

РЕЦЕНЗІЯ

кандидата фізико-математичних наук, доцента,
доцента кафедри термоелектрики та медичної фізики
Навчально-наукового інституту фізико-технічних та комп'ютерних наук
Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича
МАНИКА Ореста Миколайовича
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 теми дисертації

Дисертаційна робота Коропа Миколи Миколайовича присвячена актуальній для сучасної прикладної фізики та матеріалознавства проблемі – підвищенню ефективності дослідження й оптимізації екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те за допомогою методів штучного інтелекту, машинного навчання та комп'ютерного зору. Обраний напрям є своєчасним, оскільки традиційні підходи із пошуку оптимального складу і режимів синтезу термоелектричних матеріалів залишаються тривалими у часі, ресурсномісткими та значною мірою залежними від емпіричного добору параметрів.

Матеріали на основі телуриду вісмуту продовжують відігравати провідну роль у термоелектриці. Водночас їхні функціональні параметри визначаються не окремим фактором, а складною взаємодією хімічного складу, типу легування, текстури, дефектної структури, режимів гарячої деформації та мікроструктурного стану. Саме тому побудова єдиної цифрової системи, здатної пов'язати процес синтезу, структурні ознаки та термоелектричні властивості, має очевидну наукову й прикладну цінність.

Особливої ваги робота набуває з огляду на те, що значна частина відомостей про термоелектричні матеріали є фрагментованою у наукових публікаціях,

таблицях, графіках і текстових описах, які не пристосовані для безпосереднього використання в алгоритмах машинного навчання. Автор дисертації пропонує не лише окрему модель прогнозування, а цілісний інструментальний підхід: від автоматизованого збору даних із літературних джерел і моделювання процесу екструзії до сегментації мікроструктурних зображень, прогнозування властивостей та зворотного проектування матеріалу за заданими цільовими характеристиками.

Таким чином, актуальність дисертаційної роботи зумовлена як потребами розвитку енергоефективних технологій і термоелектричних перетворювачів, так і необхідністю формування нової методології дослідження функціональних матеріалів, у якій фізично обґрунтоване моделювання поєднується з можливостями розумного аналізу даних.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами

Дисертаційне дослідження виконано відповідно до напрямку наукової діяльності кафедри термоелектрики та медичної фізики Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича та пов'язане з кафедральною науково-дослідною темою «Фізика, матеріалознавство та прикладні застосування термоелектрики» (№ 0121U110896).

Крім того, отримані результати безпосередньо узгоджуються із завданнями 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» (номер державної реєстрації 0125U000210). Це підтверджує відповідність теми дисертації пріоритетним напрямкам досліджень у галузі термоелектричного матеріалознавства та прикладної фізики.

Загальна характеристика структури та змісту роботи

Дисертація має логічну побудову і складається зі вступу, чотирьох розділів, загальних висновків, списку використаних джерел і додатків. Загальний обсяг роботи становить 185 сторінок, з яких 135 сторінок припадає на основний текст. Список використаних джерел охоплює 174 найменування, що свідчить про належне опрацювання сучасної наукової літератури з термоелектрики, матеріалознавства, комп'ютерного моделювання та машинного навчання.

У вступі чітко сформульовано наукову проблему, мету, завдання, об'єкт і предмет дослідження, визначено наукову новизну та практичне значення отриманих результатів. Важливо, що постановка задачі не обмежується окремим алгоритмічним прийомом, а охоплює повний ланцюг дослідження матеріалу від джерела даних до оптимізованого технологічного рішення.

У першому розділі розглянуто стан досліджень термоелектричних матеріалів на основі Bi-Te , одержаних методом гарячої екструзії, а також проаналізовано можливості застосування штучного інтелекту, машинного навчання та комп'ютерного зору у термоелектричному матеріалознавстві. Автор послідовно показує, що фрагментарність експериментальних даних, недостатня стандартизація опису технологічних режимів і відсутність єдиної прогностичної системи обмежують ефективність сучасних підходів до оптимізації термоелектричних матеріалів.

У другому розділі розроблено фізичну та комп'ютерну модель гарячої екструзії термоелектричного матеріалу на основі Bi-Te в середовищі COMSOL Multiphysics. Отримані результати дозволили оцінити вплив температури та швидкості деформації на силу екструзії і визначити критерії стабільного формування екструдату. У цьому ж розділі запропоновано спеціалізовану систему автоматизованого збору термоелектричних параметрів із наукових джерел на основі додатково навченої моделі MatSciBERT із окремими класифікаційними

головами для розпізнавання іменованих сутностей та встановлення відношень між ними.

У третьому розділі дисертації реалізовано мультимодальний підхід до аналізу мікроструктури. Поєднання атомно-силової мікроскопії та оптичної металографії темного поля дало можливість описувати мікроструктуру на різних масштабних рівнях. Розроблена модель семантичної сегментації на основі модифікованої архітектури U-Net забезпечила кількісне розпізнавання структурних компонентів, а мультимодальна прогностична модель, що враховує зображення мікроструктури, числові параметри складу та технології, досягла показника $MAPE = 5,3 \%$ для добротності ZT. Це свідчить про доцільність інтегрування різнорідних джерел інформації при прогнозуванні функціональних властивостей матеріалів.

У четвертому розділі наведено застосування розробленої системи для оптимізації термоелектричних матеріалів і пристроїв. Автор реалізує алгоритм зворотного проєктування, що дозволяє за заданими цільовими значеннями термоелектричних параметрів прогнозувати перспективний хімічний склад і технологічні режими синтезу. Окремо розглянуто багатокритеріальну оптимізацію для генераторних модулів, модулів Пельтьє та сенсорів, а також запропоновано підхід до інтелектуального управління технологічним процесом екструзії.

Усі розділи роботи змістовно пов'язані між собою, а висновки відповідають поставленим завданням. Виклад матеріалу є послідовним, аргументованим і достатньо деталізованим для відтворення основних методичних рішень.

Наукова новизна одержаних результатів

Наукова новизна дисертаційної роботи полягає у формуванні інтегрованої методології автоматизованого дослідження екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те. На відміну від підходів, що розглядають лише окремий етап аналізу, у роботі поєднано збір даних із наукових джерел, комп'ютерне

моделювання технологічного процесу, аналіз мікроструктури, прогнозування властивостей та зворотне проектування.

До найбільш вагомих результатів, що характеризують наукову новизну роботи, слід віднести:

- 1) розроблення спеціалізованої системи автоматизованого збору та структурування термоелектричних параметрів із наукових публікацій із використанням предметно адаптованої мовної моделі MatSciBERT.
- 2) створення мультимодальної системи кількісного аналізу мікроструктури, що об'єднує дані атомно-силової мікроскопії та оптичної металографії темного поля і дозволяє автоматизувати розпізнавання структурних компонентів екструдованих матеріалів.
- 3) побудову прогностичної моделі, яка узгоджує мікроструктурні зображення, дані про хімічний склад і параметри екструзії в єдиному латентному просторі, що забезпечує вищу точність прогнозування порівняно з одномодальними моделями.
- 4) реалізацію алгоритму зворотного проектування та багатокритеріальної оптимізації, придатного для цілеспрямованого пошуку складів і режимів синтезу матеріалів під конкретні типи термоелектричних пристроїв.

Зазначені результати в сукупності мають характер самостійного наукового внеску, оскільки створюють основу для переходу від емпіричного добору параметрів до керованого, даними та фізичними моделями, проектування термоелектричних матеріалів.

Ступінь обґрунтованості та достовірності результатів

Обґрунтованість наукових положень забезпечується коректним поєднанням фізичних моделей процесу екструзії, сучасних алгоритмів машинного навчання та експериментальних даних про мікроструктуру і термоелектричні властивості зразків. Автор не обмежується декларуванням застосування штучного інтелекту, а

наводить конкретні архітектурні рішення, метрики точності, етапи попередньої обробки даних і механізми інтерпретації результатів.

Достовірність одержаних результатів підтверджується порівнянням різних моделей, використанням незалежних тестових вибірок, кількісними метриками якості, аналізом помилок, а також фізично осмисленою інтерпретацією результатів за допомогою Grad-CAM. Важливо, що висновки про роль мікроструктурних дефектів у прогнозуванні теплопровідності та про визначальний вплив хімічного складу на коефіцієнт Зеебека узгоджуються з уявленнями про механізми переносу заряду й тепла в термоелектричних матеріалах.

Позитивно слід оцінити й те, що у дисертації розглянуто не лише остаточні результати роботи моделей, а й обмеження поточної реалізації, зокрема недостатній обсяг окремих тестових вибірок, складність сегментації дрібних структурних об'єктів і потребу в подальшому розширенні експериментальної бази. Така постановка питання свідчить про критичний підхід здобувача до власних результатів та реалістичне бачення подальшого розвитку дослідження.

Практичне значення результатів

Практична цінність дисертаційної роботи полягає у створенні програмного інструментарію для автоматизації значної частини дослідницького циклу у термоелектричному матеріалознавстві. Розроблена система може використовуватися для формування баз даних термоелектричних властивостей, аналізу мікроструктури зразків, прогнозування ключових параметрів S , σ , κ , PF , ZT та планування експериментальної перевірки перспективних хімічних складів.

Важливою практичною перевагою є можливість поєднання літературних даних, даних комп'ютерного моделювання і результатів мікроскопічного аналізу. Це створює передумови для швидшого вибору оптимальних технологічних режимів, зменшення кількості малоефективних експериментів і більш раціонального планування дослідних робіт.

Результати дисертації мають значення не лише для конкретної системи матеріалів Ві–Те, а й для ширшої методології цифрового матеріалознавства. Запропонований підхід може бути адаптований до інших класів функціональних матеріалів за умови відповідного розширення бази даних і предметного донавчання моделей.

Повнота оприлюднення результатів

Основні результати дисертаційної роботи достатньо повно представлені у наукових публікаціях. За темою дослідження опубліковано 12 наукових праць, серед яких 8 статей у виданнях, що індексуються у наукометричній базі Scopus, та 4 тези доповідей у матеріалах конференцій.

Результати дослідження апробовано на наукових семінарах та міжнародних конференціях, зокрема ICT2025 у Сендаї, Японія, конференції “Correlation Optics 2025” у Чернівці, Україна і XX International Freik Conference on Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems в Івано-Франківську, Україна. Тематика публікацій відповідає змісту дисертації, а особистий внесок здобувача у спільних працях окреслено достатньо чітко.

Дотримання академічної доброчесності

За результатами ознайомлення з поданими матеріалами ознак порушення академічної доброчесності не виявлено. У дисертації наведено посилання на використані джерела, результати інших авторів відокремлено від власних результатів здобувача, а внесок співавторів у публікаціях за темою дисертації описано належним чином. Робота містить результати самостійного дослідження, виконаного здобувачем у межах сформульованої науково-прикладної задачі.

Дискусійні положення та зауваження

Позитивно оцінюючи дисертаційну роботу в цілому, вважаю за доцільне висловити такі зауваження і побажання дискусійного характеру:

1. У системі автоматизованого збору даних із літератури передбачено нормалізацію та перевірку фізичної правдоподібності значень. Водночас доцільно було б докладніше описати механізм оцінювання надійності окремих літературних записів: врахування методики вимірювання, типу зразка, температурного режиму, дублювання даних у кількох публікаціях та можливих систематичних похибок. Такий модуль «довіри до даних» міг би підвищити стійкість прогностичних моделей до неоднорідності джерел.

2. Мультимодальна модель прогнозування демонструє хорошу точність для обраної постановки задачі. Разом з тим для практичного проектування генераторів і охолоджувальних модулів важливо прогнозувати не лише значення властивостей за фіксованих умов, а й температурні залежності $S(T)$, $\sigma(T)$, $\kappa(T)$ та $ZT(T)$. У подальших дослідженнях доцільно розглянути введення температури як явної входної ознаки або побудову моделей, що прогнозують повні функціональні криві.

3. У роботі успішно застосовано АСМ та оптичну металографію для кількісного опису мікроструктури. Водночас матеріали на основі Ві-Те є суттєво анізотропними, тому для повнішого фізичного трактування результатів корисним було б залучити інформацію про кристалографічну текстуру, наприклад за даними рентгеноструктурного аналізу. Це дозволило б безпосередніше пов'язати параметри екструзії з орієнтацією зерен і анізотропією властивостей.

4. Запропонована концепція інтелектуального управління процесом екструзії є перспективною, однак у роботі бажано було б детальніше окреслити протокол роботи такої системи: частоту оновлення даних, критерії зупинки або зміни режиму, обмеження безпеки, а також правила перенавчання моделі після надходження нових експериментальних результатів.

5. З огляду на значний програмний компонент дисертації, доцільно було б розширити опис питань відтворюваності: фіксуванню версій навчальних наборів, збереження випадкового розбиття на навчальні та тестові вибірки, документування ваг моделей, а також підготовки короткої інструкції користувача.

Зазначені зауваження мають рекомендаційний і дискусійний характер. Вони не зменшують наукової новизни, практичного значення та загальної позитивної оцінки дисертаційної роботи, а радше окреслюють можливі напрями подальшого розвитку запропонованої системи.

Загальний висновок

Дисертаційна робота Коропа Миколи Миколайовича «Використання методів штучного інтелекту та машинного навчання для автоматизації досліджень екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те» є завершеним, самостійним і змістовним науковим дослідженням, у якому отримано нові науково обґрунтовані результати, що мають істотне значення для розвитку прикладної фізики, термоелектричного матеріалознавства та цифрових методів проектування функціональних матеріалів.

Робота характеризується актуальністю, належним рівнем теоретичного та експериментального обґрунтування, достатньою повнотою оприлюднення результатів, практичною спрямованістю та відповідністю заявленій спеціальності 105 – «Прикладна фізика та наноматеріали». Одержані у дисертації результати мають завершений характер, відзначаються науковою обґрунтованістю та можуть бути використані як методологічна основа для подальших досліджень функціональних термоелектричних матеріалів.

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.), а її автор, Короп Микола Миколайович, заслуговує на присудження наукового ступеня доктора

філософії у галузі знань 10 – «Природничі науки» за спеціальністю 105 – «Прикладна фізика та наноматеріали».

Рецензент:

кандидат фізико-математичних наук, доцент,
доцент кафедри термоелектрики та медичної фізики
Чернівецького національного університету
імені Юрія Федьковича

Маник

Орест МАНИК

Підпис *Маника О.* засвідчує
Учений секретар Чернівецького національного
університету імені Юрія Федьковича
Сирювська Н.
07 червня 2018

