

Голові разової спеціалізованої вченої ради PhD15086
Тернопільського національного технічного
університету імені Івана Пулюя
д.т.н., професору Литвиненку Ярославу
Володимировичу

ВІДГУК ОФІЦІЙНОГО ОПОНЕНТА

кандидата технічних наук, доцента **Водки Олексія Олександровича**
на дисертаційну роботу **Тимощука Дмитра Івановича**
«Методи та моделі машинного навчання для прогнозування гістерезисної
поведінки сплавів з пам'яттю форми», подану до захисту на здобуття
ступеня доктора філософії з галузі знань 12 «Інформаційні технології»
зі спеціальності 122 «Комп'ютерні науки»

1. Актуальність теми дисертації

Дисертаційна робота Тимощука Дмитра Івановича присвячена актуальному напрямку комп'ютерних наук, пов'язаному із застосуванням методів машинного навчання та пояснюваного штучного інтелекту для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми за умов циклічного навантаження. Сплави з пам'яттю форми широко застосовуються в сучасних технічних системах, де важливими є надійність, довговічність і тому задача точного прогнозування їхньої поведінки за умов циклічного навантаження має важливе наукове і практичне значення.

Актуальність дослідження зумовлена складністю гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми, яка характеризується нелінійною залежністю між напруженням і деформацією, впливом історії навантаження, фази навантаження-розвантаження та накопичення функціональної втоми матеріалу. За таких умов традиційні підходи моделювання не забезпечують достатню ефективність, а проведення повного обсягу експериментальних випробувань є тривалим і ресурсомістким.

Використання моделей машинного навчання дає змогу скоротити обсяг експериментальних досліджень, забезпечити прогнозування деформації матеріалу на циклах, що виходять за межі навчального діапазону, та оцінити екстраполяційну здатність побудованих моделей. Застосування методів пояснюваного штучного інтелекту підвищує обґрунтованість отриманих результатів, оскільки дає змогу інтерпретувати прогнози та оцінити їх фізичну узгодженість. Отже, тема дисертації є своєчасною, науково обґрунтованою та відповідає сучасним напрямкам розвитку спеціальності 122 «Комп'ютерні науки».

2. Наукова новизна отриманих результатів

Наукова новизна отриманих у дисертаційній роботі результатів полягає в такому:

- вперше запропоновано математичну модель прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми, у якій номер циклу навантаження-розвантаження визначено як незалежну вхідну змінну, що дало змогу формалізувати задачу прогнозування деформації матеріалу з урахуванням циклічності навантаження;

- вперше обґрунтовано сукупність критеріїв перевірки фізичної узгодженості моделей машинного навчання для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми шляхом зіставлення результатів методів пояснюваного штучного інтелекту SHAP та Integrated Gradients із відомими закономірностями фазових перетворень, гістерезисної поведінки та накопичення функціональної втоми матеріалу;

- удосконалено метод оцінювання моделей прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми шляхом застосування групового розбиття даних за номером циклу навантаження-розвантаження, що унеможливило витік інформації між вибірками;

- удосконалено метод побудови ансамблевої Voting-моделі шляхом визначення ваг базових моделей на основі величини, обернено пропорційної до середнього значення MSE, отриманого під час групової крос-валідації;

– удосконалено метод побудови ансамблевих моделей VotingRegressor і StackingRegressor та моделей глибокого навчання SimpleRNN, LSTM, GRU і TCN для екстраполяційного прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми шляхом введення номера циклу навантаження-розвантаження як незалежної вхідної змінної, що дало змогу враховувати зміну деформації матеріалу та прояви функціональної втоми в умовах циклічного навантаження.

3. Наукова обґрунтованість та достовірність отриманих результатів

Наукова обґрунтованість отриманих у дисертаційній роботі результатів забезпечується використанням сучасних методів машинного навчання, математичного моделювання, статистичного аналізу та інтелектуальної обробки експериментальних даних.

У дисертації застосовано комплексний підхід до прогнозування деформації та гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми за умов циклічного навантаження. Застосування ансамблевих моделей машинного навчання та нейронних мереж є методично обґрунтованим і відповідає меті та завданням дисертаційного дослідження. Обрані методи дозволили дослідити поведінку матеріалів за умов циклічного навантаження, оцінити точність прогнозування та порівняти ефективність різних підходів до моделювання.

Достовірність отриманих результатів підтверджується використанням експериментальних даних, застосуванням загальноприйнятих метрик оцінювання якості моделей, проведенням порівняльного аналізу результатів моделювання, а також узгодженістю отриманих висновків із сучасними науковими уявленнями про поведінку сплавів з пам'яттю форми. Основні результати дисертаційного дослідження опубліковано у наукових працях та апробовано на наукових конференціях, що додатково підтверджує їх наукову обґрунтованість, достовірність і практичну значущість.

4. Рівень виконання роботи

Дисертаційна робота виконана на належному науково-методичному рівні та характеризується послідовністю постановки задачі, обґрунтованістю вибору

методів дослідження і повнотою проведених обчислювальних експериментів. У роботі застосовано сучасні методи машинного навчання, зокрема ансамблеві моделі та нейронні мережі, що відповідають складності задачі прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми за умов циклічного навантаження.

Здобувачем виконано всі основні етапи дослідження: проаналізовано сучасний стан предметної області, сформовано математичну постановку задачі прогнозування, підготовлено експериментальні дані, реалізовано групове розбиття вибірок, побудовано та навчено низку моделей машинного навчання, проведено їх порівняльне оцінювання за кількісними метриками, а також виконано інтерпретацію отриманих результатів засобами пояснюваного штучного інтелекту.

Рівень виконання роботи підтверджується логічною структурою дисертації, коректним застосуванням математичного апарату, обґрунтованим вибором моделей і метрик оцінювання, достатнім обсягом експериментальних досліджень та узгодженістю висновків із поставленою метою і завданнями. Отримані результати свідчать про здатність здобувача самостійно розв'язувати складні науково-практичні задачі у галузі комп'ютерних наук.

5. Практичне значення отриманих результатів

Практичне значення отриманих у дисертаційній роботі результатів полягає в можливості використання розроблених моделей машинного навчання для прогнозування деформації та гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми за умов циклічного навантаження. Запропоновані підходи дають змогу зменшити потребу в проведенні тривалих експериментальних випробувань, оцінити зміну поведінки матеріалу на віддалених циклах навантаження-розвантаження та підвищити обґрунтованість прогнозів завдяки використанню методів пояснюваного штучного інтелекту.

Практично цінною є розроблена програмна система побудови, навчання, оцінювання та інтерпретації моделей машинного навчання, яка забезпечує відтворюваність обчислювальних експериментів і може бути адаптована для

аналізу інших експериментальних наборів даних. Отримані результати можуть бути використані підтримки прийняття інженерних рішень під час проєктування елементів на основі сплавів з пам'яттю форми.

Практичне використання результатів дисертаційної роботи підтверджено довідками та актами впровадження. Зокрема, результати впроваджено в освітній процес Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя під час викладання дисциплін, пов'язаних із методами штучного інтелекту та машинного навчання, а також використано у діяльності ТОВ «Ново-Ком» і ТОВ «СЕЙСМО АНАЛІТИКС» для вдосконалення підходів до аналізу експериментальних даних, прогнозування складних нелінійних процесів та інтерпретації результатів моделювання.

6. Апробація результатів дослідження, структура та відповідність дисертації вимогам МОН України

Основні результати дисертаційного дослідження належним чином апробовано. За темою дисертації опубліковано 2 наукові праці у фахових виданнях України та 6 наукових праць у виданнях, що індексуються у міжнародній наукометричній базі Scopus. Крім того, результати дослідження представлено на 4 міжнародних наукових конференціях.

Опубліковані праці відображають основні положення роботи, зокрема питання побудови моделей машинного навчання, прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми, оцінювання точності моделей та інтерпретації отриманих результатів засобами пояснюваного штучного інтелекту.

Дисертаційна робота має логічну й послідовну структуру, що відповідає поставленій меті та завданням дослідження. Робота складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел і додатків. У дисертації послідовно розкрито основні етапи дослідження: аналіз сучасного стану предметної області, опис експериментальної бази, формалізацію задачі прогнозування, побудову й оцінювання моделей машинного навчання, а також інтерпретацію отриманих результатів.

За змістом, структурою, науковим рівнем, обсягом виконаних досліджень і повнотою оприлюднення результатів дисертаційна робота відповідає вимогам, що висуваються до дисертацій на здобуття ступеня доктора філософії. Робота є завершеним самостійним науковим дослідженням, результати якого відповідають галузі знань 12 «Інформаційні технології» та спеціальності 122 «Комп'ютерні науки».

7. Зауваження

Попри загальну позитивну оцінку дисертаційної роботи, до неї можна висловити такі зауваження

1. У дисертації значну увагу приділено порівнянню ансамблевих моделей і нейронних мереж, однак менш детально розкрито питання вибору саме такого складу базових моделей для VotingRegressor і StackingRegressor. Було б корисно чіткіше обґрунтувати, чому саме ці моделі розглянуто як найбільш доцільні для поставленої задачі.
2. У роботі використано кілька метрик оцінювання якості прогнозування, зокрема MSE, MAE, MAPE та R^2 . Водночас у випадках, коли різні моделі демонструють близькі значення метрик, не завжди достатньо чітко пояснено, наскільки така різниця є істотною з практичного погляду та чи впливає вона на вибір оптимальної моделі для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми. Також графіки зміни метрик від епохи навчання варто наводити у напівлогарифмічних координатах (рис. 3.34 та далі по тексту).
3. У роботі основну увагу зосереджено на класичних ансамблевих моделях машинного навчання та нейронних мережах. Водночас дискусійним залишається питання доцільності залучення фізично-інформованих нейронних мереж, які могли б поєднати переваги підходів керованих даними із додатковим урахуванням фізичних закономірностей гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми.
4. У дисертації наведено результати прогнозування на віддалених циклах навантаження-розвантаження, однак межі допустимої екстраполяції моделей залишаються дискусійними. Зокрема, не повністю очевидно, до якого рівня

віддаленості циклів отримані прогнози можна вважати достатньо надійними без додаткової експериментальної перевірки.

5. У роботі номер циклу навантаження-розвантаження використано як незалежну вхідну змінну запропонованої математичної моделі. Водночас характер впливу цієї ознаки на прогнозовану деформацію матеріалу розкрито не повною мірою, зокрема з погляду можливого нерівномірного накопичення змін у матеріалі на різних етапах циклічного навантаження. Також варто відзначити, що при використанні таких моделей для реальних конструкцій номер циклу, зазвичай, є невідомим. Такий підхід звужує можливості використання розроблених моделей поза лабораторним середовищем.

6. У дисертації достатньо повно описано побудову моделей машинного навчання, проте питання чутливості результатів до вибору гіперпараметрів окремих моделей висвітлено менш детально. Це особливо стосується моделей глибокого навчання, для яких архітектурні параметри можуть суттєво впливати на якість прогнозування.

7. У дисертації використано методи пояснюваного штучного інтелекту для аналізу внеску вхідних ознак, однак порівняння стабільності пояснень між різними моделями подано обмежено. Це залишає відкритим питання, наскільки узгодженими є пояснення для моделей різних типів.

8. У дисертації акцент зроблено на точності прогнозування, проте питання стійкості моделей до шуму в експериментальних даних або можливих похибок вимірювання розглянуто менш детально. Для практичного використання таких моделей цей аспект має важливе значення. Також в роботі варто було б навести сирі дані, які отримані у результаті експерименту.

9. У роботі запропоновано програмну систему для побудови, оцінювання та інтерпретації моделей, однак опис її користувацьких можливостей, обмежень і потенційних сценаріїв практичного застосування подано досить стисло.

10. У дисертації представлено порівняльний аналіз моделей за точністю прогнозування, однак питання балансу між точністю, складністю моделі та зручністю її практичного використання розкрито не повною мірою. У

прикладних задачах простіша модель з незначно нижчою точністю іноді може бути доцільнішою для впровадження.

11. У роботі достатньо детально розглянуто результати моделювання, однак окремі висновки за результатами порівняльного аналізу могли б бути подані більш узагальнено, із чіткішим виокремленням головних закономірностей, виявлених під час експериментів.

12. У дисертації трапляються окремі фрагменти, де використання англomовних назв моделей, метрик та українських відповідників не завжди є повністю уніфікованим. Це не впливає на зміст роботи, однак дещо ускладнює сприйняття окремих фрагментів тексту. Наприклад, у формулі 2.2 та далі по тексту стандартне відхилення позначено як σ , замість грецької літери σ тощо.

Висловлені зауваження мають переважно дискусійний та уточнювальний характер. Також вони не впливають на обґрунтованість основних наукових результатів дисертації, не применшують її наукової новизни й практичного значення та не змінюють загальної позитивної оцінки дисертаційної роботи.

Висновки

Дисертаційна робота Тимощука Дмитра Івановича на тему «Методи та моделі машинного навчання для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми» є завершеною кваліфікаційною науковою працею, у якій розв'язано актуальну науково-практичну задачу побудови, оцінювання та інтерпретації моделей машинного навчання для прогнозування деформації та гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми за умов циклічного навантаження.

Отримані в дисертації результати мають наукову новизну, практичне значення, достатній рівень обґрунтованості та достовірності. Основні положення роботи опубліковано у наукових працях здобувача та апробовано на наукових конференціях. Зміст дисертації відповідає спеціальності 122 «Комп'ютерні науки» галузі знань 12 «Інформаційні технології».

Вважаю, що дисертаційна робота відповідає вимогам наказу Міністерства освіти і науки України №40 від 12.01.2017 р. «Про затвердження вимог до оформлення дисертацій» із змінами 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 січня 2022 р., а її автор, Тимошук Дмитро Іванович, заслуговує на присудження ступеня доктора філософії за спеціальністю 122 «Комп'ютерні науки» в галузі знань 12 «Інформаційні технології».

Офіційний опонент:

завідувач кафедри математичного моделювання

та інтелектуальних обчислень в інженерії

Національного технічного університету

«Харківський політехнічний інститут»

кандидат технічних наук, доцент



Олексій ВОДКА

Підпис к.т.н., доц. Водки О.О. засвідчую

Вчений секретар НТУ «ХПІ»

«15» 07 2026 р.



Максим МАЛЬКО