

Голові разової спеціалізованої вченої ради PhD1508
Тернопільського національного технічного
університету імені Івана Пулюя
д.т.н., професору Литвиненку Ярославу Володимировичу

ВІДГУК ОФІЦІЙНОГО ОПОНЕНТА

доктора технічних наук, професора **Грицюка Юрія Івановича**
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"*
та спеціальності 122 *"Комп'ютерні науки"*

Актуальність теми дослідження

Впровадження цифрових технологій у наукові дослідження сприяло накопиченню значних масивів експериментальних даних і розширило можливості їх аналізу. У наукових дослідженнях, пов'язаних із вивченням поведінки матеріалів, дедалі більшого значення набувають підходи, які дають змогу виявляти складні закономірності у даних, будувати моделі прогнозування та скорочувати потребу в надмірній кількості експериментів. Особливо це актуально для матеріалознавства, де отримання експериментальних результатів часто потребує значних витрат часу і матеріальних ресурсів.

Серед сучасних матеріалів особливий науковий і практичний інтерес становлять інтелектуальні матеріали, здатні адаптивно реагувати на зміну зовнішніх умов, тобто сплави з пам'яттю форми (SMA). Вони характеризуються двома унікальними властивостями – ефектом пам'яті форми (SME) та надпружністю (SE). Ці властивості зумовлені оборотними мартенситно-аустенітними фазовими перетвореннями, які відбуваються на мікроструктурному рівні під дією температури або механічного навантаження. Завдяки цьому матеріал здатний не лише відновлювати початкову форму після деформування, а й витримувати

значні механічні навантаження без залишкових змін геометрії. Водночас, практичне застосування SMA значною мірою залежить від можливості точно прогнозувати їхню поведінку за різних умов навантаження.

Здобувачем встановлено, що поряд із забезпеченням високої точності прогнозування виникає потреба в інтерпретованості моделей, оскільки важливо не лише отримати числове значення прогнозованої деформації, а й визначити, які вхідні параметри моделі найбільше впливають на отриманий результат. Використання методів пояснюваного штучного інтелекту (XAI), зокрема SHAP та Integrated Gradients, дає змогу оцінити внесок окремих ознак у прогноз і перевірити фізичну узгодженість отриманих результатів.

У зв'язку з цим зростає актуальність дослідження Дмитра Тимощука, пов'язаного з побудовою, оцінюванням та порівняльним аналізом моделей машинного навчання для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми, здатних забезпечити високу точність, екстраполяційне прогнозування та фізично обґрунтовану інтерпретацію отриманих результатів.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами

Дисертаційна робота пов'язана з науковими дослідженнями на кафедрі систем штучного інтелекту та інтелектуального аналізу даних Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя і виконана у межах науково-дослідної теми ВК 76-24 «Розв'язування задач науки методами штучного інтелекту», № держреєстрації 0125U000584.

Ступінь обґрунтованості та достовірності основних наукових положень, висновків і рекомендацій

Проведені теоретично-експериментальні дослідження підтверджують актуальність наукового напрямку. Отримані здобувачем наукові положення дисертаційної роботи обґрунтовані та якісно продовжують розвиток етапів наукового дослідження, спрямованого на розв'язання науково-практичної задачі побудови, оцінювання та порівняльного аналізу моделей машинного навчання для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми за умов циклічного навантаження та інтерпретації отриманих прогнозів засобами пояснюваного штучного інтелекту.

Результати дисертаційної роботи підтверджуються теоретичним обґрунтуванням базових положень, результатами апробації, відповідністю результатів, а також моделюванням методами машинного навчання, їх зв'язком з наявними результатами, отриманими із застосуванням класичних методів; відповідністю результатам інших авторів, а також результатам, одержаним іншими методами.

Наукова новизна отриманих результатів дослідження

Наукова новизна роботи полягає в такому:

1. Вперше сформульовано постановку задачі прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми, у якій номер циклу навантаження визначено як незалежну вхідну змінну, що дало змогу прогнозувати деформацію матеріалу як у межах навчального діапазону даних, так і в режимі екстраполяції на віддалені цикли навантаження-розвантаження.

2. Вперше розроблено ансамблеві моделі машинного навчання VotingRegressor і StackingRegressor та моделі глибокого навчання SimpleRNN, LSTM, GRU та TCN для екстраполяційного прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми, які враховують номер циклу навантаження як незалежну вхідну змінну та забезпечують прогнозування деформації матеріалу за межами навчального діапазону циклів навантаження-розвантаження.

3. Вперше виконано комплексне дослідження узагальнювальної здатності ансамблевих і нейромережових моделей машинного навчання при прогнозуванні гістерезисної поведінки SMA на циклах, що виходять за межі навчального та тестового діапазонів.

4. Вперше розроблено методику перевірки фізичної узгодженості моделей машинного навчання для прогнозування гістерезисної поведінки SMA, яка ґрунтується на зіставленні результатів пояснюваного штучного інтелекту, зокрема SHAP та Integrated Gradients, із відомими механізмами фазових перетворень, гістерезису та накопичення функціональної втоми.

5. Удосконалено метод валідації моделей прогнозування гістерезисної поведінки SMA шляхом використання групового принципу розбиття даних за

номером циклу навантаження, який, на відміну від наявних, забезпечує уникнення витоку інформації між навчальною, валідаційною та тестовою вибірками.

6. Удосконалено метод побудови ансамблевої Voting-моделі шляхом визначення ваг базових моделей на основі величини, обернено пропорційної до середнього значення середньоквадратичної похибки, отриманої в процесі групової крос-валідації, що, на відміну від наявних підходів, забезпечує адаптивний розподіл внеску базових моделей відповідно до точності їх прогнозування та зменшення впливу менш точних моделей на підсумковий результат.

Практичне значення одержаних результатів дослідження

Побудовані та досліджені моделі машинного навчання дають змогу прогнозувати гістерезисну поведінку сплавів з пам'яттю форми за різних частот навантаження та на циклах, що виходять за межі навчального діапазону, без потреби у проведенні повного обсягу тривалих і ресурсомістких експериментальних випробувань.

Отримані результати можна використати для:

- прогнозування деформації та форми гістерезисних петель SMA;
- оцінювання впливу циклічної втоми на функціональні властивості матеріалу;
- аналізу розсіюваної енергії та демпфувальної здатності SMA-елементів;
- підтримки прийняття рішень під час проєктування актуаторів, демпферів, сенсорних і конструкційних елементів на основі SMA;
- використання в наукових дослідженнях і навчальному процесі в галузях матеріалознавства, машинного навчання та пояснюваного штучного інтелекту.

Практична цінність отриманих результатів також визначається програмною системою побудови, оцінювання та інтерпретації моделей, яка забезпечує відтворюваність обчислювальних експериментів, можливістю порівняльного аналізу моделей і подальшого розширення для інших режимів навантаження, нових наборів даних і суміжних класів функціональних матеріалів.

Особистий внесок здобувача

Усі наукові результати, викладені в дисертаційній роботі, отримані здобувачем особисто та є оригінальними. Дисертант самостійно опрацював літературу за темою дослідження і підготував огляд літератури. Постановку завдань, розроблення плану досліджень, аналіз отриманих результатів проведено у співпраці з науковим керівником д.т.н., проф. О.П. Яснієм. Окрім того, спільно з керівником підготовлено матеріали для наукових публікацій, що відображають основні результати дисертації.

Автор побудував та налаштував ансамблеві й нейромережеві моделі прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми, реалізував методи пояснюваного штучного інтелекту для інтерпретації прогнозів, а також розробив програмну систему побудови, оцінювання та порівняльного аналізу моделей. Теоретичні положення, концепції та гіпотези, запозичені з наукових праць інших дослідників, належно оформлено через систему посилань і застосовано винятково для обґрунтування та розвитку власних наукових здобутків автора.

Повнота викладу основних наукових положень і висновків в опублікованих працях та дотримання вимог академічної доброчесності

Наукові положення та отримані результати повною мірою висвітлені у опублікованих автором наукових працях та апробовані на науково-технічних конференціях.

Основні результати дисертації висвітлено у 7 наукових працях, серед яких 2 статті у фахових виданнях України, 6 публікацій у виданнях, які індексуються у міжнародній наукометричній базі Scopus, 4 праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації.

Структура та обсяг роботи

Дисертаційна робота викладена на 227 сторінках та складається з анотації, змісту, переліку скорочень, вступу, чотирьох основних розділів, в яких міститься 86 рисунків та 12 таблиць, списку використаних джерел з 86 найменувань, а також 7 додатків. Основна частина роботи викладена на 180 сторінках. За структурою, мовою та стилем викладення дисертація відповідає вимогам МОН

України. Робота написана українською мовою з використанням сучасної наукової термінології, а стиль викладення матеріалу є послідовним та логічним.

Загальна характеристика дисертаційної роботи

Дисертаційна робота Тимошук Д. І. є завершеною науковою працею, яка стосується розв’язання науково-практичної задачі побудови, оцінювання та порівняльного аналізу моделей машинного навчання, призначених для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам’яттю форми за умов циклічного навантаження та інтерпретації отриманих прогнозів засобами пояснюваного штучного інтелекту.

У *вступі* обґрунтовано актуальність теми дисертації, визначено її зв’язок із науковими напрямками досліджень, сформульовано мету та завдання роботи, окреслено об’єкт, предмет і методи дослідження, розкрито наукову новизну та практичне значення одержаних результатів, наведено відомості про їх апробацію, практичне використання та висвітлення в наукових публікаціях.

У *першому розділі* дисертаційної роботи проаналізовано предметну область. Розглянуто фізичні основи гістерезисної поведінки сплавів з пам’яттю форми, природу ефекту пам’яті форми та надпружності, а також особливості формування гістерезисних петель у координатах «напруження–деформація». Здійснено аналіз сучасних досліджень у галузі застосування методів машинного навчання для прогнозування властивостей SMA та використання методів пояснюваного штучного інтелекту для інтерпретації результатів. На основі аналізу літератури обґрунтовано доцільність застосування методів машинного навчання для побудови моделей, орієнтованих на екстраполяційне прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам’яттю форми.

У *другому розділі* дисертаційної роботи наведено опис експериментальної бази даних, отриманої під час випробувань NiTi-дроту за різних частот циклічного навантаження. Розроблено формальний опис задачі прогнозування деформації з урахуванням номера циклу як незалежної вхідної змінної, що дало змогу відокремити прогнозування в межах діапазону навчальних даних і екстраполяційний режим прогнозування. Розглянуто ансамблеві моделі VotingRegressor і

StackingRegressor, рекурентні нейронні мережі SimpleRNN, LSTM, GRU та темпоральну згорткову мережу TCN. Запропоновано стратегію групового розбиття та валідації даних за номером циклу навантаження, а також описано загальну структуру програмної системи дослідження, що охоплює модулі EDA, Dataset, ML Models, Predict, Explain i Report.

У *третьому розділі* дисертаційної роботи виконано попередню обробку експериментального набору даних, отриманого під час випробувань NiTi-дроту з пам'яттю форми на малоциклову втому, проведено статистичний аналіз входних ознак і цільової змінної, а також здійснено виявлення аномальних значень у даних. Наведено результати навчання та оцінювання моделей машинного навчання в межах навчального діапазону циклів 100–250. Для ансамблевих моделей здійснено налаштування гіперпараметрів методом GridSearchCV, а для нейромережових архітектур – методом Hyperband. Проведено порівняльний аналіз точності моделей за метриками MSE, MAE, MAPE та R2. Встановлено, що всі побудовані моделі забезпечують високу точність прогнозування в межах діапазону навчальних даних. Показано, що ансамблеві та нейромережові підходи здатні з високою точністю відтворювати залежність «напруження–деформація» та форму гістерезисних петель у межах навчального інтервалу. Проведено порівняльне оцінювання точності побудованих моделей на тестових даних.

У *четвертому розділі* дисертаційної роботи представлено результати екстраполяційного прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми на віддалених циклах навантаження. Досліджено узагальнювальну здатність моделей на циклах 251, 260, 300, 350, 400, 450 та 500. Встановлено, що найкращі результати у задачі довгострокового прогнозування забезпечує модель LSTM. Для інтерпретації прогнозів застосовано методи SHAP та Integrated Gradients. Показано, що в моделях машинного навчання домінуючий вплив на прогноз деформації здійснює параметр Stress, тоді як значущість ознаки Cycle зростає зі збільшенням номера циклу, що відображає накопичення ефектів функціональної втоми. Отримані результати підтверджують фізичну узгодженість

побудованих моделей і свідчать про їх практичну придатність у задачах прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми.

Наведені у дисертації *висновки* надають повну інформацію про виконання поставлених завдань та відповідають вимогам до наукового дослідження, а також пропонують ефективні підходи та методи вирішення конкретних завдань. Ці результати мають значний науковий та практичний потенціал, який можна використати як основу для подальших етапів дослідження у сфері комп'ютерних наук.

Список використаних джерел свідчить про те, що під час роботи було проаналізовано сучасні результати наукових досліджень науковців з різних країн світу. Дисертація є завершеною науковою працею, а її оформлення відповідає встановленим вимогам МОН України.

Відсутність порушення академічної доброчесності.

За результатами аналізу дисертаційної роботи та публікацій автора порушення академічної доброчесності не виявлено. Елементи фальсифікації чи спотворення тексту в роботі відсутні.

Зауваги та рекомендації до дисертаційної роботи

Попри загальне позитивне враження від дисертаційної роботи, варто відзначити деякі недоліки та навести незначні зауваги до викладеного здобувачем матеріалу:

1. Дисертант на титульній сторінці пояснювальної записки до дисертаційної роботи наводить УДК 004.8: 539.3:539.4, яке можна дещо спростити, а саме: УДК 004.8:539.[3+4], що означатиме застосування методів штучного інтелекту для моделювання, прогнозування чи аналізу пружності, деформацій та міцності матеріалів і конструкцій.

2. Дисертант, наводячи розділ "Перелік опублікованих праць за темою дисертації" (ст. 8–9), практично в кожному джерелі дає посилання на DOI, забуваючи про те, що вкінці будь-якого такого посилання символ крапки "." не ставлять.

3. Дисертант дає таке визначення об'єкта дослідження: *"процес прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми за умов циклічного навантаження методами і засобами машинного навчання"*. З мережі Інтернет відомо, що це зв'язна сукупність елементів дійсності – процесів чи явищ, вивчення яких становить практичний інтерес для дослідника і науки загалом. Також відомо, що термін *"прогнозування"* – це науково обґрунтований процес передбачення майбутнього стану, тенденцій або розвитку об'єктів чи явищ на основі аналізу історичних і сучасних даних. Тобто, в авторському формулюванні зайвим є початкове слово *"процес"*. Також у наукових колах вважають, що об'єкт дослідження – це *"кого б'ють"* і не вказують *"чим б'ють"*, *"для чого б'ють"* і *"як б'ють"*. Тобто, в авторському формулюванні зайвою є кінцівка, де вказано *"... методами і засобами машинного навчання"*, позаяк це вказують далі в предметі дослідження. Як наслідок, мало б бути: *"прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми за умов циклічного навантаження"*.

4. Дисертант, наводячи підрозділ *"Наукова новизна одержаних результатів"* (ст. 21–22), декларує аж три пункти *"Удосконалено метод..."*. Здоровий глузд вказує на те, якщо було щось зараз удосконалено, то перед цим було щось кимось вже зроблено початково / попередньо. Тому, з мережі Інтернет відомо: *"Для таких пунктів наукової новизни, як 'удосконалено...' та 'отримала подальший розвиток' метод, методика/технологія, методологія чи теорія потрібно вказувати, чим він/вона відрізняється від наявних. Якщо це вас не влаштовує, то використовуйте такі пункти наукової новизни, як 'вперше розроблено...' та 'розроблено' метод, методика, методологія чи теорія"*, де очевидно, що попередньо ніхто такого ще до вас не робив.

5. За ради святих наукових ідей потрібно відати належне дисертанту, що він у своєму дослідженні наводить 86 рисунків тільки в основному тексті записки, на кожному з яких від 2 до 6 якщо не графіки, то якісь діаграми. Хоча кожен з цих рисунків в тексті записки має посилання з коротким описом його змісту, не більшим від назви самого рисунка, проте більшість з цих так званих підрисунків не мають жодного пояснення. Постійний брак так званого тексту (по-

яснень до рисунків) призводить до четвертини порожньої сторінки, а також розриву рисунків між сторінками.

6. Дисертант, під час викладення матеріалу, чомусь не простежив за тим, що в деяких випадках половина рисунка знаходиться на одній сторінці, а інша – на наступній. Насамперед це стосується таких рисунків, як 3.38, 4.6, 4.9, 4.15, 4.19 і 4.20. Для уникнення такого дисертанту потрібно було закріпити об'єкти у тексті (обравши обтікання "У тексті" / "In Line with Text") або примусово перенести весь рисунок на наступну сторінку за допомогою розриву сторінки (Ctrl + Enter), а текстовку з наступної сторінки перенести на попередню. Окрім цього, на багатьох рисунках текстову та числову інформацію наведено шрифтом не більше 5-6 пт, а потрібно хоча б 9-10 пт.

7. Оцінюючи наукову значущість роботи, варто віддати належне здобувачеві, який у своєму дослідженні наводить належний математичний апарат для виявлення аномалій за правилом $\pm 3\sigma$, для виявлення локальних аномалій за ковзним z-показником, для оцінювання якості прогнозування, для інтерпретації результатів прогнозування методами ХАІ, а також ансамблеву регресійну модель зваженого голосування (Voting Regressor) тощо. Однак, якщо для виявлення аномалій за правилом $\pm 3\sigma$ автор використовує три формули, де він зробив посилання на їхнє джерело, то для багатьох інших математичних викладок як таких посилань на відповідні джерела інформації є обмаль, інколи – вони практично відсутні.

8. У багатьох математичних викладках відсутні пояснення до деяких ідентифікаторів, використаних у формулах, а також спеціальні позначення. Наприклад, у формулі (2.6) не вказано, що позначення $\lfloor * \rfloor$ означає заокруглення до цілого меншого. У багатьох формулах пояснення до них через "де" як правило дисертант починає з початку рядка, водночас як у багатьох інших формулах це "де" знаходиться з абзацного відступу, де напрошується запитання "чому?".

9. Дисертант на стор. 53, описуючи розд. 2.2.3., наводить формули (2.7)–(2.9), де у межах вікна W_i обчислювали локальне середнє та локальну міру розкиду, а також локальне стандартизоване відхилення, де вони мають такі відпо-

відно позначення: $\mu_{local}(i)$, $\sigma_{local}(i)$ та $z_{local}(i)$. Викликає запитання, чому тут параметр циклу i (ідентифікатор вікна) взято в дужки (i) , адже в наукових колах відомо, що його завжди ставлять нижнім індексом, водночас як параметр етапу чи стадії ставлять у дужках верхнім індексом, а після цього в дужках зазвичай ставлять або момент часу t , або якість інші входні дані. Тому тут доцільно було б ввести такі ідентифікатори зазначених змінних: μ_i^{local} , σ_i^{local} та z_i^{local} .

10. У висновках до розд. 2 на стор. 83 дисертант пише: "Запропоновано математичну модель задачі прогнозування, у якій номер циклу N розглядали як незалежну входну змінну. Це дало можливість чітко відокремити прогнозування в межах діапазону навчальних даних (у межах $N \in [N_{min}, N_{max}]$) від екстраполяційного прогнозування для $N > N_{max}$ і визначити математичну модель, спільну для різних класів ML моделей. Не зрозуміло, чому автор відокремлює прогнозування за навченою моделлю в межах діапазону навчальних даних від прогнозування за її межами за тією ж навченою моделлю. Адже різниця тільки в надійності такого прогнозування: інтерполяція зазвичай є високоточною, водночас як екстраполяція має високий ризик великих помилок.

11. Дисертант, описуючи розд. 4, наводить підрозділи 4.1.1 (ст. 136), 4.2.1 (ст. 146) і 4.4.1 (ст. 156) з однаковою назвою "Аналіз узагальнювальної та екстраполяційної здатності моделі". Аналогічно це стосується і підрозділів 4.1.2 (ст. 139), 4.2.2 (ст. 149) і 4.4.2 (ст. 159) з однаковою назвою "Прогнозування гістерезисної поведінки". Згідно з вимогами Бюлетеня ВАК, у дисертаційній роботі не рекомендується давати однакові назви розділам будь-якої вкладеності. Хоча в дисертації ці назви розділів третьої вкладеності, в кожному з них варто було давати хоча б якесь уточнення, наприклад: 4.1.2. Прогнозування гістерезисної поведінки за моделлю VotingRegressor чи 4.2.2. ... за моделлю StackingRegressor.

Однак, висловлені мною вище зауваги не є визначальними і не применшують загальну наукову новизну та практичну значущість результатів дослідження здобувача, тобто не істотно впливають на мою позитивну оцінку дисертаційної роботи.

Загальні висновки

1. Дисертаційна робота здобувача ступеня доктора філософії Тимошука Дмитра Івановича за темою "Методи та моделі машинного навчання для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми" виконана на належному практично науковому рівні, не порушує принципів академічної доброчесності та є завершеним науковим дослідженням, сукупність теоретичних та практичних результатів якого вирішує наукове завдання, що має немаловажне значення для комп'ютерних наук.

2. За тематикою, змістом та науковими результатами дисертаційна робота відповідає спеціальності 122 "Комп'ютерні науки" галузі знань 12 "Інформаційні технології".

3. Вважаю, що дисертаційна робота за актуальністю, практичним значенням і науковою новизною повністю відповідає вимогам наказу МОН України № 40 від 12.01.2017 р. "Про затвердження вимог до оформлення дисертацій" із змінами, Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії (Постанова Кабінету Міністрів України № 44 від 12.01.2022 р.). Автор дисертаційної роботи – Тимошук Дмитро Іванович заслуговує на присудження йому ступеня доктора філософії за спеціальністю 122 "Комп'ютерні науки" галузі знань 12 "Інформаційні технології".

Офіційний опонент

професор кафедри програмного забезпечення

Національного університету "Львівська політехніка"

доктор технічних наук, професор

 **Юрій ГРИЦЮК**

Підпис д.т.н., проф. Грицюка Ю. І. засвідчую:

Вчений секретар НУ "Львівська політехніка"

"30" 06 2026 р.

 **Роман БРИЛИНСЬКИЙ**

