

Відгук

офіційного опонента Никируя Любомира Івановича 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 з галузі знань

10 Природничі науки за спеціальністю 105 Прикладна фізика та наноматеріали

Актуальність теми дисертаційної роботи. Дисертаційна робота присвячена актуальній науково-прикладній проблемі автоматизації досліджень термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те із використанням сучасних методів штучного інтелекту та машинного навчання. Актуальність теми зумовлена стрімким розвитком енергоефективних технологій, необхідністю створення високоефективних термоелектричних матеріалів для систем перетворення енергії та охолодження, які б володіли високими значеннями термоелектричної добротності та вибір яких був би економічно обґрунтованим, а також зростанням ролі цифрових методів аналізу у сучасному матеріалознавстві.

Особливої актуальності роботі надає комплексний підхід до розв'язання задачі, який поєднує комп'ютерне моделювання технологічних процесів екструзії, аналіз мікроструктурних зображень у комплексі із вимогами до якості ефективних термоелектричних матеріалів, автоматизований збір даних з наукової літератури та прогнозування термоелектричних властивостей матеріалів. Такий підхід відповідає сучасним світовим тенденціям розвитку обробки великих даних у виборі матеріалів (materials informatics) та концепції data-driven materials science, де методи машинного навчання стають важливим інструментом прискорення пошуку та оптимізації функціональних матеріалів.

Важливим є і практичний аспект дослідження, оскільки запропоновані методи та створене програмне забезпечення орієнтовані на скорочення тривалості й вартості експериментального пошуку оптимальних термоелектричних матеріалів та режимів їх синтезу. Отримані результати можуть бути використані у наукових дослідженнях, а також у прикладних розробках у галузі енергетики, сенсорики та термоелектричних

перетворювачів енергії.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.

Дисертаційна робота виконувалась на базі на кафедрі термоелектрики та медичної фізики Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича. Тематика роботи узгоджується з науковим напрямком кафедри та є складовою кафедральної науково-дослідної теми «Фізика, матеріалознавство та прикладні застосування термоелектрики» (номер державної реєстрації 0121U110896), а також частково виконувалася у рамках проєкту НАН України «Використання методів штучного інтелекту та машинного навчання для підвищення ефективності термоелектричних матеріалів на основі телуриду вісмуту» (номер державної реєстрації 0125U000210), що вказує на експертизу теми дисертації та на актуальність і апробацію отриманих результатів.

Мета та загальна характеристика роботи. Метою дисертаційної роботи є розробка методів та програмних засобів на основі штучного інтелекту і машинного навчання для автоматизації досліджень екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те, зокрема для збору й систематизації даних, аналізу мікроструктури, прогнозування термоелектричних властивостей та оптимізації складу і технологічних параметрів синтезу.

Аналіз змісту дисертації.

Ознайомлення з дисертацією розкриває структуру дисертаційної роботи: вона складається зі вступу, 4 розділів та загальних висновків до роботи. Загальний обсяг дисертації становить 185 сторінки, з них 135 сторінок припадає на основний текст, у тому числі 51 рисунок та 13 таблиць. Список використаних джерел містить 174 найменування.

У **Вступі** обґрунтовано актуальність теми дослідження, викладено мету роботи та окреслено завдання, необхідні для її досягнення, сформульовано об'єкт і предмет дослідження, наукову новизну та практичну цінність отриманих результатів, задекларовано особистий внесок автора при виконанні дисертаційної роботи.

У **першому розділі** дисертаційної роботи наведено ґрунтовний огляд сучасного стану досліджень термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те, отриманих методом гарячої екструзії, а також проаналізовано сучасні підходи щодо застосування методів

штучного інтелекту та машинного навчання у матеріалознавстві. Автором детально розглянуто фізичні підходи до визначення термоелектричних властивостей, наведено вплив мікроструктури та технологічних параметрів на характеристики матеріалів, а також проаналізовано сучасні алгоритми прогнозування властивостей і аналізу структурних даних.

На основі проведеного аналізу обґрунтовано необхідність створення комплексної системи автоматизованого збору, структуризації та аналізу даних для задач термоелектричного матеріалознавства. Розділ демонструє високий рівень опрацювання наукової літератури та логічно призводить до формулювання мети і завдань дисертаційного дослідження.

У **другому розділі** автором побудовано фізичну та комп'ютерну модель процесу гарячої екструзії термоелектричних матеріалів на основі Ві-Те у середовищі COMSOL Multiphysics. Проведено параметричний аналіз впливу температури та швидкості деформації на напружено-деформований стан матеріалу, встановлено закономірності зміни сили екструзії та структурних характеристик при різних технологічних режимах.

Окрему увагу приділено розробці системи автоматизованого збору термоелектричних параметрів із наукових публікацій на основі мовної моделі MatSciBERT та алгоритмів розпізнавання іменованих сутностей і встановлення зв'язків між ними. Отримані результати формують основу для подальшого створення структурованої бази даних та використання методів машинного навчання для прогнозування властивостей матеріалів.

У **третьому розділі** запропоновано та реалізовано мультимодальну систему комп'ютерного зору для кількісного аналізу мікроструктури екструдованих термоелектричних матеріалів. Автором поєднано дані атомно-силової мікроскопії та оптичної металографії темного поля, що дозволило автоматизувати сегментацію структурних компонентів та встановити кореляції між мікроструктурними характеристиками і термоелектричними параметрами матеріалу.

Також у розділі побудовано модель прогнозування ключових термоелектричних параметрів, яка інтегрує мікроструктурні зображення, числові дані про склад матеріалу та параметри екструзії. Проведений аналіз інтерпретованості моделей підтвердив фізичну узгодженість отриманих результатів і дозволив встановити внесок окремих факторів у формування термоелектричних властивостей.

У **четвертому розділі** розглянуто практичне застосування розроблених методів

для задач оптимізації термоелектричних матеріалів на основі Bi-Te . Автором реалізовано алгоритм зворотного проектування, який за заданими цільовими характеристиками прогнозує оптимальний хімічний склад та параметри синтезу матеріалу. Запропонований підхід дозволяє суттєво скоротити кількість експериментальних підходів при пошуку нових матеріалів із покращеними властивостями.

У розділі також описано створення цілісного програмного комплексу, який об'єднує автоматизований збір даних, моделювання процесів екструзії, аналіз мікроструктури, прогнозування властивостей та оптимізацію матеріалів у межах єдиного програмного середовища. Це свідчить про завершений характер проведеного дослідження та його практичну спрямованість

Дисертація М.М. Коропа завершується загальними висновками, що стисло відображають суть основних здобутків дисертаційної роботи.

Наукова обґрунтованість і відповідність темі дисертації отриманих результатів та їх достовірність. На підставі наведеної у дисертації інформації можна твердити, що поставлені наукові задачі були цілісно розглянуті і розв'язані за допомогою сучасних добре апробованих методів та засобів дослідження характеристик матеріалів, що дозволяє говорити про достовірність та надійність отриманих результатів.

Наукова обґрунтованість результатів дисертаційної роботи забезпечується комплексним поєднанням сучасних методів комп'ютерного моделювання, машинного навчання, аналізу мікроструктурних зображень та статистичної обробки даних. У роботі використано сучасні програмні та математичні інструменти, зокрема COMSOL Multiphysics, нейромережеві архітектури для задач комп'ютерного зору, методи обробки на базі MatSciBERT, а також підходи мультимодального машинного навчання для прогнозування термоелектричних характеристик матеріалів. Отримані результати узгоджуються з сучасними уявленнями про фізичні механізми формування властивостей термоелектричних матеріалів та базуються на достатньому обсязі експериментальних і літературних даних.

Достовірність результатів підтверджується використанням апробованих методик дослідження, проведенням тестування моделей на незалежних вибірках, застосуванням кількісних критеріїв оцінювання якості моделей (F1-score, mIoU, MAPE, MAE тощо), а

також фізичною інтерпретацією отриманих закономірностей. Важливим підтвердженням достовірності є також практична реалізація створених алгоритмів у вигляді єдиного програмного комплексу та апробація результатів на міжнародних наукових конференціях і у фахових публікаціях, зокрема у виданнях, що індексуються у базі Scopus.

Отримані результати повністю відповідають темі дисертаційної роботи, меті та поставленим завданням. Усі основні етапи дослідження, від автоматизованого збору та аналізу даних до прогнозування термоелектричних властивостей і реалізації алгоритмів зворотного проєктування матеріалів, логічно взаємопов'язані та формують завершену наукову концепцію автоматизації досліджень термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те із використанням методів штучного інтелекту та машинного навчання.

Наукова новизна отриманих результатів. У дисертації отримано нові наукові результати, які свідчать про суттєвий внесок автора в досліджувану проблему. Найважливіші положення, що відображають наукову новизну роботи:

1. У дисертаційній роботі розроблено комплексний підхід до автоматизації досліджень екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те із використанням сучасних методів штучного інтелекту, машинного навчання та мультимодального аналізу даних. Вперше створено спеціалізовану систему автоматизованого збору термоелектричних параметрів на основі наукових публікацій, базуючись додатково навченою мовною моделлю MatSciBERT із реалізацією задач розпізнавання іменованих сутностей та встановлення зв'язків між ними, що дозволило сформувати структуровану базу даних для подальшого прогнозування властивостей термоелектричних матеріалів.

2. Важливим науковим результатом є запропонована автором мультимодальна система комп'ютерного зору для кількісного аналізу мікроструктури екструдованих матеріалів, яка поєднує дані атомно-силової мікроскопії та оптичної металографії. Вперше реалізовано підхід до автоматизованої сегментації структурних компонентів із подальшим встановленням кількісних кореляцій між мікроструктурою та термоелектричними характеристиками матеріалів.

3. Наукову цінність мають побудовані мультимодальні моделі прогнозування термоелектричних параметрів, які інтегрують мікроструктурні зображення, дані про хімічний склад та параметри екструзії в єдиному інформаційному просторі. Запропоновані моделі забезпечили середню похибку прогнозування

коефіцієнта термоелектричної ефективності ZT на рівні близько 5,3 %, а для окремих фізичних параметрів значення MAPE знаходилися в межах 4,2–7,8 %, що свідчить про високу ефективність розробленого підходу.

4. Важливим елементом наукової новизни є також реалізація алгоритму зворотного проєктування термоелектричних матеріалів на основі Bi–Te, який за заданими функціональними характеристиками прогнозує оптимальні параметри синтезу та хімічний склад матеріалу. Запропонований підхід відкриває перспективи переходу від традиційного емпіричного пошуку до керованого data-driven проєктування термоелектричних матеріалів нового покоління.

Рівень виконання поставленого завдання та опанування здобувачем методологією наукової діяльності. Поставлені у дисертаційній роботі М.М. Коропа наукові завдання виконано у повному обсязі та на належному науковому рівні.

Рівень виконання поставлених у дисертаційній роботі завдань є високим. Автором успішно реалізовано комплексне дослідження, яке охоплює всі основні етапи сучасного data-driven у матеріалознавстві: від аналізу літературних джерел та формування баз даних до комп'ютерного моделювання технологічних процесів, автоматизованого аналізу мікроструктури, побудови моделей машинного навчання та практичної реалізації програмного комплексу для прогнозування термоелектричних властивостей матеріалів. Поставлені у роботі завдання вирішені у повному обсязі, а отримані результати характеризуються логічною завершеністю та практичною спрямованістю.

Дисертант продемонстрував належний рівень володіння методологією наукових досліджень, уміння методично правильно формулювати наукову проблему, обирати оптимальні методи її розв'язання та критично аналізувати отримані результати. У роботі простежується впевнене володіння сучасними методами математичного моделювання, комп'ютерного зору, аналізу даних та машинного навчання, а також здатність інтегрувати міждисциплінарні підходи для вирішення складних прикладних задач у галузі термоелектричного матеріалознавства. Важливим підтвердженням належного рівня наукової підготовки здобувача є використання сучасних програмних платформ, нейромережових архітектур та методів оцінювання ефективності моделей, що відповідає актуальному рівню досліджень у галузі.

Здобувач здійснив фаховий критичний аналіз літературних джерел,

обґрунтування вибору методів дослідження та інтерпретації отриманих результатів. Представлена робота характеризується логічною структурою, обґрунтованістю висновків та високим рівнем наукової аргументації, що в цілому свідчить про належний рівень підготовки здобувача як самостійного дослідника.

Практичне значення результатів роботи. Матеріали, досліджувані у дисертації, мають добру перспективу практичного застосування у термоелектричних пристроях перетворення енергії високої ефективності.

Практичне значення результатів дисертаційної роботи полягає у створенні програмно-алгоритмічного комплексу для автоматизації досліджень термоелектричних матеріалів на основі Bi-Te , який може бути використаний у наукових установах, закладах вищої освіти та дослідницьких лабораторіях, що займаються розробкою функціональних матеріалів. Запропоновані методи автоматизованого збору даних із баз наукових публікацій, аналізу мікроструктури та прогнозування термоелектричних характеристик дозволяють суттєво скоротити час обробки експериментальних результатів і зменшити кількість дорогівартісних експериментів при оптимізації складу та при технології синтезу матеріалів.

Практичну цінність мають і розроблені моделі комп'ютерного зору для автоматизованої сегментації мікроструктурних компонентів та мультимодальні моделі прогнозування коефіцієнта термоелектричної ефективності ZT . Отримані результати можуть бути використані для оптимального пошуку нових термоелектричних матеріалів із покращеними характеристиками, а також для оптимізації технологічних параметрів гарячої екструзії. Крім того, створені алгоритми мають універсальний характер та можуть бути адаптовані для інших класів функціональних матеріалів і задач сучасного матеріалознавства.

Показано можливість прогнозування оптимальних параметрів синтезу та вибору складу матеріалу за заданими функціональними характеристиками. Такий підхід створює передумови для переходу до інтелектуального проєктування термоелектричних матеріалів нового покоління та може бути корисним для прикладних розробок у галузі енергетики, систем рекуперації тепла та термоелектричного охолодження.

Результати дослідження мають також і практичне значення для освітнього процесу, оскільки можуть бути використані при підготовці фахівців у галузі

термоелектричного матеріалознавства.

Відсутність (наявність) порушень академічної доброчесності.

Аналіз тексту дисертації, перелік публікацій дисертанта, декларація його особистого внеску та посилання на роботи інших авторів дають підстави стверджувати про відсутність порушень академічної доброчесності. Всього за темою дисертації автором разом із співавторами опубліковано 8 наукових статей у фахових наукових виданнях та патент України на корисну модель. Результати дисертації апробовано на 4-ох міжнародних конференціях.

Відповідність дисертації профілю спеціалізованої вченої ради.

За змістом дисертація Коропа Миколи Миколайовича «Використання методів штучного інтелекту та машинного навчання для автоматизації досліджень екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те» представлена на здобуття ступеня доктора філософії повністю відповідає спеціальності 105 Прикладна фізика та наноматеріали.

Загальна оцінка дисертаційної роботи є позитивною, проте є ряд зауважень недоліків, уникнення яких значно б покращило загальне враження.

1. У роботі значну увагу приділено методам комп'ютерного аналізу мікроструктури та прогнозуванню термоелектричних властивостей, однак експериментальна частина, пов'язана з підтвердженням отриманих закономірностей, представлена дещо обмежено. Зокрема, для результатів аналізу мікроструктури та прогнозування параметра ZT доцільно було б навести ширше порівняння результатів моделювання із незалежними експериментальними вимірюваннями для серії зразків, отриманих при різних режимах екструзії. Це дозволило б більш переконливо підтвердити практичну достовірність та здатність запропонованих моделей узагальнювати експериментальні набори даних.

2. У дисертаційній роботі реалізовано комплексний програмний підхід для дослідження матеріалів системи Ві–Те, однак практична апробація алгоритмів переважно обмежена саме цим класом термоелектричних матеріалів. Для підтвердження універсальності запропонованої методології доцільним було б продемонструвати можливість її адаптації до інших типів функціональних матеріалів або хоча б провести порівняльний тест на обмеженому наборі даних іншої матеріальної системи.

3. У розділі, присвяченому автоматизованому вилученню даних із наукових публікацій за допомогою MatSciBERT, описано архітектуру NLP-системи та загальні принципи побудови knowledge graph, однак недостатньо висвітлено процедуру валідації коректності автоматично витягнутих параметрів. Зокрема, доцільно було б навести статистичну оцінку похибок розпізнавання сутностей та зв'язків або приклади типових помилок моделі при обробці наукових текстів.

4. У підрозділах 2.4.2.1–2.4.2.5 наведено результати COMSOL-моделювання процесу гарячої екструзії Bi_2Te_3 при різних температурах і швидкостях деформації, однак вибір окремих параметрів матеріальної моделі (наприклад, коефіцієнта повзучості $A = 0,01 \text{ c}^{-1}$, показника $n = 4$ та коефіцієнта теплопередачі $h = 10^2 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$) наведено без достатнього обґрунтування їх фізичного походження чи посилання на експериментальні джерела. Було б доцільно додатково проаналізувати чутливість результатів моделювання до варіації цих параметрів.

5. У п. 3.1 вказано, що «Мікроструктура термоелектричних матеріалів охоплює розмір зерен, густину меж зерен, наявність дислокацій, нанопреципітатів вторинних фаз та пористість...», однак, у роботі не зустрічається опис того, як саме геометричні параметри цих об'єктів впливають на ефективність термоелектричного матеріалу та які існують фізичні інтерпретації таких впливів.

6. Деколи зустрічаються у описки чи неточності. Напр., п. 3.1, стор. 111, 3-ій рядок зверху – вказано слово «nthvjtktrn» (вочевидь, це помилка набору); у кількох місцях є повтори конструкцій: «доцільно було б». Краще б їх частково замінити іншими схожими за змістом вразами.

Однак, наведені недоліки не мають системного характеру і не призводять до хибного сприйняття змісту дисертації; вони у жодному разі не зменшують наукову та практичну цінність дисертаційної роботи, не впливають на її високий науковий рівень.

Загальні висновки. Дисертаційна робота Коропа Миколи Миколайовича «Використання методів штучного інтелекту та машинного навчання для автоматизації досліджень екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Bi-Te » є завершеним, цілісним та аргументованим дослідженням, яке за своїм змістом, актуальністю, новизною отриманих результатів відповідає «Вимогам до оформлення дисертації», затверджених Наказом МОН України № 40 від 12.01.2017 р., та «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 12.01.2022 року (із змінами, внесеними згідно з Постановою Кабінету Міністрів України № 431 від 21.03.2022 р., № 502 від 19.05.2023 та № 507 від 03.05.2024). Текст дисертації оформлено відповідно до чинних вимог, виклад змісту чітко структуровано та подано на належному науковому рівні.

На підставі наведених вище міркувань та зауважень вважаю, що автор дисертації, Корот Микола Миколайович, безперечно заслуговує присудження йому ступеня доктора філософії з галузі знань 10 Природничі науки за спеціальністю 105 – Прикладна фізика та наноматеріали.

Офіційний опонент:

завідувач кафедри фізики та астрономії
Карпатського національного університету
імені Василя Стефаника,

кандидат фізико-математичних наук, професор



Любомир НИКИРУЙ



Микола М. Корот завідувач кафедри фізики та астрономії
26.05.2026р.