модельним прогнозом. Доцільним було б навести експериментальне підтвердження хоча б для одного синтезованого складу, рекомендованого системою, що остаточно підтвердило б прогностичну спроможність розробленого підходу.
2. Моделі розпізнавання сутностей та семантичної сегментації навчались і тестувались на порівняно невеликих тестових вибірках (зокрема 600 текстових фрагментів та 50 мікроструктурних зображень). Бажано було б детальніше обговорити питання узагальнювальної здатності моделей та ризику перенавчання, а також перспективи розширення навчальних наборів.
3. У роботі описано модуль генеративної аугментації мікроструктурних зображень на основі CycleGAN, проте зазначено, що ця функціональність потребує подальшої валідації. Доцільно було б навести кількісну оцінку впливу синтетичних даних на точність моделей сегментації та прогнозування.

4. Цільова функція мультимодальної моделі та алгоритми багатокритеріальної оптимізації використовують декілька вагових коефіцієнтів. У тексті недостатньо детально обґрунтовано процедуру вибору цих коефіцієнтів; було б корисно навести аналіз чутливості результатів до зміни їх значень.
5. У тексті дисертації зустрічаються поодинокі стилістичні неточності та поєднання англійських і українських позначень параметрів у деяких таблицях і рисунках, що, втім, не впливає на змістовну цілісність роботи та сприйняття наукових результатів.

Зазначені зауваження та дискусійні питання мають рекомендаційний характер, не применшують високої наукової та практичної цінності дисертаційного дослідження Коропа Миколи Миколайовича, не впливають на обґрунтованість сформульованих наукових положень і не заперечують загальну позитивну оцінку роботи.

#### **Загальний висновок**

Дисертаційна робота Коропа Миколи Миколайовича на тему «Використання методів штучного інтелекту та машинного навчання для автоматизації досліджень екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Ві-Те» є завершеним самостійним науковим дослідженням, що розв'язує важливу науково-прикладну задачу автоматизації дослідження та оптимізації термоелектричних матеріалів. Автор продемонстрував глибоке володіння сучасним апаратом штучного інтелекту, машинного навчання й комп'ютерного моделювання, запропонувавши оригінальну мультимодальну методологію, доведену до рівня цілісного програмного комплексу.

Основні положення та висновки дисертації мають високу наукову новизну, теоретичне та практичне значення. Під час аналізу тексту дисертації порушень академічної доброчесності не виявлено. Результати роботи пройшли належну апробацію на міжнародному рівні та застосовуються у науково-дослідній діяльності.

Дисертаційна робота Коропа М. М. за своєю актуальністю, науково-теоретичним рівнем, обґрунтованістю результатів та обсягом проведених досліджень цілком 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 Кабінету Міністрів України № 44 від 12 січня 2022 року (зі змінами, внесеними згідно з Постановами КМУ № 341 від 21.03.2022 р., № 502 від 19.05.2023 р. та № 507 від 03.05.2024 р.).

Враховуючи значущість отриманих результатів, вважаю, що Короп Микола Миколайович заслуговує на присудження наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 105 «Прикладна фізика та наноматеріали» у галузі знань 10 «Природничі науки».

Рецензент –

доктор фізико-математичних наук, професор,  
завідувач кафедри комп'ютерних наук  
навчально-наукового інституту фізико-технічних  
та комп'ютерних наук  
Чернівецького національного університету  
імені Юрія Федьковича

Юрій УШЕНКО

Підпис *Ушеника Ю.* засвідчую  
Учений секретар Чернівецького національного  
університету імені Юрія Федьковича  
*Лавровська І. С.*  
" 27 " травня 2024

