

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

РЕЦЕНЗІЯ

кандидата технічних наук, доцента **Яцишина Василя Володимировича**
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 дисертаційної роботи та зв'язок з науковими напрямками, темами

Дисертаційна робота Тимощука Дмитра Івановича виконана в межах сучасного напрямку комп'ютерних наук, пов'язаного із застосуванням методів машинного навчання та пояснюваного штучного інтелекту для аналізу експериментальних даних і прогнозування поведінки матеріалів. Актуальність теми визначається потребою у побудові моделей, здатних відтворювати складні нелінійні залежності між напруженням, деформацією, номером циклу та фазою навантаження-розвантаження, а також забезпечувати прогнозування поведінки матеріалу на наступних циклах навантаження-розвантаження. Використання таких моделей дає змогу скоротити обсяг тривалих експериментальних досліджень і підвищити обґрунтованість прогнозів завдяки застосуванню методів пояснюваного штучного інтелекту.

Робота пов'язана з виконанням науково-дослідної теми ВК 76-24 «Розв'язування задач науки методами штучного інтелекту», номер державної реєстрації 0125U000584, що підтверджує її відповідність науковим напрямам досліджень Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя.

2. Наукова новизна результатів дисертаційної роботи

Основними науковими результатами роботи є:

- уперше запропоновано та обґрунтовано математичну модель прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми, у якій номер циклу навантаження-розвантаження 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;
- уперше 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 шляхом застосування групового розбиття даних за номером циклу навантаження-розвантаження, що дало змогу унеможливити витік інформації між вибірками;
- 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 врахувати зміну деформації матеріалу в умовах циклічного навантаження.

3. Практична цінність одержаних результатів

Практична цінність одержаних у дисертаційній роботі результатів полягає у програмній реалізації моделей машинного навчання для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми за умов циклічного навантаження, зокрема на циклах, що виходять за межі навчального та тестового діапазону даних. Це дає змогу скоротити обсяг тривалих і ресурсомістких експериментальних випробувань, отримувати прогнозовані значення деформації матеріалу та аналізувати зміну форми гістерезисних петель.

Отримані результати можуть бути використані для прогнозування деформації та гістерезисних петель SMA, оцінювання впливу циклічної втоми на функціональні властивості матеріалу, аналізу демпфувальної здатності SMA-елементів, а також під час проєктування актуаторів, сенсорних, демпфувальних і конструкційних елементів на основі сплавів з пам'яттю форми. Окрім цього, реалізована програмна система дає змогу будувати, оцінювати та інтерпретувати результати застосування запропонованих моделей машинного навчання і забезпечувати відтворюваність обчислювальних експериментів. Розроблена програмна система може бути адаптована для інших наборів даних, режимів навантаження та суміжних класів функціональних матеріалів.

Практичне використання результатів дисертаційної роботи підтверджено довідками та актами впровадження. Зокрема, результати наукового дослідження впроваджено в освітній процес Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя під час викладання дисциплін «Методи та системи штучного інтелекту» та «Машинне навчання». Також результати використано у діяльності ТОВ «Ново-Ком» і ТОВ «СЕЙСМО АНАЛІТИКС» під час розроблення та вдосконалення підходів до аналізу експериментальних даних, прогнозування складних нелінійних процесів та інтерпретації результатів машинного навчання.

4. Повнота викладення результатів дослідження у наукових публікаціях, дотримання вимог академічної доброчесності

Основні наукові і практичні результати дисертаційної роботи здобувач освітнього ступеня PhD Тимошук Дмитро Іванович опублікував у ряді наукових публікацій. Зокрема, за темою роботи 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 апробовано на міжнародних наукових конференціях, що підтверджує належний рівень наукового оприлюднення.

Зміст опублікованих праць охоплює основні положення дисертаційного дослідження, зокрема побудову ансамблевих і нейромережових моделей машинного навчання, прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми, оцінювання точності моделей, аналіз їхньої узагальнювальної та екстраполяційної здатності, а також інтерпретацію результатів засобами пояснюваного штучного інтелекту. Це дає підстави вважати, що наукові результати дисертації належним чином представлені у фахових наукових виданнях.

У дисертаційній роботі дотримано вимог академічної доброчесності. Використані положення, ідеї та результати інших авторів супроводжуються відповідними посиланнями на джерела. У роботі зазначено особистий внесок здобувача у формування концепції дослідження, розроблення моделей, проведення обчислювальних експериментів, аналіз та інтерпретацію отриманих результатів. Ознак порушення академічної доброчесності не виявлено.

5. Ступінь обґрунтованості та достовірність сформульованих в дисертації наукових положень, висновків і рекомендацій

Наукові положення, висновки та рекомендації, сформульовані у дисертаційній роботі, є достатньо обґрунтованими та достовірними. Їх обґрунтованість забезпечується коректною постановкою науково-практичної задачі, аналізом сучасного стану досліджень у галузі прогнозування властивостей сплавів з пам'яттю форми, використанням експериментальних

даних, отриманих під час випробувань NiTi-дроту за різних частот циклічного навантаження, а також застосуванням сучасних методів машинного навчання та пояснюваного штучного інтелекту.

Важливим чинником обґрунтованості результатів є використаний у роботі математичний апарат, що охоплює методи математичної статистики, регресійного аналізу, машинного навчання, групової крос-валідації, кількісного оцінювання похибок прогнозування та інтерпретації моделей. У дисертації запропоновано математичну модель прогнозування, у якій прогнозоване значення деформації визначається як функція напруження, номера циклу навантаження-розвантаження та індикатора фази навантаження або розвантаження. Введення номера циклу як незалежної вхідної змінної забезпечує формальну основу для прогнозування деформації не лише в межах навчального діапазону, а й у режимі екстраполяції на віддалені цикли навантаження.

Достовірність отриманих результатів підтверджується використанням обґрунтованої стратегії підготовки та розбиття даних, зокрема групового розбиття за номером циклу навантаження-розвантаження, що унеможливорює витік інформації між навчальною, валідаційною та тестовою вибірками. Для оцінювання якості моделей застосовано загальноприйняті метрики MSE, MAE, MAPE та R^2 , проведено порівняльний аналіз ансамблевих моделей, рекурентних нейронних мереж і темпоральної згорткової мережі. Додаткову обґрунтованість результатам надає інтерпретація прогнозів за допомогою методів SHAP та Integrated Gradients, що дало змогу оцінити фізичну узгодженість виявлених моделями залежностей.

Висновки дисертаційної роботи логічно впливають із поставлених завдань, результатів обчислювальних експериментів, порівняльного аналізу моделей та інтерпретації отриманих прогнозів. Отримані результати є достатньо аргументованими, а сформульовані рекомендації мають наукове і практичне підґрунтя.

6. Оцінка змісту дисертації

Дисертаційна робота має логічну структуру, відповідає поставленій меті та послідовно розкриває зміст проведеного дослідження.

У вступі обґрунтовано актуальність теми, визначено мету, завдання, об'єкт, предмет і методи дослідження, сформульовано наукову новизну, практичне значення результатів, наведено відомості про апробацію та публікації здобувача.

У першому розділі роботи проаналізовано сучасний стан досліджень та узагальнено наявні підходи до використання методів машинного навчання та пояснюваного штучного інтелекту у сфері прогнозування властивостей сплавів з пам'яттю форми.

У другому розділі дослідження обґрунтовано процедуру збору, формування та попереднього опрацювання експериментальних даних, розроблено стратегію групового розбиття за номером циклу, побудовано математичну модель прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми за умов циклічного навантаження на базі моделей машинного навчання, обґрунтовано метрики оцінювання результатів прогнозування та запропоновано структуру програмної системи дослідження.

У третьому розділі представлено результати побудови, навчання й оцінювання ансамблевих моделей VotingRegressor і StackingRegressor, рекурентних нейронних мереж SimpleRNN, LSTM, GRU та темпоральної згорткової мережі TCN. Проведено порівняльний аналіз точності моделей за метриками MSE, MAE, MAPE та R2.

У четвертому розділі досліджено здатність побудованих моделей до прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми на віддалених циклах навантаження. Значну увагу приділено аналізу екстраполяційної здатності моделей та інтерпретації отриманих прогнозів із використанням методів SHAP та Integrated Gradients.

Загалом зміст дисертаційної роботи є цілісним, науково обґрунтованим і достатньо повно розкриває тему дослідження. Матеріал викладено послідовно, із належним поєднанням теоретичного аналізу, експериментальних даних,

математичного моделювання, методів машинного навчання, кількісного оцінювання та інтерпретації результатів.

7. Відповідність дисертаційної роботи вимогам МОН України

Дисертаційна робота за своїм змістом, структурою, обсягом проведених досліджень, науковим рівнем одержаних результатів та повнотою їх висвітлення у наукових публікаціях відповідає вимогам МОН України до дисертацій на здобуття ступеня доктора філософії. Дисертація є завершеною науковою працею, у якій розв'язано актуальну науково-практичну задачу побудови, оцінювання та інтерпретації моделей машинного навчання для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми за умов циклічного навантаження. За тематикою, змістом і отриманими результатами робота відповідає галузі знань 12 «Інформаційні технології» та спеціальності 122 «Комп'ютерні науки».

8. Зауваження до дисертації

1. У дисертаційній роботі дослідження виконано на основі експериментальних даних для NiTi-дроту з пам'яттю форми за визначених умов циклічного навантаження. Отримані результати є переконливими для розглянутого матеріалу та режимів випробувань, однак питання перенесення запропонованих підходів до побудови моделей на інші типи сплавів з пам'яттю форми, інші геометричні параметри зразків або інші умови експлуатації залишається відкритим і може бути предметом подальших досліджень.

2. У роботі значну увагу приділено екстраполяційному прогнозуванню на віддалених циклах навантаження. Водночас оцінювання екстраполяційної здатності моделей здійснено на конкретно вибраних циклах, що дає змогу підтвердити працездатність підходу в межах розглянутого експериментального сценарію, але не повністю розкриває межі застосовності моделей за значно більшої кількості циклів.

3. У дисертації наведено порівняльний аналіз ансамблевих моделей, рекурентних нейронних мереж і темпоральної згорткової мережі за основними метриками точності. Разом з тим, питання порівняння моделей за

обчислювальною складністю, часом навчання, вимогами до апаратних ресурсів і зручністю практичного впровадження висвітлено менш детально, хоча такі аспекти є важливими для прикладного використання запропонованих підходів.

4. Інтерпретація результатів за допомогою SHAP та Integrated Gradients дала змогу оцінити внесок вхідних ознак у прогнозоване значення деформації та підтвердити фізичну узгодженість моделей. Водночас отримані ХАІ-пояснення здебільшого мають характер інтерпретації поведінки моделей, а не прямого доведення фізичних механізмів, тому їх доцільно розглядати як інструмент підтримки аналізу, а не як самостійне фізичне підтвердження закономірностей.

5. У роботі основну увагу зосереджено на точності прогнозування деформації та відтворенні форми гістерезисних петель. Водночас питання кількісного оцінювання невизначеності прогнозів, довірчих інтервалів або стійкості моделей до варіацій вхідних даних розглянуто обмежено. Це не знижує цінності отриманих результатів, однак могло б розширити уявлення про надійність моделей у практичних умовах застосування.

6. Окремі результати обчислювальних експериментів подано досить детально, з великою кількістю числових метрик і графіків для різних моделей та циклів навантаження. Такий підхід забезпечує повноту викладу, однак у деяких фрагментах дещо ускладнює виокремлення головних закономірностей. Доцільним було б більш чітко акцентування на ключових результатах після кожного блоку порівняльного аналізу моделей.

Зазначені зауваження не ставлять під сумнів основні наукові положення дисертації, не знижують її наукової новизни та практичної цінності й не мають істотного впливу на загальну позитивну оцінку 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 важливу науково-практичну задачу побудови, оцінювання та інтерпретації моделей машинного навчання для прогнозування складної

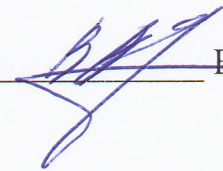
нелінійної поведінки сплавів з пам'яттю форми за умов циклічного навантаження. За тематикою, змістом і науковими результатами дисертація відповідає спеціальності 122 «Комп'ютерні науки» галузі знань 12 «Інформаційні технології».

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».

Рецензент – кандидат технічних наук, доцент,
зав. кафедри систем штучного інтелекту
та аналізу даних

Тернопільського національного

технічного університету імені Івана Пулюя



Василь ЯЦИШИН



Василь Яцишин
Засвідчую:
[Signature]