

## **ВІДГУК**

офіційного опонента – доктора фізико-математичних наук, професора,  
професора кафедри загальної фізики

Національного технічного університету України

«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

**СНАРСЬКОГО Андрія Олександровича**

на дисертаційну роботу **Коропа Миколи Миколайовича**

на тему «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**

Пошук ефективних термоелектричних матеріалів є одним із пріоритетних напрямів сучасного матеріалознавства, оскільки безпосередньо пов'язаний із задачами енергозберігаючих технологій, утилізації низькопотенційного тепла та спеціалізованого охолодження без рухомих елементів. Базовими матеріалами для практичних застосувань залишаються сполуки на основі телуриду вісмуту (Ві–Те), для яких упродовж останніх десятиліть, незважаючи на значні теоретичні та експериментальні зусилля, не спостерігалось радикального зростання коефіцієнта добротності ZT.

Одночасно з цим, методи штучного інтелекту та машинного навчання за останні роки розвинулись із суто допоміжного інструменту в самостійну методологічну парадигму матеріалознавства. Натомість, основним стримуючим чинником їхнього широкого впровадження у термоелектриці залишається фрагментарність, неоднорідність та слабка структурованість наявних експериментальних даних, що ускладнює побудову надійних моделей для якісного прогнозу властивостей термоелектричних матеріалів. Особливо це стосується екструдованих полікристалічних матеріалів, властивості яких

визначаються складною взаємодією хімічного складу, мікроструктури та технологічних режимів синтезу.

З огляду на це, дисертаційне дослідження Коропа М. М., присвячене розробці мультимодальної інтелектуальної системи для автоматизації досліджень екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те, є безумовно актуальним. Робота безпосередньо спрямована на розв'язання важливої науково-прикладної задачі, а саме створення цілісного інструментального комплексу, що поєднує автоматизований збір даних із наукової літератури, фізико-математичне моделювання процесу гарячої екструзії, кількісний аналіз мікроструктурних зображень та прогнозування термоелектричних властивостей із подальшим зворотним проектуванням оптимального хімічного складу та технологічних режимів.

Поєднання методів обробки природної мови, комп'ютерного зору та мультимодальних моделей глибокого навчання з фізичним моделюванням процесу екструзії робить обраний автором дисертації напрям дослідження своєчасним та перспективним як для прикладної фізики й наноматеріалів, так і для подальшого розвитку методології інтелектуального проектування функціональних матеріалів.

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

Дисертаційна робота Коропа М. М. виконана відповідно до планів науково-дослідних робіт Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича в межах кафедральної тематики 2021–2025 років «Фізика, матеріалознавство та прикладні застосування термоелектрики» (№ 0121U110896), а також у безпосередньому зв'язку з виконанням Інститутом термоелектрики НАН України та МОН України науково-дослідної роботи 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).

Особистий внесок здобувача у виконання зазначених наукових тем полягає у розробці комплексу математичних моделей, алгоритмів машинного навчання та програмного інструментарію для автоматизації дослідження екструдованих термоелектричних матеріалів. Отримані результати становлять вагомий внесок у реалізацію завдань зазначених програм і свідчать про наукову та практичну значущість проведеного дослідження.

### **Оцінка обґрунтованості наукових результатів дисертації, їх достовірності та новизни**

Аналіз представленої роботи дозволяє стверджувати, що наукові положення, висновки та результати, сформульовані в дисертації, мають високий ступінь обґрунтованості та достовірності. Це підтверджується коректним застосуванням сучасного математичного апарату та фізичних моделей, а також методів обробки природної мови, комп'ютерного зору й глибокого навчання у поєднанні з експериментальною перевіркою на реальних зразках.

Наукова новизна одержаних результатів полягає в наступному:

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 Зеєбека  $S$ , електропровідність  $\sigma$ , теплопровідність  $\kappa$ , 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 проєктування для екструдованих термоелектричних матеріалів на основі  $Vi-Ge$ , 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.

Достовірність отриманих результатів підтверджується збігом результатів теоретичних розрахунків і даних мультимодальної моделі з експериментальними вимірюваннями термоелектричних параметрів реальних зразків, синтезованих методом гарячої екструзії, а також інтерпретованістю моделей за методом Grad-CAM, що засвідчила фізично обґрунтовану поведінку: при прогнозуванні теплопровідності модель фокусується на структурних дефектах, тоді як для коефіцієнта Зеєбека визначальним є внесок структурованих даних про хімічний склад і електронну структуру. Результати дисертації пройшли широку апробацію на міжнародних наукових

конференціях та опубліковані у виданнях, що індексуються наукометричною базою Scopus.

### **Оцінка змісту дисертації, її завершеність та дотримання принципів академічної доброчесності**

Дисертація Коропа М. М. є завершеною науковою працею, виконаною на високому методичному рівні. Робота має логічну структуру, що відповідає поставленій меті та задачам дослідження, і складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел та трьох додатків.

У *першому* розділі автором проведено ґрунтовний аналіз сучасного стану досліджень у галузі термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те, синтезованих методом гарячої екструзії, та застосування методів штучного інтелекту й машинного навчання у термоелектричному матеріалознавстві. Розглянуто кероване та некероване машинне навчання, нейронні мережі, методи прогнозування властивостей термоелектричних матеріалів, аналіз мікроструктури методами комп'ютерного зору, фізично інформоване машинне навчання, активне навчання й автономні експерименти, а також генеративні моделі та зворотне проєктування. На основі проведеного аналізу автор обґрунтовано формулює науково-прикладну задачу – необхідність створення єдиної прогностичної моделі, яка комплексно враховує мікроструктуру, хімічний склад та технологічні параметри.

У *другому* розділі представлено фізико-математичну та комп'ютерну модель процесу гарячої екструзії термоелектричного матеріалу на основі Ві–Те, реалізовану в середовищі COMSOL Multiphysics 6.2. У цьому ж розділі описано архітектуру системи автоматизованого збору даних на базі додатково навченої мовної моделі MatSciBERT та створення бази даних термоелектричних властивостей.

У *третьому* розділі автор розгортає основну методологічну складову дослідження – мультимодальну систему комп'ютерного зору для аналізу мікроструктури екструдованих матеріалів на основі Ві–Те. Інтеграція атомно-силової мікроскопії та оптичної металографії темного поля дозволила

реалізувати автоматизовану сегментацію шести класів структурних компонентів, а побудована мультимодальна модель прогнозування з контрастивним навчанням і крос-модальною увагою забезпечила інтеграцію зображень із числовими даними про хімічний склад та параметри екструзії. Досягнутий показник  $MARE = 5,3 \%$  для ZT свідчить про якісно вищий рівень прогнозування порівняно з одномодальними підходами.

У *четвертому* розділі здобувач розкриває практичну цінність розробленої системи. Реалізовано алгоритм зворотного проєктування, що за заданими цільовими значеннями термоелектричних властивостей прогнозує оптимальний хімічний склад і параметри синтезу з оцінкою невизначеності прогнозу через ансамбль моделей. Окремо розроблено алгоритм багатокритеріальної оптимізації для трьох типів термоелектричних пристроїв генераторних, охолоджувальних модулів Пельтьє та сенсорів, а також систему інтелектуального управління технологічним процесом екструзії. Усі компоненти інтегровано в єдину комп'ютерну програму.

Усі розділи дисертації логічно пов'язані між собою, а отримані висновки відповідають поставленим задачам. Робота характеризується завершеністю та цілісністю.

Щодо академічної доброчесності, аналіз дисертації, анотацій та опублікованих праць свідчить про чітке дотримання здобувачем принципів академічної доброчесності. У роботі відсутні факти плагіату, фабрикації чи фальсифікації даних. Посилання на джерела є коректними, а результати, отримані у співавторстві, чітко розмежовані з особистим внеском здобувача, що відображено в публікаціях.

### **Практичне значення одержаних результатів**

Практичне значення дисертаційного дослідження Коропа М. М. визначається спрямованістю розроблених методів і програмного інструментарію на розв'язання конкретних інженерно-фізичних задач у галузі проєктування сучасних термоелектричних матеріалів та пристроїв.

До основних практичних результатів роботи слід віднести:

1. Цілісне програмне забезпечення, яке поєднує в межах єдиного інструментального середовища автоматизований збір даних із наукової літератури, комп'ютерне моделювання процесів гарячої екструзії, мультимодальний аналіз мікроструктури, прогнозування термоелектричних властивостей та зворотне проєктування матеріалів. Розробка дозволяє автоматизувати повний цикл дослідження екструдованих матеріалів на основі Ві–Те.
2. Структуровану базу даних термоелектричних властивостей екструдованих матеріалів на основі Ві–Те, автоматично сформовану з наукових публікацій за допомогою додатково навченої мовної моделі MatSciBERT із класифікаційними головами для NER ( $F1 = 0,82$ ) та RE ( $F1 = 0,84$ ). Це створює надійний фундамент для подальших досліджень у галузі та усуває основне обмеження для широкого впровадження методів машинного навчання, а саме фрагментарність та неструктурованість наявних даних.
3. Мультимодальну прогностичну модель, яка має потенціал надати науковим та промисловим лабораторіям прогнозувати ключові термоелектричні параметри ( $S$ ,  $\sigma$ ,  $\kappa$ ,  $PF$ ,  $ZT$ ) для широкого спектру складів і технологічних режимів без необхідності повного експериментального циклу.
4. Алгоритм зворотного проєктування з вбудованим механізмом оцінки невизначеності прогнозу через ансамбль моделей, що дозволяє планувати експериментальну валідацію з оптимальним співвідношенням ризику та потенційного результату і суттєво скоротити цикл розробки нових термоелектричних матеріалів із заданими функціональними характеристиками.
5. Розробки автора використовуються в науково-дослідній роботі Інституту термоелектрики НАН України та МОН України в межах теми «Використання методів штучного інтелекту та машинного

навчання для підвищення ефективності термоелектричних матеріалів на основі телуриду вісмуту» (номер державної реєстрації 0125U000210).

Загалом, результати роботи мають як безпосереднє прикладне значення для розробки спеціалізованого програмного забезпечення та проектування термоелектричних пристроїв, так і методологічну цінність для розвитку самої парадигми інтелектуального матеріалознавства.

### **Мова та стиль викладення результатів**

Дисертаційна робота Коропа М. М. написана державною мовою з дотриманням норм сучасного наукового стилю. Виклад матеріалу характеризується логічною послідовністю, чіткістю формулювань та доказовістю висновків. Загальний обсяг дисертації становить 185 сторінок, з яких основний текст займає 135 сторінок. Робота органічно доповнена рисунками й таблицями, які сприяють кращому сприйняттю запропонованих моделей та алгоритмів. Список використаних джерел містить 174 найменування, значна частина з яких англomовні публікації останніх 5 років, що свідчить про глибоке вивчення автором сучасного світового наукового доробку. Термінологія в галузі прикладної фізики, матеріалознавства, штучного інтелекту та машинного навчання вживається коректно та в єдиному контексті протягом усієї роботи.

### **Оприлюднення результатів дисертаційної роботи**

Основні теоретичні положення та практичні результати дисертації пройшли належну апробацію та повною мірою висвітлені у наукових публікаціях. За темою дисертації опубліковано 12 наукових праць, зокрема 8 статей у періодичних наукових виданнях, проіндексованих у наукометричній базі даних Scopus, 4 тези доповідей у збірниках матеріалів конференцій.

Основні результати роботи доповідалися та обговорювалися на семінарах кафедри термоелектрики та медичної фізики Навчально-наукового

інституту фізико-технічних та комп'ютерних наук Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича, а також на представницьких міжнародних конференціях, зокрема:

1. International and 7th Asian Conference on Thermoelectrics (ICT2025), Sendai, Japan, 2025;
2. The 17th International Conference “Correlation Optics 2025”, Chernivtsi, Ukraine, 8–12 September 2025;
3. XX International Freik Conference on Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems, Ivano-Frankivsk, Ukraine, 6–10 October 2025.

Кількість та якість публікацій повністю відповідають вимогам «Порядку присудження ступеня доктора філософії...», а зміст оприлюднених праць адекватно та повно відображає основні наукові результати, викладені в дисертації.

### **Недоліки та зауваження до дисертаційної роботи**

Позитивно оцінюючи дисертаційну роботу в цілому, вважаю за необхідне висловити наступні зауваження та побажання дискусійного характеру:

1. Запропонована система автоматизованого збору даних на базі MatSciBERT навчена на анотованому наборі з 6000 фрагментів і досягає  $F1 = 0,82$  для NER та  $F1 = 0,84$  для RE. Викликає зацікавленість питання узагальнюваності цієї моделі: наскільки збережеться зазначена точність при її перенесенні на споріднені, але інші системи термоелектричних матеріалів (наприклад, PbTe, SnSe, CoSb<sub>3</sub>-скутерудити)?
2. Алгоритм зворотного проєктування реалізовано як градієнтний спуск у просторі латентних представлень мультимодальної моделі з обмеженнями на фізичне існування складу. Проте у роботі недостатньо висвітлено питання потрапляння алгоритму в локальні мінімуми та чутливості рішення до точки ініціалізації. Доцільно було

б навести порівняння з альтернативними стратегіями оптимізації та статистику відтворюваності рекомендованих складів при багаторазовому запуску.

3. Оцінка невизначеності прогнозу здійснюється через ансамбль моделей, однак у тексті бракує даних щодо калібрування цих довірчих інтервалів. Зокрема, цікаво було б побачити калібрувальні діаграми для прогнозованих значень  $ZT$ ,  $S$ ,  $\sigma$  та  $\kappa$ , що дозволило б оцінити, наскільки заявлені рівні надійності відповідають фактичній частоті влучення експериментальних значень у відповідні інтервали.
4. В експериментальній частині автор використовує атомно-силову мікроскопію (контактний режим, область сканування до  $46 \times 46$  мкм<sup>2</sup>) та оптичну металографію темного поля. Доцільно було б уточнити, як обрана область сканування АСМ корелює з характерним розміром зерна екструдованих зразків і чи є вибірка достатньо репрезентативною для статистично надійного оцінення параметрів `grain_size_mean` та `boundary_density`, особливо з урахуванням можливої анізотропії структури вздовж та поперек осі екструзії.
5. При описі практичного застосування системи розглянуто три типи термоелектричних пристроїв (генераторні, охолоджувальні модулі Пельтьє та сенсори). Водночас у роботі майже не розкрито питання сумісності прогнозованих складів із технологічними обмеженнями реального виробництва (доступність легуючих компонентів, стабільність фази при тривалій експлуатації, термомеханічна сумісність із електродами). Інтегрування таких обмежень безпосередньо у функцію втрат алгоритму зворотного проектування могло б суттєво підвищити прикладну цінність отриманих рекомендацій.
6. У роботі трапляються поодинокі стилістичні неточності та технічні описки (зокрема, у тексті розділу 3 – фрагмент «...для аналізу мікроструктури `nthvjtktrn...`»), що, очевидно, є результатом

помилкової розкладки), а також у окремих місцях спостерігається змішування англomовних термінів із їхніми україномовними відповідниками. Зазначені неточності мають суто технічний характер та не зменшують наукової цінності отриманих результатів.

Вище вказані зауваження мають характер побажань для подальшої наукової діяльності здобувача та спрямовані на стимулювання фахової дискусії під час захисту. Вони не зменшують наукової і практичної цінності дисертаційної роботи та не впливають на загальну позитивну оцінку проведеного дослідження.

### **Висновок про дисертаційну роботу**

Підсумовуючи результати аналізу дисертації Коропа Миколи Миколайовича на тему «Використання методів штучного інтелекту та машинного навчання для автоматизації досліджень екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те», є всі підстави констатувати, що представлена праця є цілісним, завершеним та самостійним науковим дослідженням. Отримані автором результати характеризуються науковою новизною та в сукупності забезпечують розв'язання значущої науково-прикладної задачі для створення інтелектуального інструментарію для автоматизації повного циклу дослідження екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те.

За рівнем актуальності, глибиною теоретичного обґрунтування, новизною положень та практичною цінністю висновків дисертаційне дослідження повністю відповідає критеріям, визначеним у пунктах 6–9 «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.).

З огляду на вищевикладене, автор роботи Короп Микола Миколайович заслуговує на присудження наукового ступеня доктора філософії (PhD) у галузі знань 10 – «Природничі науки» за спеціальністю 105 – «Прикладна фізика та наноматеріали».

**Офіційний опонент:**

Доктор фізико-математичних наук, професор,  
професор кафедри загальної фізики  
Національного технічного університету України  
«Київський політехнічний інститут  
імені Ігоря Сікорського»

**Андрій ШАРСЬКИЙ**

Підпис Андрія ШАРСЬКОГО засвідчую

Вчений секретар  
Національного технічного університету України  
«Київський політехнічний інститут  
імені Ігоря Сікорського»



**Валерія ХОЛЯВКО**

29.05.2026