

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ЧЕРНІВЕЦЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ЮРІЯ ФЕДЬКОВИЧА

Кваліфікаційна наукова праця
на правах рукопису

КОРОП МИКОЛА МИКОЛАЙОВИЧ

УДК 537.32:004.8

ДИСЕРТАЦІЯ

**ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДІВ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ ТА МАШИННОГО
НАВЧАННЯ ДЛЯ АВТОМАТИЗАЦІЇ ДОСЛІДЖЕНЬ ЕКСТРУДОВАНИХ
ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИХ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ ВІ-ТЕ**

105 – Прикладна фізика та наноматеріали

10 – Природничі науки

Подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело

 М. М. Короп

Науковий керівник: кандидат фізико-математичних наук, асистент кафедри термоелектрики та медичної фізики **Прибила Андрій Вікторович**

Чернівці – 2026

АНОТАЦІЯ

Короп М. М. Використання методів штучного інтелекту та машинного навчання для автоматизації досліджень екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 105 – Прикладна фізика та наноматеріали. – Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича МОН України, Чернівці, 2026.

Дисертаційна робота присвячена розробці мультимодальної системи на основі методів штучного інтелекту та машинного навчання для автоматизації досліджень екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те. Єдиний інструментальний комплекс поєднує автоматизований збір даних з наукової літератури, аналіз мікроструктурних зображень та прогнозування термоелектричних властивостей для оптимізації хімічного складу і технологічних режимів синтезу матеріалу.

Дисертація складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел та трьох додатків.

У **вступі** обґрунтовано актуальність роботи; сформульовано мету, основні завдання, об'єкт та предмет дослідження; вказано наукову новизну і практичну цінність отриманих результатів; наведено інформацію про особистий внесок здобувача, апробацію роботи, її структуру та обсяг.

У **першому розділі** дисертації проведено аналіз стану досліджень у галузі термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те, синтезованих методом гарячої екструзії. Представлено літературний огляд, що розкриває ключові напрямки застосування методів штучного інтелекту та машинного навчання у термоелектричному матеріалознавстві, зокрема кероване та некероване машинне навчання, нейронні мережі, прогнозування властивостей термоелектричних матеріалів, а також аналіз мікроструктури методами комп'ютерного зору.

Проаналізовано перспективи різних методів машинного навчання, генеративних моделей та зворотнього проєктування матеріалів.

На основі аналізу встановлено, що для матеріалів на основі Bi–Te, отриманих методом гарячої екструзії, залишається невирішеною задача комплексного врахування мікроструктури, хімічного складу та технологічних параметрів у межах єдиної прогностичної моделі, а фрагментарність та неструктурованість наявних даних є основними обмеженнями для широкого впровадження методів машинного навчання у термоелектричному матеріалознавстві.

У **другому розділі** дисертації побудовано фізичну та комп’ютерну модель гарячої екструзії термоелектричного матеріалу на основі Bi–Te у середовищі COMSOL Multiphysics 6.2. На основі параметричного розрахунку встановлено домінантний вплив швидкості деформації на силу екструзії: при зростанні швидкості в 3,1 раза сила екструзії збільшується з 22,8 до 78,2 кН, тоді як зниження температури з 500 до 340 °C зумовлює зростання лише на 40–50 %. Обґрунтовано критерій якості поверхні екструдату: $v \leq 0,48$ мм/хв при $T \geq 400$ °C. За результатами моделювання визначено структуру цільових ознак для формування системи збору даних.

Розроблено спеціалізовану систему автоматизованого збору термоелектричних параметрів із наукових джерел на основі додатково навченої мовної моделі MatSciBERT із двома класифікаційними головами для задач розпізнавання іменованих сутностей (NER) та встановлення зв’язків між ними (RE). Описано модуль попередньої обробки документів, що включає обробку PDF-документів та оптичне розпізнавання інформації зі сканованих зображень.

Встановлено, що предметна адаптація є визначальним фактором для точності екстракції: MatSciBERT перевершує базову модель BERT-base на 9 в.п. за метрикою F1-score (NER). Збільшення обсягу навчальних даних у 5 разів (з 1200 до 6000 фрагментів) забезпечило приріст F1 (NER) на 10 в.п. (до 0,82) та F1 (RE) на

8 в.п. (до 0,84), що дозволило сформувати структуровану базу даних властивостей екструдованих матеріалів на основі Bi–Te для подальшого аналізу та оптимізації.

У **третьому розділі** запропоновано методику та реалізовано мультимодальну систему комп'ютерного зору для кількісного аналізу мікроструктури екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Bi–Te. Система поєднує два масштаби дослідження: атомно-силову мікроскопію для наномасштабної топографії та оптичну металографію темного поля для аналізу структури зерен. Описано методику підготовки зразків, проведення АСМ-вимірювань та алгоритми обробки топографічних даних. Розроблено модель семантичної сегментації на основі модифікованої архітектури U-Net, яка досягає середнього показника $mIoU = 0,73$ ($F1 = 0,91$ для класу `grain_matrix`, $F1 = 0,85$ для класу `grain_boundary`), що перевершує базову модель на 6 в.п. та дозволяє автоматизувати розпізнавання шести класів структурних компонентів.

Побудовано мультимодальну модель прогнозування ключових термоелектричних параметрів (коефіцієнт Зеєбека S , електропровідність σ , теплопровідність κ , фактор потужності PF , добротність ZT), що інтегрує мікроструктурні зображення, структуровані числові дані про хімічний склад і параметри екструзії та контрастивне навчання через механізм крос-модальної уваги. Модель досягає $MAPE = 5,3 \%$ для показника ZT , що суттєво перевершує результати одномодальних підходів ($9,1 \%$ та $7,4 \%$) і підтверджує синергетичний ефект обраної архітектури.

Аналіз інтерпретованості за допомогою методу Grad-CAM засвідчив відповідність модельних залежностей фізичним механізмам: при прогнозуванні теплопровідності модель фокусується на структурних дефектах, тоді як для коефіцієнта Зеєбека визначальним є внесок структурованих даних про хімічний склад та електронну структуру.

У **четвертому розділі** розглянуто застосування розробленої системи для

оптимізації термоелектричних матеріалів. Реалізовано алгоритм зворотного проєктування для екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Bi-Te , який за заданими цільовими значеннями термоелектричних властивостей прогнозує оптимальний хімічний склад та параметри синтезу із оцінкою невизначеності прогнозу через ансамбль моделей, що дозволяє скоротити цикл розробки нових матеріалів шляхом заміни систематичного перебору складів цілеспрямованим пошуком.

Розроблено алгоритм багатокритеріальної оптимізації для трьох типів термоелектричних пристроїв: генераторів із максимізацією ZT , модулів Пельтьє та сенсорів. Описано систему інтелектуального управління технологічним процесом екструзії.

Створено цілісне програмне забезпечення, яке поєднує в межах єдиного інструментального середовища автоматизований збір даних із літератури, комп'ютерне моделювання процесів екструзії, мультимодальний аналіз мікроструктури, прогнозування термоелектричних властивостей та зворотне проєктування матеріалів. Ця розробка забезпечує автоматизацію повного циклу дослідження екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Bi-Te – від інтелектуального аналізу літературних джерел до оптимізації хімічного складу та технологічних режимів. Програмний комплекс не має аналогів за функціональними можливостями як у вітчизняній, так і в закордонній практиці.

Наукова новизна одержаних результатів:

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 Bi-Te 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 Bi-Te, 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 σ , теплопровідність κ , 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 Bi-Te, 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.

Практичне значення одержаних результатів.

Розроблено інтелектуальну комп'ютерну програму для комплексного розв'язання оберненої багатофакторної задачі із оптимізації термоелектричних

матеріалів на основі Bi–Te при заданих граничних умовах, що не має аналогів як на вітчизняному, так і на міжнародному рівні. Програма забезпечує автоматизований збір даних із наукової літератури, автоматичну сегментацію мікроструктури, прогнозування термоелектричних властивостей, зворотне проєктування оптимального хімічного складу та параметрів синтезу за заданими цільовими властивостями з оцінкою невизначеності прогнозу. Результати роботи застосовуються при виконанні науково-дослідної роботи в Інституті 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).

Ключові слова: термоелектричні матеріали, термоелектричні властивості, перетворювачі енергії, зона провідності, фонон, мікроструктурні характеристики, тверді розчини, моделі, комп'ютерне моделювання, комп'ютерні методи, інтелектуальна система, штучний інтелект, машинне навчання, алгоритми, мікроструктурний аналіз.

ABSTRACT

Korop M. Application of artificial intelligence and machine learning methods for research automation on extruded Bi–Te-based thermoelectric materials. – qualifying scientific work as a manuscript.

Thesis on search for the Doctor of Philosophy degree in specialty 105 – Applied Physics and Nanomaterials. – Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University, Ministry of Education and Science of Ukraine, Chernivtsi, 2026.

The thesis is devoted to the development of a multimodal system based on artificial intelligence and machine learning methods for the automation of research on extruded Bi–Te-based thermoelectric materials. The unified instrumental platform integrates automated data extraction from scientific literature, microstructural image analysis, and

thermoelectric property prediction for the optimization of chemical composition and technological synthesis parameters.

The thesis consists of an introduction, four chapters, conclusions, a list of references, and three appendices.

The introduction substantiates the relevance of the research; formulates the aim, principal objectives, object, and subject of the study; specifies the scientific novelty and practical value of the obtained results; and provides information on the personal contribution of the author, approbation, structure, and scope of the work.

The first chapter presents an analysis of the current state of research in the field of Bi–Te-based thermoelectric materials synthesized by hot extrusion. A literature review is provided that covers the key directions of artificial intelligence and machine learning application in thermoelectric materials science, including supervised and unsupervised machine learning, neural networks, prediction of thermoelectric material properties, and microstructure analysis by computer vision methods. The prospects of various machine learning approaches, generative models, and inverse material design are analyzed.

Based on the analysis, it has been established that for Bi–Te-based materials obtained by hot extrusion, the problem of comprehensive integration of microstructure, chemical composition, and technological parameters within a single predictive model remains unresolved, while the fragmentary and unstructured nature of the available data constitutes the principal limitation for the widespread adoption of machine learning methods in thermoelectric materials science.

In the second chapter, a physical and computational model of the hot extrusion of Bi–Te-based thermoelectric material has been developed in the COMSOL Multiphysics 6.2 environment. Parametric calculations have established the dominant influence of deformation rate on the extrusion force: a 3.1-fold increase in velocity results in the extrusion force rising from 22.8 to 78.2 kN, whereas a temperature decrease from 500 to 340 °C causes an increase of only 40–50%. A surface quality criterion for the extrudate

has been substantiated: $v \leq 0.48$ mm/min at $T \geq 400$ °C. Based on the simulation results, the structure of target features for the data acquisition system has been determined.

A specialized system for automated extraction of thermoelectric parameters from scientific sources has been developed, based on a fine-tuned MatSciBERT language model equipped with two classification heads for named entity recognition (NER) and relation extraction (RE) tasks. A document preprocessing module has been described, which includes PDF document processing and optical character recognition from scanned images.

It has been established that domain-specific adaptation is the determining factor for extraction accuracy: MatSciBERT surpasses the baseline BERT-base model by 9 percentage points in F1-score (NER). A five-fold increase in training data volume (from 1,200 to 6,000 fragments) yielded an improvement in F1 (NER) of 10 p.p. (to 0.82) and in F1 (RE) of 8 p.p. (to 0.84), which enabled the formation of a structured database of properties of extruded Bi–Te-based materials for subsequent analysis and optimization.

In **the third chapter**, a methodology has been proposed and a multimodal computer vision system has been implemented for quantitative analysis of the microstructure of extruded Bi–Te-based thermoelectric materials. The system integrates two scales of investigation: atomic force microscopy for nanoscale topography and dark-field optical metallography for grain structure analysis. The sample preparation methodology, AFM measurement procedures, and topographic data processing algorithms are described. A semantic segmentation model based on a modified U-Net architecture has been developed, achieving a mean mIoU = 0.73 (F1 = 0.91 for the grain_matrix class, F1 = 0.85 for the grain_boundary class), which surpasses the baseline model by 6 p.p. and enables automated recognition of six classes of structural components.

A multimodal model for the prediction of key thermoelectric parameters (Seebeck coefficient S , electrical conductivity σ , thermal conductivity κ , power factor PF, figure of merit ZT) has been constructed, integrating microstructural images, structured numerical

data on chemical composition and extrusion parameters, and contrastive learning through a cross-modal attention mechanism. The model achieves a MAPE of 5.3% for the ZT figure of merit, which significantly outperforms unimodal approaches (9.1% and 7.4%) and confirms the synergistic effect of the chosen architecture.

Interpretability analysis using the Grad-CAM method has demonstrated the correspondence between the model dependencies and physical mechanisms: when predicting thermal conductivity, the model focuses on structural defects, whereas for the Seebeck coefficient, the contribution of structured data on chemical composition and electronic structure is determinative.

In **the fourth chapter**, the application of the developed system for the optimization of thermoelectric materials is considered. An inverse design algorithm for extruded Bi–Te-based thermoelectric materials has been implemented, which predicts the optimal chemical composition and synthesis parameters for given target values of thermoelectric properties with prediction uncertainty estimation via a model ensemble, thereby enabling the reduction of the new material development cycle by replacing systematic compositional screening with targeted search.

A multi-objective optimization algorithm for three types of thermoelectric devices has been developed: generators with ZT maximization, Peltier modules, and sensors. An intelligent control system for the extrusion technological process has been described.

An integrated software package has been created that combines, within a unified instrumental environment, automated data extraction from literature, computational modeling of extrusion processes, multimodal microstructure analysis, thermoelectric property prediction, and inverse material design. This development provides automation of the complete research cycle for extruded Bi–Te-based thermoelectric materials – from intelligent analysis of literature sources to optimization of chemical composition and technological regimes. The software package has no analogues in terms of functional capabilities in either domestic or international practice.

Scientific novelty of the results obtained.

1. For the first time, a specialized system for automated extraction of thermoelectric parameters from scientific publications has been developed, the core of which is a fine-tuned MatSciBERT language model with two classification heads for NER and RE tasks, which enabled the formation of a structured database of properties of extruded Bi–Te-based materials for subsequent prediction and optimization of their thermoelectric characteristics by machine learning methods. On an independent test set, the model achieves $F1 = 0.82$ for NER and $F1 = 0.84$ for RE.
2. For the first time, a methodology has been proposed and a multimodal computer vision system has been implemented for quantitative microstructure analysis of extruded Bi–Te-based thermoelectric materials, integrating two investigation scales: atomic force microscopy for nanoscale topography and dark-field optical metallography for grain structure analysis, which enabled automated segmentation of six classes of structural components and the establishment of quantitative correlations between surface microstructural characteristics and thermoelectric properties of the material.
3. For the first time, a multimodal model for the prediction of thermoelectric parameters (Seebeck coefficient S , electrical conductivity σ , thermal conductivity κ , power factor PF, figure of merit ZT) has been constructed, integrating three parallel input branches: microstructural images, structured numerical data on chemical composition and extrusion parameters, and contrastive learning for latent representation alignment, which enabled the solution of the inverse multifactorial optimization problem for thermoelectric materials under given boundary conditions.
4. For the first time, an inverse design algorithm for extruded Bi–Te-based thermoelectric materials has been implemented, which predicts the optimal chemical composition and synthesis parameters for given target values of thermoelectric properties, thereby enabling the reduction of the development cycle for new

thermoelectric materials with specified functional characteristics.

Practical significance of the results obtained.

An intelligent computer program has been developed for the comprehensive solution of the inverse multifactorial optimization problem for Bi–Te-based thermoelectric materials under given boundary conditions, which has no analogues at either the national or the international level. The program provides automated data extraction from scientific literature, automatic microstructure segmentation, thermoelectric property prediction, and inverse design of optimal chemical composition and synthesis parameters for given target properties with prediction uncertainty estimation. The results of the work are applied in the execution of research at the Institute of Thermoelectricity of the National Academy of Sciences of Ukraine and the Ministry of Education and Science of Ukraine under a departmental order of the Division of Materials Science of the NAS of Ukraine “Application of Artificial Intelligence and Machine Learning Methods for Enhancing the Efficiency of Bismuth Telluride-Based Thermoelectric Materials” (state registration number 0125U000210).

Keywords: thermoelectric materials, thermoelectric properties, energy convertors, band structure, phonon, microstructure characteristics, solid solutions, models, computer modelling, computing methods, intelligent system, artificial intelligence, machine learning, algorithms, microstructural analysis.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації:

Наукові праці у періодичних наукових виданнях, проіндексованих у наукометричній базі даних Scopus:

1. Korop, M. (2023). Machine learning in thermoelectric materials science. *Journal of Thermoelectricity*, (1), 44–54. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2023-1-44-54> (Scopus).

2. Anatychuk, L., Korop, M. (2023). Application of machine learning to predict the properties of Bi_2Te_3 based thermoelectric materials. *Journal of Thermoelectricity*, (2), 59–71. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2023-2-59-71> (Scopus).

Внесок авторів: **Короп М.:** розробка методології застосування машинного навчання, збір та підготовка навчальних даних, навчання моделей, аналіз отриманих результатів, написання статті; внесок Анатичука Л.: наукове керівництво, формулювання концепції дослідження, обговорення результатів.

3. Anatychuk, L., Prybyla, A., Korop, M., Kiziuk, Y., Konstantynovych, I. (2024). Thermoelectric power sources using low-grade heat: Part 1. *Journal of Thermoelectricity*, (1-2), 90–96. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2024-1-2-90-96> (Scopus).

Внесок авторів: **Короп М.:** пошук та аналіз літературних джерел, участь у комп'ютерному моделюванні; внесок Анатичука Л.: ідея дослідження, наукове керівництво, обговорення результатів; внесок Прибили А.: проведення комп'ютерного проектування, постановка дослідження, аналіз результатів; внесок Кізюка Ю., Константиновича І.: проведення розрахунків та обговорення результатів.

4. Anatychuk, L., Prybyla, A., Korop, M., Kiziuk, Y., Konstantynovych, I. (2024). Thermoelectric power sources using low-grade heat: Part 2. *Journal of Thermoelectricity*, (3), 36–43. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2024-3-36-43> (Scopus).

Внесок авторів: **Короп М.:** пошук та аналіз літературних джерел, участь у комп'ютерному моделюванні; внесок Анатичука Л.: ідея дослідження, наукове керівництво, обговорення результатів; внесок Прибили А.: проведення комп'ютерного проектування, постановка дослідження, аналіз результатів; внесок Кізюка Ю., Константиновича І.: проведення розрахунків та обговорення результатів.

5. Anatychuk, L., Prybyla, A., Korop, M., Kiziuk, Y., Konstantynovych, I. (2024). Thermoelectric power sources using low-grade heat: Part 3. *Journal of Thermoelectricity*, (4), 61–68. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2024-4-61-68> (Scopus).

Внесок авторів: **Короп М.:** пошук та аналіз літературних джерел, участь у комп'ютерному моделюванні; внесок Анатичука Л.: ідея дослідження, наукове керівництво, обговорення результатів; внесок Прибили А.: проведення комп'ютерного проектування, постановка дослідження, аналіз результатів; внесок Кізіюка Ю., Константиновича І.: проведення розрахунків та обговорення результатів.

6. Korop, M., Prybyla, A. (2025). Application of LLM to Search and Systematize the Properties of Thermoelectric Materials in Scientific Literature. *Journal of Thermoelectricity*, (1), 16–25. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2025-1-16-25> (Scopus).

Внесок авторів: **Короп М.:** розробка методології застосування великих мовних моделей, реалізація алгоритмів пошуку та систематизації даних, аналіз результатів, написання статті; внесок Прибили А.: наукове керівництво, обговорення результатів, участь у формулюванні висновків.

7. Korop, M., Prybyla, A., Lysko, V., Pylypko, V., & Khalavka, Y. (2025). Computer Vision as a Tool for Correlation Analysis of Images of the Microstructure of Bi-Te-based Thermoelectric Materials. *Journal of Thermoelectricity*, (4), 64–75. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2025-4-64-75> (Scopus).

Внесок авторів: **Короп М.:** розробка методології комп'ютерного зору, реалізація алгоритмів кореляційного аналізу мікроструктурних зображень, проведення обчислювальних експериментів, аналіз результатів, написання статті; внесок Прибили А.: наукове керівництво, обговорення результатів; внесок Лиська В.: обговорення результатів; внесок Пилипко В.: керівництво вимірюванням

характеристик, обговорення результатів; внесок Халавки Ю.: співнаукове керівництво, керівництво вимірюванням характеристик, обговорення результатів.

8. Korop M., Prybyla A., and Lysko V. Optimization of spiral anisotropic thermoelectric sensors using machine learning algorithms. Proceedings of SPIE the International Society for Optical Engineering. 13813, *Seventeenth International Conference on Correlation Optics*, 138133A (10 November 2025) <https://doi.org/10.1117/12.3093323> (Scopus).

Внесок авторів: **Короп М.:** розробка методології оптимізації, реалізація алгоритмів машинного навчання для оптимізації спіральних анізотропних сенсорів, аналіз результатів, написання статті; внесок Прибили А.: наукове керівництво, обговорення результатів; внесок Лиська В.: обговорення результатів.

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

9. Korop M., Prybyla A., Lysko V., Methods, and equipment for optimization of Bi-Te based thermoelectric materials using artificial intelligence. Proceedings of the 41st International and 7th Asian Conference on Thermoelectrics (*ICT2025*), Sendai, Japan, 2025. P. 64. URL: https://ict2025.jp/item/ICT2025_Poster_abstract_protected.pdf.

Внесок авторів: **Короп М.:** розробка методології із застосуванням штучного інтелекту для оптимізації термоелектричних матеріалів на основі Bi-Te, проведення досліджень, написання тез; внесок Прибили А.: наукове керівництво, обговорення результатів; внесок Лиська В.: обговорення результатів.

10. Korop M., Prybyla A., Lysko V., Optimization of spiral anisotropic thermoelectric sensors using machine learning algorithms. *The 17th International Conference "Correlation Optics 2025"*, 8-12 September, Chernivtsi, Ukraine. https://zoom.us/jb/doc/_1Iq9kKFROCFhBOx6QCEPg/p/238129514086400.

Внесок авторів: **Короп М.:** розробка методології оптимізації спіральних анізотропних термоелектричних сенсорів із застосуванням алгоритмів машинного навчання, написання тез; внесок Прибили А.: наукове керівництво, обговорення результатів; внесок Лиська В.: обговорення результатів.

11. Korop M., Korop A., Vakulenko T., Khalavka Y., An extension of MNPBEM toolbox for the simulation of decahedral silver nanoparticles' electromagnetic properties. *The 17th International Conference "Correlation Optics 2025"*, 8-12 September, Chernivtsi, Ukraine. <https://zoom.us/jb/doc/jO1XWGTCT7Gcz7YDP-lghw/p/238328434720768>.

Внесок авторів: **Короп М.:** розробка програмного розширення пакету MNPBEM для моделювання електромагнітних властивостей декаедричних наночастинок срібла; внесок Короп А.: експериментальний синтез наночастинок, написання тез, обговорення результатів; внесок Вакуленко Т.: математичний розрахунок форми наночастинок, співавторство тез; внесок Халавки Ю.: наукове керівництво, співавторство тез, обговорення результатів.

12. Korop M., Prybyla A., Lysko V., AI-Based methodology for predicting thermoelectric material performance from literature data. *XX International Freik Conference on Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems*, 6-10 October, Ivano-Frankivsk, Ukraine. С. 126. https://conference.pnu.edu.ua/icpttfn/wp-content/uploads/sites/10/2025/10/Abstract-book_-ICPTTFN-XX_2025.pdf.

Внесок авторів: **Короп М.:** розробка AI-методології для прогнозування характеристик термоелектричних матеріалів на основі літературних даних, проведення досліджень, написання тез; внесок Прибили А.: наукове керівництво, обговорення результатів; внесок Лиська В.: обговорення результатів.

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ.....	21
ВСТУП	23
РОЗДІЛ 1. ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ ТА АНАЛІЗ ПРЕДМЕТНОЇ ОБЛАСТІ...31	31
1.1. Термоелектричні матеріали синтезовані гарячою екструзією	31
1.2. Штучний інтелект та машинне навчання у термоелектричному матеріалознавстві	33
1.2.1. Кероване машинне навчання.....	36
1.2.2. Некероване машинне навчання.....	37
1.2.3. Машинне навчання із підкріпленням	38
1.2.4. Нейронні мережі	38
1.2.5. Прогнозування властивостей термоелектричних матеріалів.....	40
1.3. Аналіз мікроструктури термоелектричних матеріалів методами комп'ютерного зору.....	42
1.4. Перспективи штучного інтелекту та машинного навчання у термоелектриці та нові підходи	44
1.4.1. Фізично інформоване машинне навчання.....	46
1.4.2. Активне навчання та автономні експерименти	46
1.4.3. Генеративні моделі та зворотне проєктування.....	47
Висновки до розділу 1	48
РОЗДІЛ 2. РОЗРОБКА СИСТЕМИ АВТОМАТИЗОВАНОГО ЗБОРУ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ЕКСТРУДОВАНИХ МАТЕРІАЛІВ З НАУКОВОЇ ЛІТЕРАТУРИ НА ОСНОВІ ВЕЛИКИХ УМОВНИХ МОДЕЛЕЙ.....	50
2.1. Постановка задачі та загальна архітектура системи	50
2.2. Фізична модель процесу гарячої екструзії термоелектричного матеріалу на основі Bi–Te.....	52

2.3. Математична модель процесу гарячої екструзії термоелектричного матеріалу на основі Bi–Te.....	55
2.4. Комп’ютерна модель процесу гарячої екструзії термоелектричного матеріалу на основі Bi–Te розроблена в COMSOL Multiphysics.....	57
2.4.1. Геометрична модель та граничні умови.....	57
2.4.2. Результати комп’ютерного моделювання.....	59
2.5. Модуль попередньої обробки документів системи збору інформації із літературних джерел.....	66
2.5.1. Обробка PDF документів.....	66
2.5.2. Оптичне розпізнавання інформації із сканованих зображень.....	69
2.6. Визначення ключових ознак на основі фізичної моделі.....	73
2.7. Схема бази даних для накопичення зібраної інформації.....	76
2.8. Порівняльний аналіз архітектур мовних моделей.....	79
2.8.1. Моделі на основі архітектури Encoder-only (BERT).....	79
2.8.2. Моделі на основі архітектури Decoder-only (GPT).....	82
2.8.3. Моделі на основі архітектури Encoder-Decoder (T5, BART).....	85
2.8.4. Порівняльна оцінка та вибір архітектури.....	86
2.9. Навчання моделей на літературних даних.....	89
2.9.1. Формування анотованого набору даних.....	89
2.9.2. Додаткове навчання MatSciBERT для задач NER та класифікаційної голови для встановлення зв’язків між сутностями.....	93
2.9.3. Оцінка якості додатково навчених моделей та їх валідація.....	96
2.10. Алгоритм збору даних із наукової літератури.....	97
2.10.1. Інтеграція модулів в єдину систему.....	97
2.10.2. Попередній відбір релевантних абзаців.....	101
2.10.3. Обробка табличних даних.....	101
2.10.4. Обробка даних із графіків та нормалізація даних.....	102

2.11. Технічна реалізація системи та оцінка продуктивності	106
Висновки до розділу 2	107
РОЗДІЛ 3. РЕАЛІЗАЦІЯ МУЛЬТИМОДАЛЬНОЇ СИСТЕМИ	
КОМП'ЮТЕРНОГО ЗОРУ ДЛЯ КОРЕЛЯЦІЙНОГО АНАЛІЗУ	
МІКРОСТРУКТУРИ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИХ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ	
Bi–Te.....	110
3.1. Концепція побудови системи комп'ютерного зору	110
3.2. Об'єкти дослідження та методика підготовки зразків	111
3.2.1. Характеристика та технологія синтезу досліджуваних матеріалів	111
3.2.2. Підготовка поверхні для досліджень мікроструктури.....	114
3.3. Розширення архітектури бази даних мікроструктурними зображеннями...	114
3.4. Методика проведення атомно-силової мікроскопії для дослідження поверхні термоелектричних матеріалів на основі Bi–Te	116
3.4.1. Фізичні принципи та апаратна реалізація атомно-силової мікроскопії.	116
3.4.2. Методика проведення АСМ-вимірювань.....	118
3.4.3. Алгоритми обробки топографічних даних	120
3.5. Методика проведення оптичної металографічної мікроскопії	121
3.6. Методика вимірювання термоелектричних властивостей зразків	123
3.6.1. Картографування розподілу термоЕРС	123
3.7. Програмний інструмент для мультимодального аналізу	125
3.7.1. Модулі обробки зображень для мультимодального аналізу мікроструктури	127
3.8. Архітектура моделі семантичної сегментації мікроструктури	130
3.8.1. Архітектура мережі	130
3.8.2. Навчання моделі	131
3.9. Мультимодальна модель прогнозування термоелектричних властивостей	132
3.10. Експериментальна оцінка розробленої системи.....	137

Висновки до розділу 3	139
РОЗДІЛ 4. ЗАСТОСУВАННЯ РОЗРОБЛЕНОЇ СИСТЕМИ ДЛЯ	
ОПТИМІЗАЦІЇ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИХ МАТЕРІАЛІВ	142
4.1. Оптимізація матеріалів для різних типів термоелектричних пристроїв.....	142
4.2. Інтелектуальне управління технологічним процесом екструзії та оптимізація генераторних пристроїв методами машинного навчання	145
4.3. Оптимізація хімічного складу та зворотне проєктування матеріалу під задані граничні умови	151
Висновки до розділу 4	152
ВИСНОВКИ	155
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	158
ДОДАТКИ.....	179

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

ZT – безрозмірний коефіцієнт термоелектричної добротності матеріалу.

SPS – (від англ. *Spark Plasma Sintering*) іскрове плазмове спікання.

MH – машинне навчання.

ШІ – штучний інтелект.

AFLOW – (від англ. *Automatic Flow for Materials Discovery*) автоматизована бібліотека для процесу відкриття матеріалів.

EBS – (від англ. *Electron Backscatter Diffraction*) дифракція зворотно розсіяних електронів.

GAN – (від англ. *Generative Adversarial Network*) генеративна змагальна мережа.

PINN – (від англ. *Physics-Informed Neural Network*) фізично інформована нейронна мережа.

TEM – термоелектричний матеріал.

LLM – (від англ. *Large Language Model*) велика мовна модель.

OCR – (від англ. *Optical Character Recognition*) оптичне розпізнавання символів

API – (від англ. *Application Programming Interface*) програмний інтерфейс додатку.

GPT – (від англ. *Generative Pre-trained Transformer*) генеративний попередньо натренований трансформер.

BERT – (від англ. *Bidirectional Encoder Representations from Transformers*) двонаправлені кодувальні представлення на основі трансформерів.

NER – (від англ. *Named Entity Recognition*) розпізнавання іменованих сутностей.

RE – (від англ. *Relation Extraction*) процес встановлення відношень.

TPU – (від англ. *Tensor Processing Unit*) тензорна обчислювальна одиниця.

BART – (від англ. *Bidirectional and Auto-Regressive Transformers*) двонаправлений та авторегресивний трансформер.

GPU – (від англ. *Graphics Processing Unit*) графічний процесор.

DAG – (від англ. *Directed Acyclic Graph*) спрямований ациклічний граф.

REST – (від англ. *Representational State Transfer*) підхід до архітектури мережових протоколів.

АСМ – атомно-силова мікроскопія

FPN – (від англ. *Feature Pyramid Network*) мережа піраміди ознак.

MAPE – (від англ. *Mean Absolute Percentage Error*) середня абсолютна відносна похибка

MAE – (від англ. *Mean Absolute Error*) середня абсолютна похибка.

Grad-CAM – (від англ. *Gradient-weighted Class Activation Mapping*) метод зваженого градієнтного відображення активації класу.

mIoU – (від англ. *Mean Intersection Over Union*) середнє значення перетину над об'єднанням.

ADC – (від англ. *Analog-to-Digital Converter*) аналого-цифровий перетворювач.

ВСТУП

Актуальність теми дослідження. Термоелектрика має широке застосування у медичній, енергетичній, метрологічній, військовій та космічній індустрії завдяки унікальним властивостям, а також є важливим науково-технічним напрямком із значним потенціалом для подальшого розвитку. Для реалізації переваг термоелектрики, важливим є пошук та синтез оптимальних термоелектричних матеріалів для їх подальшого практичного застосування, що потребує значних часових та економічних затрат. Процес знаходження та виготовлення потрібного матеріалу з оптимальними характеристиками залежить від великої кількості факторів: найкращої комбінації компонентів матеріалів, технологічних процесів та методів синтезу, легуючих домішок та їх концентрації, максимальної добротності тощо.

На поточний момент найширше застосовуються матеріали на основі Bi та Te завдяки високим значенням добротності Z , які було досягнуто, опираючись на фізичні спостереження та емпіричний підхід. Досягнення високих значень добротності для таких матеріалів реалізується шляхом додавання ізовалентних домішок, наприклад, Sb (стибій) чи Se (селен), що дозволяє незначно змінити концентрацію носіїв заряду, але істотно покращити розсіювання теплової хвилі на кристалічній ґратці, суттєво зменшуючи теплопровідність. Незважаючи на значні зусилля, за останні 30 років не відбулось помітного подальшого росту добротності термоелектричних матеріалів. Проте, в літературі було опубліковано велику кількість теоретично обрахованих та експериментально отриманих значень властивостей таких матеріалів. Основним недоліком таких даних є їх фрагментарність, неструктурованість та вузька спеціалізація.

У матеріалознавстві все більшу увагу приділяють новим підходам для

вирішення практичних задач на основі методів штучного інтелекту та машинного навчання, які добре себе зарекомендували у інших сферах. Штучний інтелект має на меті створення комп'ютерних програм, платформ та систем здатних імітувати роботу людського інтелекту для виконання поставлених задач та алгоритмів. Машинне навчання – це підвид штучного інтелекту, який на основі вхідної інформації вчиться самостійно знаходити повторювані шаблони у навчальному наборі та їх узагальнювати. Важливо, щоб вхідні дані були різноманітними та мали достатній обсяг, задовольняли дистрибуцію точок у широкому діапазоні та дозволяли моделювати реальні умови. Таким чином, необхідність у створенні надійної, достатньої і систематизованої бази даних є одним із головних завдань у подальшому розвитку методології та алгоритмів оптимізації термоелектричних матеріалів.

Тому, актуальними є дослідження із застосування нових підходів на базі штучного інтелекту та машинного навчання для збору, систематизації, нормалізації та зберігання властивостей термоелектричних матеріалів із подальшим їх застосуванням для розв'язання оберненої багатофакторної задачі із пошуку та оптимізації термоелектричного матеріалу за заданих граничних умов.

Зв'язок роботи з науковими планами, роботами, темами. Дисертаційна робота і напрями її досліджень пов'язані з виконанням кафедральної тематики у 2021-2025 роках «Фізика, матеріалознавство та прикладні застосування термоелектрики» (№ 0121U110896) та виконання Інститутом термоелектрики НАН України та МОН України науково-дослідних робіт 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).

Мета і задачі дослідження. Метою роботи є розробка методів збору, систематизації, нормалізації та зберігання властивостей термоелектричних

матеріалів, а також розробка прикладної програми для розв'язання оберненої багатофакторної задачі із пошуку та оптимізації термоелектричного матеріалу за заданих граничних умов.

Задачі роботи, які необхідно розв'язати для досягнення поставленої мети, наступні:

1. Розробити систему на основі великої мовної моделі (від англ. *LLM - Large Language Model*) для автоматизованого збору термоелектричних параметрів матеріалів із наукової літератури та сформувати структуру бази даних для їх зберігання.
2. Побудувати фізичну та комп'ютерну модель процесу гарячої екструзії для встановлення оптимальних технологічних режимів синтезу.
3. Розробити інструмент на основі комп'ютерного зору для автоматизованої сегментації та класифікації мікроструктурних елементів та встановлення кореляційних залежностей між мікроструктурою та термоелектричними властивостями матеріалів.
4. Розробити мультимодальну модель для прогнозування термоелектричних властивостей матеріалів із врахуванням їх мікроструктури, хімічного складу та параметрів екструзії.
5. Реалізувати алгоритм зворотного проєктування для визначення оптимального хімічного складу та технологічних режимів за заданих цільових властивостей.
6. Поєднати розроблені методи у єдину комп'ютерну програму.

Об'єктом дослідження є термоелектричні матеріали на основі Bi-Te , отримані методом екструзії.

Предметом дослідження є закономірності впливу мікроструктури, хімічного складу та технологічних параметрів екструзії на термоелектричні властивості матеріалів на основі Bi-Te та методи їх прогнозування і оптимізації на основі штучного інтелекту та машинного навчання.

Методами дослідження є об'єктно-орієнтоване комп'ютерне моделювання фізичних процесів гарячої екструзії термоелектричних матеріалів на основі Bi–Te для встановлення оптимальних технологічних режимів синтезу. Для аналізу мікроструктури застосовано методи атомно-силової мікроскопії та оптичної металографії темного поля у поєднанні з алгоритмами комп'ютерного зору на основі згорткових нейронних мереж для автоматизованої семантичної сегментації структурних компонентів. Збір та систематизацію даних із наукової літератури реалізовано за допомогою методів обробки природної мови на базі додатково навченої мовної моделі MatSciBERT з класифікаційними головами для розпізнавання іменованих сутностей та встановлення зв'язків між ними. Для прогнозування термоелектричних властивостей та розв'язання оберненої задачі оптимізації використано методи машинного навчання, зокрема мультимодальні регресійні моделі та генетичні алгоритми, а також статистичні та аналітичні методи для верифікації отриманих результатів.

Наукова новизна роботи:

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 розпізнавання іменованих сутностей та встановлення зв'язків між ними, що дозволило сформувати структуровану базу даних властивостей екструдованих матеріалів на основі Bi–Te для подальшого прогнозування та оптимізації їх термоелектричних характеристик методами машинного навчання. На незалежній тестовій вибірці з 600 фрагментів, модель досягає коефіцієнта $F1 = 0,82$ для NER (від англ. *Named Entity Recognition* - розпізнавання іменованих сутностей) та $F1 = 0,84$ для RE (від англ. *Relation Extraction* - процес встановлення відношень).
2. Вперше запропоновано методику та реалізовано мультимодальну систему

комп'ютерного зору для кількісного аналізу мікроструктури екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Bi-Te , 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 σ , теплопровідність κ , фактор потужності PF , добротність ZT), яка інтегрує три паралельні вхідні гілки: мікроструктурні зображення, структуровані числові дані про хімічний склад, 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 зворотнього проєктування для екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Bi-Te , 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 шляхом заміни систематичного перебору складів цілеспрямованим пошуком в просторі латентних представлень мультимодальної моделі.
5. Вперше створено комплексну комп'ютерну програму, що поєднує інструменти для автоматизованого збору даних із літератури –ThermoelectricityBERT, комп'ютерного моделювання екструзії, мультимодального аналізу мікроструктури, прогнозування термоелектричних властивостей та зворотнього проєктування матеріалів. Це забезпечує автоматизацію повного циклу дослідження екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Bi-Te .

Те від аналізу літератури до оптимізації складу та технологічних режимів за заданих граничних умов.

Теоретичне значення одержаних результатів. Встановлено кількісні закономірності впливу технологічних режимів гарячої екструзії на термомеханічний стан матеріалу на основі Ві–Те. Підтверджено синергетичний ефект мультимодального підходу до прогнозування термоелектричних властивостей. Встановлено, за допомогою аналізу інтерпретованості (Grad-CAM), що теплопровідність κ визначається переважно мікроструктурними дефектами, тоді як коефіцієнт Зеебека S – хімічним складом та електронною структурою, що узгоджується з фізичними механізмами формування цих властивостей.

Практичне значення одержаних результатів. Розроблено цілісну інтелектуальну систему для комплексного розв'язання оберненої багатофакторної задачі із оптимізації термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те при заданих граничних умовах, що не має аналогів як на вітчизняному, так і на міжнародному рівні. Програма забезпечує автоматизований збір даних із наукової літератури, автоматичну сегментацію мікроструктури, прогнозування термоелектричних властивостей, зворотне проєктування оптимального хімічного складу та параметрів синтезу за заданими цільовими властивостями з оцінкою невизначеності прогнозу. Результати роботи застосовуються при виконанні науково-дослідної роботи в Інституті 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).

Особистий внесок здобувача. Дисертаційна робота є самостійно виконаним науковим дослідженням. Наукові результати, висновки та практичні розробки належать особисто автору. З наукових праць, опублікованих у співавторстві, в дисертації використано лише ті положення та ідеї, які є результатом власних

досліджень здобувача.

Здобувачем особисто: побудовано фізичну та комп'ютерну модель процесу гарячої екструзії у COMSOL Multiphysics та проведено параметричний розрахунок, розроблено архітектуру та програмну реалізацію системи автоматизованого збору термоелектричних параметрів із наукової літератури на основі MatSciBERT, сформовано анотований набір даних із 6000 фрагментів та виконано додаткове навчання мовних моделей, розроблено модель семантичної сегментації мікроструктури та мультимодальну модель прогнозування термоелектричних властивостей, реалізовано алгоритм зворотного проєктування матеріалів та інтегровано всі компоненти у єдину комп'ютерну програму. Спільно із співавторами публікацій проводились вимірювання термоелектричних характеристик зразків, отримання мікроструктурних зображень методами атомно-силової та металографічної мікроскопії та синтез експериментальних зразків методом гарячої екструзії. Співавторами публікацій надано консультації щодо фізичної інтерпретації отриманих результатів.

Апробація результатів дисертації. Результати дисертаційного дослідження апробовано на семінарах кафедри термоелектрики та медичної фізики Навчально-наукового інституту фізико-технічних та комп'ютерних наук Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича та представлено на міжнародних наукових конференціях:

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

Публікації. За результатами виконаного дослідження опубліковано 12

наукових праць, зокрема, 8 статей у періодичних наукових виданнях, проіндексованих у наукометричній базі даних Scopus, 4 тези доповідей у збірниках матеріалів конференцій, 1 патент на корисну модель.

Структура дисертації відповідає поставленій меті та завданням. Робота складається зі вступу, чотирьох розділів, поділених на підрозділи, а також висновків, списку використаних джерел та додатків. Загальний обсяг дисертації становить 185 сторінок (з них **135** сторінок основного тексту). Список використаних джерел містить 174 найменувань.

РОЗДІЛ 1. ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ ТА АНАЛІЗ ПРЕДМЕТНОЇ ОБЛАСТІ

1.1. Термоелектричні матеріали синтезовані гарячою екструзією

Ефект Зеєбека, встановлений у 1821 році, полягає у генерації електрорушійної сили в системі двох різнорідних провідників за наявності температурного градієнта [1], а відкритий у 1834 році ефект Пельтьє – у тепловиділенні або теплопоглинанні на контакті провідників під дією електричного струму. Ці явища становлять фізичну основу прямого перетворення теплової енергії в електричну та реалізації твердотільних охолоджувальних систем без механічних рухомих елементів [2]. Ефективність такого перетворення визначається безрозмірним коефіцієнтом добротності ZT , підвищення якого вимагає одночасного збільшення коефіцієнта потужності та зменшення повної теплопровідності [3]. Ця задача ускладнюється взаємозалежністю параметрів переносу: електропровідність та електронна теплопровідність пов'язані законом Відемана–Франца, а коефіцієнт Зеєбека зменшується зі зростанням концентрації носіїв заряду, що зумовлює дослідження інженерії зонної структури, наноструктурування та фононного розсіювання [4].

Телурид вісмуту (Bi–Te) є базовим матеріалом для низькотемпературних термоелектричних застосувань. Його шарувата будова зумовлює анізотропію електропровідності та теплопровідності залежно від орієнтації зерен і текстури [5]. Покращення характеристик матеріалів *n*-типу є особливо складним через особливості електронної структури та високу чутливість до складу й умов обробки [6]. Матеріали *p*- та *n*-типу на основі Bi–Te синтезуються шляхом легування Sb або Se для регулювання концентрації носіїв заряду, при цьому екструдовані зразки можуть демонструвати дещо гірші властивості порівняно з монокристалічними

внаслідок структурної неупорядкованості в кристалографічно анізотропних площинах [7]. Тип і концентрація носіїв заряду суттєво визначаються власними точковими дефектами, природа яких залежить від умов синтезу [8].

Значного прогресу у підвищенні ZT досягнуто завдяки наноструктуруванню, що забезпечує ефективне зменшення ґраткової теплопровідності внаслідок розсіювання фононів на межах зерен і дефектах [9]. Для матеріалів р-типу багатоступеневі технологічні процеси дозволили досягти $ZT = 1,50$ за температури 348 К [10]. Водночас інтенсивна пластична деформація сплавів n-типу сприяє формуванню текстури та підвищенню електропровідності й коефіцієнта Зеебека в певних напрямках [11], проте деформаційні дефекти створюють донорні центри, що ускладнює контроль концентрації електронів та досягнення стабільно високих значень ZT [12].

У системах на основі Bi–Sb–Te термоелектричні властивості є чутливими до температури гарячого пресування та розміру частинок вихідного порошку [13]. Гаряча екструзія використовується як інструмент керування мікроструктурою матеріалів на основі Bi–Te: FEM-аналіз та експерименти показали вплив тертя, коефіцієнта екструзії та кута матриці на напружений стан, ступінь деформації та формування (001)-текстури з підвищенням коефіцієнта потужності [14]. Безпосередньо після екструзії формується рекристалізована мікроструктура з дрібними екваксними зернами та великокутовими межами, при цьому подальший відпал не призводить до суттєвих змін дефектної підсистеми та термоелектричних характеристик [15].

Альтернативні підходи до оптимізації текстури та властивостей включають плазмове спікання (SPS) наноструктур із керованою морфологією, що дозволяє досягти $ZT \approx 0,69$ при 333 К [16], а також комбінований синтез екструзії та SPS (Spark Plasma Sintering) для отримання як $\langle 110 \rangle$, так і $\langle 001 \rangle$ текстурованих гілок із одного зразка [17]. Поєднання спінінгування розплаву та SPS забезпечує

збільшення електропровідності та зменшення ґраткової теплопровідності зі зростанням швидкості ролика [18]. З фізичного погляду ґраткова теплопровідність описується через частотно-залежні часи релаксації у моделі Каллавея з урахуванням розсіювання на точкових дефектах, трифононних процесів та розсіювання на межах зерен [19]. Ефективне зниження ґраткової теплопровідності досягається введенням наноструктур при збереженні електричних характеристик [20], а одночасна оптимізація електронного та теплового переносу розглядається як шлях до наближення теплопровідності до «мінімальної межі» [21].

У рамках матеріально-геномного підходу прискорення пошуку високоефективних термоелектричних матеріалів забезпечується комбінацією високопродуктивних розрахунків, баз даних та методів машинного навчання, при цьому матеріали на основі Ві–Те відзначаються як найбільш комерційно привабливі [22]. Машинне навчання може бути безпосередньо застосоване для керування процесами синтезу через побудову моделей та адаптивні схеми із контурами зворотного зв'язку, що дозволяє зменшити кількість ітерацій у багатопараметричних системах [23].

1.2. Штучний інтелект та машинне навчання у термоелектричному матеріалознавстві

Штучний інтелект (ШІ) – це обчислювальні системи, що імітують роботу людського мозку, а саме: навчання, розв'язання поставлених задач, розпізнавання образів та процеси міркування [24]. Машинне навчання є підвидом ШІ, де основна увага приділяється алгоритмам, які досягають максимальної ефективності шляхом узагальнення інформації із масивів даних [25]. Ця галузь виникла на перетині інформатики, статистики та прикладної математики. Концепцію машинного інтелекту першим запропонував Алан Тюрінг у 1950 році, а термін «машинне

навчання» ввів Артур Семюел у 1959 році під час розробки для IBM гри в шашки [26]. Запуск Ініціативи «Геном матеріалів» у 2011 році суттєво сприяв зростанню інтересу до застосування методів машинного навчання у матеріалознавстві [27]. У результаті було створено великомасштабні відкриті бази даних, що містять розраховані фундаментальні властивості матеріалів і слугують основою для алгоритмів МН; зокрема, це Materials Project, AFLOW (Automatic Flow for Materials Discovery) та Open Quantum Materials Database (OQMD). Наразі ці бази даних акумулюють понад сотні тисяч записів про матеріали та їхні властивості, отриманих переважно шляхом комп'ютерного моделювання в межах теорії функціонала густини (ТФГ). Для порівняння: Materials Project містить ≈ 200 тис. матеріалів, AFLOW – мільйони сполук і сотні мільйонів розрахованих властивостей, а OQMD – понад мільйон матеріалів. Цікавим є факт, що записи в різних базах даних можуть не збігатися для чутливих властивостей (наприклад, забороненої зони чи магнетизму), тому питання відтворюваності є критичним [28]. У термоелектричному матеріалознавстві також розвиваються підходи до збирання та структурування експериментальних даних, що робить можливим застосування інформатики та машинного навчання (зокрема у вигляді рекомендаційних систем) для пошуку нових термоелектричних сполук. У роботі [29] було розглянуто існуючі досягнення термоелектричного матеріалознавства та підкреслюється, що впровадження методів машинного ускладнене низкою чинників: упередженістю літературних даних, температурною залежністю властивостей, впливом легування та дефектної підсистеми, а також дефіцитом якісних структурованих експериментальних наборів даних.

Традиційно у розвитку науки виокремлюють три основні парадигми наукового пізнання: емпіричне спостереження, теоретичний опис та обчислювальне моделювання. Водночас у сучасній літературі обґрунтовується виокремлення четвертої парадигми – наукового відкриття, керованого даними, яке ґрунтується на

аналізі великих обсягів даних і доповнює фізично обґрунтовані моделі, а не замінює їх [30]. У межах цієї парадигми методи машинного навчання відіграють ключову роль як інструменти побудови прогнозних моделей і виявлення складних багатовимірних залежностей у даних. Інтенсивна обробка даних, що дає змогу виявляти узагальнені закономірності та приховані залежності, є особливо цінною для термоелектричного матеріалознавства з огляду на складну, багатофакторну природу термоелектричних властивостей, які не піддаються простому аналітичному опису або класичним методам оптимізації [31].

Алгоритми машинного навчання загальноприйнято поділяти на три основні категорії: навчання з учителем, навчання без учителя та навчання з підкріпленням [32]. Така класифікація є усталеною в сучасній літературі з МН і широко використовується в матеріалознавчих застосуваннях.

Навчання з учителем ґрунтується на використанні наборів даних із відомими цільовими значеннями (мітками) та є найбільш поширеним підходом у задачах прогнозування властивостей матеріалів. У термоелектричному матеріалознавстві цей підхід застосовується у випадках, коли вхідні ознаки (дескриптори), наприклад, хімічний склад, кристалографічні та структурні характеристики, параметри обробки – демонструють статистично значущу кореляцію з термоелектричними властивостями, такими як коефіцієнт добротності ZT , теплопровідність та коефіцієнт Зеєбека [33].

У межах навчання з учителем зазвичай розрізняють дві основні постановки задач: регресію, спрямовану на прогнозування числових значень фізичних властивостей, та класифікацію, що полягає у віднесенні матеріалів до визначених класів або категорій. Як показано у роботі Вагва та ін. [33], регресійні моделі, побудовані на експериментальних термоелектричних базах даних, здатні забезпечувати високу прогностичну точність, зокрема досягати значень коефіцієнта детермінації R^2 у діапазоні приблизно 0,67–0,80 залежно від вибору

моделі та тестового набору даних. Огляд сучасних підходів також підкреслює, що ансамблеві методи та ретельний відбір дескрипторів відіграють ключову роль у підвищенні якості таких прогнозів [34].

1.2.1. Кероване машинне навчання

Серед лінійних методів керованого навчання для прогнозування термоелектричних властивостей застосовують множинну лінійну регресію та її модифікації із регуляризацією [35] – Ridge (L2 – Ridge Regularization) [36], LASSO (L1 – Least Absolute Shrinkage and Selection Operator) [37] та Elastic Net [38], які дозволяють зменшити перенавчання та здійснити відбір найбільш інформативних ознак. Застосування цих підходів для прогнозування коефіцієнта Зеебека продемонстровано у роботі Furmanchuk та ін. [39], де регресійні моделі на основі регуляризації забезпечують коефіцієнт детермінації R^2 близько 0,7–0,8 залежно від набору даних і умов навчання.

Мащини опорних векторів (SVM – Support Vector Machine / SVR – Support Vector Regression) використовують ядрові функції для неявного відображення даних у високовимірний простір ознак, де нелінійні залежності можна розв'язувати лінійними методами [40]. У матеріалознавстві SVM-підходи поєднуються з інтерпретованим конструюванням ознак: зокрема, Ма та ін. [41] продемонстрували високопродуктивний пошук оксидів із покращеними термоелектричними характеристиками на основі символічної регресії та аналізу бази Materials Project. Важливим обмеженням методів SVM/SVR залишається їхня обчислювальна складність, що ускладнює масштабування на великі масиви даних і обмежує практичне застосування таких моделей у задачах із великим обсягом вхідної інформації.

Ансамблеві методи на основі дерев рішень [42] є найбільш поширеними

інструментами прогнозування властивостей термоелектричних матеріалів. Випадковий ліс (Random Forest) формує ансамбль дерев на бутстреп-вибірках із випадковим піднабором ознак, що забезпечує стійкість до зашумлених даних [43–44]. Градієнтний бустинг, зокрема реалізація XGBoost (eXtreme Gradient Boosting), послідовно додає слабкі моделі, кожна з яких компенсує похибки попередніх [45–46]. Для інтерпретації прогнозів ансамблевих моделей застосовують підхід SHAP (Sharpley Additive Explanations) на основі значень Шеплі з теорії кооперативних ігор, що дозволяє кількісно оцінити внесок кожної ознаки у кінцевий прогноз [47–48].

1.2.2. Некероване машинне навчання

На відміну від керованого навчання, некеровані методи не потребують наперед заданих цільових значень, а спрямовані на виявлення внутрішньої структури даних. Хоча значна частина сучасних робіт у термоелектричному матеріалознавстві фокусується на керованому навчанні, некеровані підходи відіграють важливу роль в аналізі та структуруванні знань про синтез і обробку матеріалів [49].

Для зниження розмірності багатовимірних просторів ознак застосовують метод головних компонент (PCA – Principal Component Analysis), який проєктує дані на напрямки з максимальною дисперсією [50], а також нелінійний метод t-SNE (t-distributed Stochastic Neighbor Embedding) для візуалізації кластерної структури даних [55]. Ці підходи використовуються поряд із моделями МН для високопродуктивних обчислень та прогнозування властивостей матеріалів [51].

У термоелектричному матеріалознавстві некеровані методи слугують інструментами первинного структурування матеріальних просторів. Зокрема, у базі даних Wenzhou застосовано кластеризацію k -середніх [52-53] для групування матеріалів за базовими характеристиками з подальшим високопродуктивним

відбором перспективних матеріалів. Для виявлення кластерів довільної форми та відокремлення шуму застосовують також алгоритм DBSCAN (Density-Based Spatial clustering of Applications with Noise) [54].

1.2.3. Машинне навчання із підкріпленням

Навчання з підкріпленням використовує комп'ютерних агентів, які навчаються знаходити оптимальну стратегію прийняття рішень через взаємодію із середовищем та отримання винагороди або «штрафу», залежно від результату виконаних дій [56]. У термоелектриці такі підходи є перспективними для задач послідовної оптимізації, зокрема керування режимами роботи термоелектричних генераторів у змінних умовах. Наприклад, продемонстровано застосування методів глибокого навчання з підкріпленням для динамічного енергоменеджменту термоелектричних генераторів з адаптацією до змін середовища [57]. Окрім задач керування системами, останні роботи також показують потенціал МН з підкріпленням для зворотного проєктування матеріалів, коли модель оптимізує генерацію структур за сигналом винагороди від дескрипторів властивостей. Зокрема, запропоновано підхід для донавчання генеративної моделі кристалів за винагороду від моделей властивостей; при цьому автори прямо вказують, що схема придатна і для цільових метрик, на кшталт термоелектричного коефіцієнта добротності та теплопровідності [58].

1.2.4. Нейронні мережі

Штучні нейронні мережі є обчислювальними моделями із взаємопов'язаних шарів нейронів, що здійснюють нелінійні перетворення вхідних ознак [59]. Згідно з теоремою універсальної апроксимації, мережі з достатньою кількістю нейронів

здатні апроксимувати довільну неперервну функцію з наперед заданою точністю [60], що обґрунтовує їхній потенціал для моделювання складних залежностей між дескрипторами та властивостями матеріалів.

Для ефективного навчання за умов обмежених даних застосовують перенесення навчання (transfer learning), що дозволяє використати існуючу знання моделі з початкового завдання і перенести їх на цільову задачу [61–62], та аугментацію – штучне розширення навчальної вибірки синтетичними перетвореннями [63]. Поєднання цих методів дозволяє використовувати глибокі нейронні мережі для дослідження простору хімічних сполук навіть за дефіциту даних [64], хоча суттєвим обмеженням залишається низька інтерпретованість, що стимулює розвиток методів аналізу МН [65].

Графові нейронні мережі представляють матеріали у вигляді графів (атоми – вузли, міжатомні взаємодії – ребра), що дозволяє навчати моделі безпосередньо на кристалічній структурі без ручного конструювання дескрипторів [66–67]. Архітектури CGCNN (Crystal Graph Convolutional Neural Network) та MEGNet (Materials Graph Network) широко застосовуються для прогнозування властивостей матеріалів і демонструють конкурентну здатність до узагальнення на нові сполуки порівняно з підходами на основі наперед заданих ознак [66–68]. Відкриті бази даних термоелектричних матеріалів створюють передумови для застосування графових моделей у задачах цілеспрямованого пошуку сполук із заданими характеристиками [69].

Ефективність моделей МН у термоелектриці визначається якістю вхідних даних. В роботі продемонстровано можливість прямого прогнозування ZT на основі великих масивів експериментальних даних, хоча розбіжності між передбаченими та виміряними значеннями пов'язані з упередженістю літературних джерел, відмінностями синтезу та мікроструктурними чинниками [33]. Для забезпечення відтворюваності критично важливою є стандартизація протоколів розрахунків у

базах AFLOW та Materials Project [70]. Літературно-агреговані набори, зокрема база з понад 18 000 точок вимірювань із понад 100 публікацій, доповнюють обчислювальні ресурси [71]. Точність прогнозування істотно залежить від представлення матеріалу: загальноприйнятим є підхід «атрибути $\rightarrow$ властивість» із можливістю розбиття на групи подібних матеріалів [72], при цьому графові підходи можуть перевершувати «ручні» набори ознак за якістю [73].

1.2.5. Прогнозування властивостей термоелектричних матеріалів

Методи машинного навчання широко застосовують для швидкого прогнозування окремих термоелектричних коефіцієнтів і подальшого аналізу сполук. Зокрема, Yuan та ін. [74] запропонували модель на основі нейронної мережі для оперативної оцінки коефіцієнта Зеєбека в Хойслерівських сполуках за довільної концентрації носіїв зарядів, використовуючи як вхідні ознаки лише кілька елементарних властивостей складових атомів. У роботі також побудовано фізично інтерпретований тривимірний дескриптор методом SISSO (Sure Independence Screening and Sparsifying Operator) для створення простих аналітичних моделей типу «властивість = $F(\text{дескриптор})$ » із дуже великого простору ознак, що демонструє конкурентну прогностичну здатність. Важливим підґрунтям для побудови таких моделей є високопродуктивні обчислювальні набори даних. База даних Ricci та ін. [75] містить розраховані електронні транспортні властивості приблизно для 48 000 сполук, отримані на основі структур Materials Project із застосуванням програмного пакету BoltzTraP [76] у наближенні сталої часу релаксації. Параметризація за температурою та положенням рівня Фермі робить ці дані придатними для подальшого аналізу в межах комп'ютерних підходів у термоелектриці [75]. У більш загальному контексті застосування регресійних моделей МН для задач кореляції «матеріал-дизайн» розглядається як

перспективний шлях прискореного пошуку сполук із заданими характеристиками [77].

Для матеріалів на основі Bi–Te особливо актуальними є моделі, що одночасно враховують склад, режими обробки та параметри мікроструктури. Wang та ін. застосували методи МН до матеріалів $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Te}_{2.85+y}\text{Se}_{0.15}$, отриманих методом гарячої екструзії. Автори встановивши зв'язки між технологічними параметрами, мікроструктурою та властивостями, реалізувавши зворотний аналіз («властивості $\rightarrow$ мікроструктура $\rightarrow$ обробка») за допомогою генетичного алгоритму. За результатами оптимізації прогнозовано потенційне досяжне значення $ZT = 1,15$ (що у 1,32 раза перевищує найкращий експериментальний результат – 0,87). Також вказано необхідність підвищення температури екструзії, збільшення вмісту Cu та формування мікроструктури з більшим середнім розміром зерна і вищою густиною [78]. Окремі експериментальні дослідження легування Cu в нанокompозитах *n*-типу $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ підтвердили суттєву роль складу та текстурування. Введення оптимальної концентрації Cu ($x = 0,01$) забезпечує відтворюваність і дає максимальне значення $ZT = 0,99$ без текстурування, тоді як повторне пресування для формування текстури підвищує показник ZT до 1,06 [79]. Це підтверджує доцільність включення вхідних ознак, пов'язаних зі складом і параметрами обробки, у спеціалізовані моделі для систем Bi–Te–Se.

Швидкісний комп'ютерний пошук у термоелектриці поєднує високопродуктивні розрахунки з моделями машинного навчання, що дає змогу швидко виділяти ключові матеріали-кандидати та прискорювати перехід до експериментальної перевірки. Огляд сучасних підходів підкреслює, що МН використовується як інструмент для скринінгу, ранжування та спрямування подальших обчислювальних і експериментальних кроків у задачах пошуку термоелектричних матеріалів [34].

База даних JARVIS-DFT зробила можливим систематичний пошук

тривимірних та двовимірних термоелектричних матеріалів. Choudhary і Garrity виконали багатоетапну фільтрацію за пороговими значеннями ширини забороненої зони, коефіцієнта Зеєбека та фактора потужності серед приблизно 36000 (3D) і 900 (2D) матеріалів та отримали 2932 (3D) і 148 (2D) перспективних матеріалів відповідно. Варто відзначити, що матеріали на основі Bi-Te, мають значний потенціал до високої точності прогнозування їх властивостей саме методами машинного навчання [80].

1.3. Аналіз мікроструктури термоелектричних матеріалів методами комп'ютерного зору

Згорткові нейронні мережі (CNN) широко застосовуються для аналізу мікроструктур матеріалів – виявлення меж зерен, дефектів та фазових неоднорідностей на зображеннях електронної мікроскопії [81]. Серед ключових архітектур для задач сегментації та кількісного аналізу мікроструктур використовують VGG (Visual Geometry Group), ResNet та U-Net (енкодер-декодер архітектура для попиксельної сегментації) [82]. Точність автоматичної сегментації складних мікроструктурних зображень може досягати рівня, порівнюваного з експертною ручною анотацією (~90%), як показано на прикладі багатофазних сталей [84], у тому числі для тривимірної сегментації електронно-мікроскопічних даних багатофазних керамічних матеріалів [83]. Застосування перенесення навчання дозволяє ефективно виконувати сегментацію навіть за обмеженої кількості анотованих зразків [85].

Дані електронно-мікроскопічних методів, зокрема EBSD, дають змогу безпосередньо пов'язувати мікроструктуру з кристалографічною текстурою. Типова EBSD-карта є піксельною сіткою, у кожному пікселі якої зберігаються кристалографічна орієнтація, фазова ідентифікація та метрики якості індексації. На

основі поля орієнтацій обчислюють карти розорієнтації, виділяють межі зерен та будують полюсні фігури для кількісної оцінки текстури [86]. Для визначення середнього розміру зерна застосовують стандартизовані процедури за стандартом ASTM E112, що включає порівняльний, планіметричний та інтерсепт-методи [87].

Семантична сегментація є ключовим етапом автоматизованого аналізу мікроструктури. Класичні підходи – метод вододілу [88] та порогування Оцу [89] – добре працюють для мікроструктур із чіткими фазами, проте втрачають ефективність у випадках складної морфології та неоднорідного контрасту, що мотивує застосування моделей глибокого навчання [90]. Перехід до 3D-сегментації дозволяє реконструювати тривимірну мікроструктуру з оцінюванням просторового розподілу пористості та вторинних фаз [83], оскільки 3D-метрики зв'язаності структурних елементів є інформативними для аналізу залежності «структура–властивості» [91].

Визначення розміру зерен є базовою задачею кількісного опису мікроструктури, оскільки ці параметри прямо пов'язані з експлуатаційними характеристиками матеріалів [92]. Для автоматизованого аналізу запропоновано підхід на основі попередньо навченої моделі ієрархічного визначення контурів із подальшими морфологічними операціями, що не потребує навчання на спеціально розмічених мікроструктурних даних [93].

Генеративні змагальні мережі (GAN) [94] мають потенціал для автоматизованого визначення розміру зерен із SEM-BSE зображень, формулюючи задачу як перенесення відображення BSE-зображення в карту меж зерен. Точність оцінювання середнього розміру зерен становить $\approx 92\%$, а подібність розподілу розмірів $\approx 80\%$ відносно EBSD (Electron Backscatter Diffraction) [95]. Моделі глибокого навчання також дозволяють будувати наскрізне відображення «зображення $\rightarrow$ властивість» на основі перенесення навчання, використовуючи попередньо навчену мережу як екстрактор ієрархічних ознак мікроструктури [96].

Наскрізний підхід без ручного конструювання дескрипторів застосовується і в інших інженерних задачах, зокрема у фізично інформованій діагностиці дефектів [97]. Лі та ін. запропонували узагальнювальний підхід перенесення навчання для аналізу мікроструктур із формалізованим правилом вибору кількості перенесених шарів, що зменшує суб'єктивність і підвищує стабільність навчання [96].

1.4. Перспективи штучного інтелекту та машинного навчання у термоелектриці та нові підходи

Попри суттєвий прогрес, пошук нових високоефективних термоелектричних матеріалів традиційними шляхами залишається обмеженим через високу вартість і тривалість методу «проб і помилок». У відповідь на це розвиваються високопродуктивні стратегії: пропонуються електричні та теплові дескриптори, створюються методи нових комп'ютерних розрахунків для швидкого скринінгу матеріалів у базах даних, а також експериментальні методики, що підвищують щільність отриманої інформації за менших часових і ресурсних витрат; паралельно активно інтегруються підходи машинного навчання. Водночас у таких стратегіях окремо підкреслюються наявні виклики та напрями подальших досліджень [98].

З позиції загальних підходів наукового МН ключовим обмеженням є дефіцит даних у багатьох наукових задачах: навчання глибоких нейронних мереж потребує великих обсягів даних, які не завжди доступні. Як шлях подолання цього обмеження розглядаються підходи, які базуються на фізичних законах і поєднують дані з математичними моделями шляхом накладання фізичних законів (інваріантів), що потенційно забезпечує кращу точність, швидше навчання та краще узагальнення. Окремо наголошується на потребі нових фреймворків і стандартизованих шкал оцінки точності та ефективності для таких методів [99].

Навіть коли основою відкриття матеріалів виступають експерименти та

розрахунки, ці підходи часто є дорогими та часовитратними. Один із практичних напрямів прискорення полягає в поєднанні високоефективних комп'ютерних розрахунків із МН-моделями, навченими на отриманих базах даних, для виявлення перспективних матеріалів [100]. На більш загальному рівні зберігається фундаментальний виклик моделювання речовини в широкому діапазоні довжин і часу на тлі швидкого розвитку обчислень, ШІ та робототехніки. Це підкреслює необхідність переосмислення й розширення наявних підходів атомістичного та континуального моделювання [101]. Прикладом інструментарію, орієнтованого на роботу в режимі обмежених даних, є фізико-інформовані нейронні мережі, що поєднують математичні моделі (зокрема PDE) з даними. Вони містять механізми регуляризації навчання для умов із дефіцитом інформації, що дає змогу виконувати наукове прогнозування й відкриття навіть за неповних моделей та даних [102]. У 2023–2025 рр. зросла роль статистичних підходів на основі даних у термоелектриці, зокрема для скорочення частки проб та помилок під час підбору параметрів синтезу та оптимізації характеристик. Огляд Chen та ін. систематизує підходи МН для оптимізації синтезу термоелектричних матеріалів і прогнозування їхньої ефективності, підкреслюючи актуальність інтеграції експериментального синтезу з алгоритмічним пошуком оптимальних режимів [103]. Паралельно статистичні методи оптимізації (Taguchi, ANOVA, RSM) узагальнені як інструменти оптимізації термоелектричних генераторів і відповідних параметрів системи (умови роботи, геометрія та пов'язані фактори) [104]. Для матеріалів на основі Bi-Te окремо підкреслено, що покращення термоелектричних властивостей n -типу залишається складнішим, ніж для p -типу. В огляді Dharmiah та ін. це пов'язано з труднощами незалежного контролю дефектної структури (концентрації електронів), текстурованої мікроструктури та наслідками сильної анізотропії транспортних властивостей [6]. На прикладі $\text{Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_3$ показано, що формування сильної текстури в наноструктурованому об'ємному матеріалі може

супроводжуватися одночасно високими термоелектричними та механічними характеристиками, що підтверджує важливість керування текстурою й мікроструктурою під час обробки [105].

1.4.1. Фізично інформоване машинне навчання

Нейронні мережі з фізичними обмеженнями (PINN) враховують фізичні рівняння безпосередньо в процесі навчання, мінімізуючи у функції втрат нев'язки рівнянь та граничних умов. У роботі для задач теплопереносу застосовано моделі PINN, що дозволило ефективно розв'язати мод-розділене фононне рівняння переносу Больцмана з урахуванням дисперсії та поляризації фононів. Продemonстровано ефективність підходу в просторових розмірностях від 1D до 3D, причому навчання нейромережі можливе без використання розмічених даних [106]. Фізично інформоване машинне навчання не обмежується PINN: у задачах гідродинаміки запропоновано підхід на основі даних із фізичною мотивацією для реконструкції похибок у моделях напружень Рейнольдса (RANS) на основі DNS-даних (Direct Numerical Simulation). Це демонструє можливість використання фізично узгоджених ML-схем для покращення прогнозування у нових постановках задачі [99].

1.4.2. Активне навчання та автономні експерименти

Оскільки отримання високоякісних даних з мітками часто є дорогим, перспективним доповненням до підходів на основі даних є активне навчання, у якому алгоритм цілеспрямовано обирає найбільш інформативні зразки для подальшого маркування чи обчислення, зменшуючи обсяг даних, потрібний для досягнення заданої якості моделі [103, 107].

У роботі Нон та ін. [108] реалізовано підхід на основі активного навчання із застосуванням баєсової оптимізації для пошуку оптимального складу композиту $\text{Al}_{23.5+x}\text{Fe}_{36.5}\text{Si}_{40-x}$. Модель МН на основі початкових вимірювань прогнозувала фактор потужності за критерієм «експлуатація–дослідження» (exploration–exploitation), який забезпечує баланс між перевіркою областей з високою невизначеністю та просуванням до найкращих прогнозованих результатів [109]. Це дозволило швидко звужити пошук до оптимальної області ($x \approx 0,9$) із підвищенням коефіцієнта потужності приблизно на 40 % біля 510 К. Аналогічна логіка активного навчання реалізована для оптимізації технологічних параметрів LPBF-виготовлення (лазерне порошкове плавлення в шарі порошку) термоелектричного матеріалу n-типу $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ [110], де ітеративне оновлення моделі взаємодій «лазер–матеріал» дозволило систематично визначити режими, що забезпечують високу щільність деталей і відсутність тріщин, скорочуючи сукупні експериментальні витрати.

1.4.3. Генеративні моделі та зворотне проєктування

Окрім «прямого» скринінгу на основі баз даних, у матеріалознавстві активно розвиваються підходи зворотного проєктування (інверсний дизайн), де моделі МН (зокрема генеративні) використовують для пропозиції нових матеріалів під задані цільові вимоги [111]. У ширшому контексті зворотного проєктування підкреслюється важливість поєднання прогнозів із перевіркою та ітеративним удосконаленням моделей, що формує цикл «прогноз → перевірка → покращення прогнозу» для підвищення достовірності та керованості пошуку матеріалів із цільовими властивостями [112]. Суттєвим напрямом розвитку є моделі, що напряду пов'язують параметри обробки з мікроструктурою. У дисертаційній роботі Tang продемонстровано підхід на основі глибокого навчання та CGAN/RCWGAN

(умовні генеративні моделі типу GAN, які за заданими параметрами процесу навчаються генерувати відповідну мікроструктуру). Цей підхід навчається відображенню взаємозалежності між параметрами процесу та мікроструктурою і виконує прогноз без ручного виділення низьковимірних ознак; результати було перевірено за допомогою SEM-даних [113]. Інверсне проєктування та МН-орієнтований відбір легувальних домішок може бути також застосовано для цілеспрямованого пошуку шляхів підвищення термоелектричної ефективності, зокрема через оцінювання ролі домішки та оптимізацію параметрів, пов'язаних із дефектами й легуванням [114].

Висновки до розділу 1

На основі проведеного аналізу літературних джерел щодо застосування методів штучного інтелекту, машинного навчання та комп'ютерного зору в автоматизації досліджень термоелектричних матеріалів на основі Ві–Те можна сформулювати такі основні висновки:

1. Термоелектричні матеріали на основі Ві–Те залишаються базовими для низькотемпературних застосувань у діапазоні 300–400 К. Оптимізація коефіцієнта добротності ZT ускладнена анізотропією властивостей та взаємозалежністю параметрів переносу, а критичним питанням залишається підвищення ZT для матеріалів n -типу. Гаряча екструзія є перспективним промислово масштабованим методом синтезу, що забезпечує формування мікроструктури з дрібними зернами та переважною (001)-орієнтацією, причому зі зростанням коефіцієнта екструзії підвищується фактор орієнтації Лотгерінга та коефіцієнт потужності.
2. Ансамблеві методи МН (Random Forest, XGBoost) демонструють високу прогностичну здатність щодо термоелектричних параметрів із $R^2 = 0,67\text{--}0,90$,

а підхід SHAP забезпечує інтерпретованість результатів. Графові нейронні мережі (CGCNN, MEGNet) дозволяють прогнозувати властивості безпосередньо на основі кристалічної структури без попереднього конструювання дескрипторів, забезпечуючи вищу здатність до узагальнення на нові хімічні склади.

3. Методи комп'ютерного зору на основі глибокого навчання (U-Net, ResNet) забезпечують автоматизований кількісний аналіз мікроструктури з точністю сегментації $\sim 90\%$, а генеративні змагальні мережі (GAN) демонструють точність оцінювання середнього розміру зерен $\approx 92\%$ відносно EBSD-аналізу.
4. Для екструдованих матеріалів Bi–Te продемонстровано ефективність моделей МН, які комплексно враховують хімічний склад, режими обробки та параметри мікроструктури. Зворотне проєктування на основі генетичного алгоритму дозволяє прогнозувати потенційно досяжне значення $ZT \approx 1,15$, що у 1,32 рази вище експериментального максимуму.
5. Фізично інформоване машинне навчання (PINN) та активне навчання з баєсовою оптимізацією є перспективними напрямками, що дозволяють відповідно інтегрувати фундаментальні фізичні закони переносу в моделі та цілеспрямовано обирати найбільш інформативні зразки, суттєво зменшуючи необхідний обсяг експериментальних даних.
6. Високопродуктивні бази даних (Materials Project, AFLOW, OQMD, JARVIS-DFT) створюють основу для застосування методів МН, хоча їх використання ускладнене упередженістю літературних даних та дефіцитом структурованих експериментальних наборів.

РОЗДІЛ 2. РОЗРОБКА СИСТЕМИ АВТОМАТИЗОВАНОГО ЗБОРУ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ЕКСТРУДОВАНИХ МАТЕРІАЛІВ З НАУКОВОЇ ЛІТЕРАТУРИ НА ОСНОВІ ВЕЛИКИХ МОВНИХ МОДЕЛЕЙ

2.1. Постановка задачі та загальна архітектура системи

Розвиток термоелектричних технологій суттєво залежить від наявності систематизованих даних про властивості матеріалів. На сьогодні обсяг наукових публікацій у галузі термоелектрики перевищує можливості ручного аналізу: щорічно публікуються тисячі статей, що містять експериментальні дані про коефіцієнт Зеєбека, електропровідність, теплопровідність та інші параметри термоелектричних матеріалів (ТЕМ). Традиційний підхід до збору цих даних передбачає залучення експертів-матеріалознавців для обробки наукових публікацій та ручного внесення інформації до баз даних, що є надзвичайно трудомістким, повільним і схильним до помилок процесом. За оцінками, ручне вилучення даних із однієї наукової статті займає в середньому від однієї до трьох годин, що робить масштабне формування баз даних практично нездійсненним завданням без залучення значних людських ресурсів.

Великі мовні моделі (LLM) відкривають принципово нові можливості для автоматизації цього процесу. Ці моделі, натреновані на масивах текстових даних обсягом у трильйони токенів, здатні розуміти контекст наукових публікацій, ідентифікувати ключові сутності (назви матеріалів, числові значення властивостей, одиниці вимірювання) та встановлювати зв'язки між ними [115]. Застосування LLM для вилучення структурованих даних із неструктурованого тексту наукових статей є одним з найбільш перспективних напрямів розвитку науково-інформаційних систем. Особливо важливим є те, що сучасні мовні моделі, попередньо натреновані

на наукових літературних джерелах, демонструють глибоке розуміння термінології та здатність до контекстуальної інтерпретації числових даних, що є критично важливим для коректного вилучення властивостей матеріалів.

Метою цього розділу є детальний опис фізичної та математичної моделей екструзії, створення комп'ютерної моделі для визначення найважливіших технологічних і термоелектричних ознак для подальшого формування бази даних, а також імплементація комплексної системи для автоматизованого збору термоелектричних властивостей матеріалів із наукової літератури. Розроблена система має вирішувати такі ключові завдання: попередня обробка наукових документів різних форматів, зокрема PDF, DOCX та HTML; розпізнавання іменованих сутностей, специфічних для термоелектрики, як-от назви хімічних матеріалів, хімічні формули композитів, числові значення властивостей, одиниці вимірювання, температури; формування структурованої бази даних із посиланнями на першоджерела. Особлива увага приділяється порівняльному аналізу різних архітектур мовних моделей та обґрунтуванню вибору оптимального підходу для цієї предметної області з урахуванням балансу між точністю та обчислювальною ефективністю.

Загальна архітектура розробленої системи складається з п'яти основних модулів, що забезпечують повний цикл обробки даних – від вхідного документа до структурованого запису в базі даних.

Перший модуль відповідає за збір документів та їхню попередню обробку, зокрема перетворення інформації з різноманітних форматів, оптичне розпізнавання символів для сканованих документів та вилучення тексту з таблиць і графіків.

Другий модуль реалізує сегментацію тексту та виділення релевантних фрагментів, що містять інформацію про термоелектричні властивості, з використанням класифікаційної моделі для швидкого скринінгу.

Третій модуль є ядром системи й виконує розпізнавання іменованих сутностей

та виділення зв'язків за допомогою тонко налаштованої мовної моделі.

Четвертий модуль здійснює нормалізацію та валідацію зібраних даних, включаючи перетворення одиниць вимірювання та перевірку фізичної правдоподібності значень.

П'ятий модуль забезпечує інтеграцію з базою даних та генерацію структурованих записів.

Програмне рішення передбачає можливість як повністю автоматичної обробки документів у пакетному режимі, так і інтерактивної роботи з окремими публікаціями через вебінтерфейс. У пакетному режимі система здатна обробляти тисячі документів на добу без втручання оператора, автоматично вирішуючи типові проблеми та позначаючи складні випадки для ручної перевірки. Інтерактивний режим надає дослідникам можливість візуального контролю процесу вилучення з підсвічуванням ідентифікованих сутностей та відношень безпосередньо в тексті оригінального документа, що дозволяє швидко верифікувати й коригувати результати автоматичного аналізу.

2.2. Фізична модель процесу гарячої екструзії термоелектричного матеріалу на основі Bi–Te

В цій роботі використано фізичну модель для процесу гарячої екструзії термоелектричного матеріалу на основі телуриду вісмуту для отримання циліндричного стрижня діаметром 8 мм. Модель призначена для опису взаємопов'язаних процесів в'язкопластичної деформації, контактної взаємодії (ідеальне ковзання) та теплопереносу в системі: заготовка, контейнер та матриця.

Фізичну модель процесу наведено на рис. 2.1. Циліндрична заготовка (2) із матеріалом на основі Bi–Te розміщується в контейнері (1) і деформується пуансоном (3), який прошовує матеріал через матрицю (4) з конічною вхідною

частиною та калібрувальною ділянкою. На виході формується пруток (5) діаметром 8 мм. Температурний режим забезпечується нагрівачами контейнера та матриці (6) і контролюється термопарами (7).

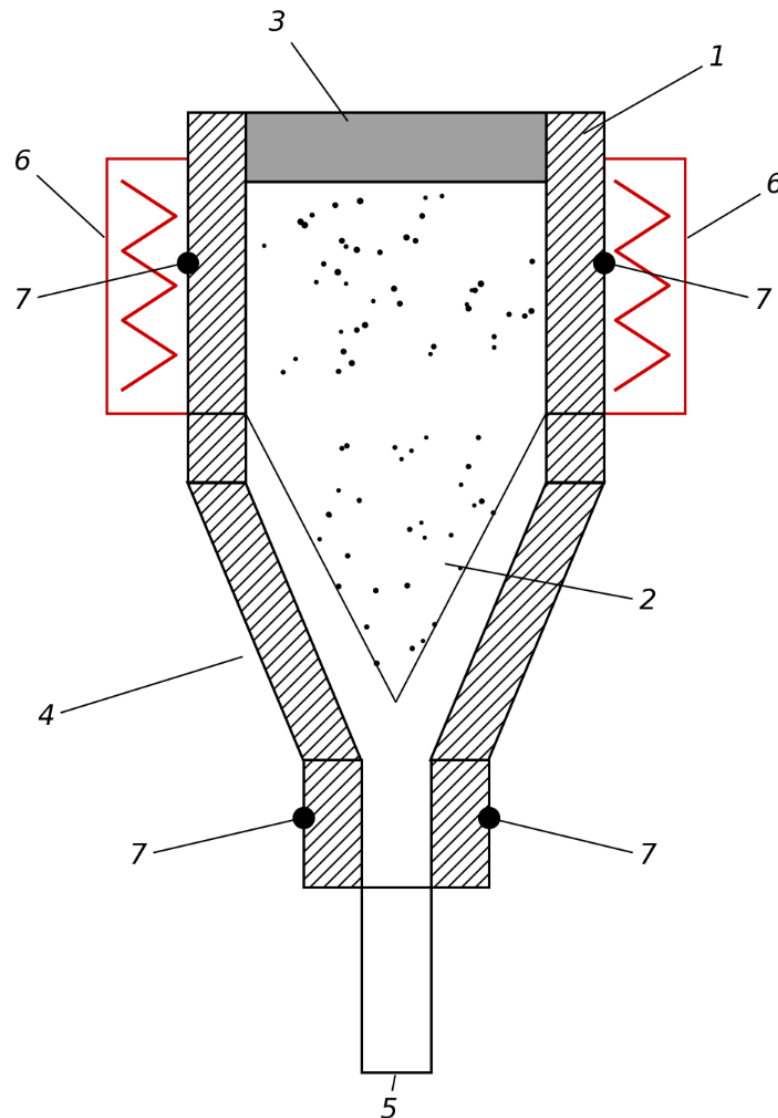


Рис. 2.2.1 – Фізична модель процесу екструзії термоелектричного матеріалу

Ключові фізичні особливості, що визначають постановку задачі моделювання:

- Bi_2Te_3 має переважну площину сколювання (00 l), що зумовлена слабкими

ван-дер-ваальсовими зв'язками між шарами $\text{Te}(1)\text{--Te}(1)$ квінтупельних блоків [116]. Це робить матеріал вразливим до руйнування вздовж базисної площини, особливо за наявності розтягувальних напружень, що обмежує умови експлуатації та довговічність термоелектричних пристроїв [117].

- Температура плавлення становить близько $586\text{ }^{\circ}\text{C}$ [118], нею визначається верхня межа температурного діапазону гарячої екструзії.

- Повзучість при стисканні в діапазоні температур $400\text{--}500\text{ }^{\circ}\text{C}$ підпорядковується степеневому закону ($n = 3\text{--}6$, $Q \approx 145\text{ кДж/моль}$) із температурною залежністю; спостерігається перехід від крихкого руйнування при $400\text{--}450\text{ }^{\circ}\text{C}$ до помітної пластичності при стиску при $500\text{ }^{\circ}\text{C}$ [119].

- Анізотропія властивостей зумовлює істотну відмінність значень теплопровідності (у $2\text{--}2,5$ раза) та електропровідності (у ~ 4 рази) вздовж та перпендикулярно до осі c кристала [120].

На основі аналізу літературних джерел для гарячої екструзії матеріалів на основі Bi--Te , в якості базового режиму прийнято такі параметри:

Таблиця 2.2.1

Параметри базового режиму комп'ютерної моделі

Параметр	Встановлені значення
Температура заготовки	$T_{\text{заг}} = 340\text{--}500\text{ }^{\circ}\text{C}$
Температура матриці	$T_{\text{м}} = 340\text{--}500\text{ }^{\circ}\text{C}$
Коефіцієнт витяжки	$\lambda = 20\text{--}25$
Швидкість пуансона	$v_{\text{п}} = 0,5\text{--}1,5\text{ мм/хв}$

Для вихідного діаметра $d = 8\text{ мм}$ і коефіцієнта витяжки $\lambda = 25$ орієнтовний діаметр заготовки становить $D_0 = 40\text{ мм}$.

Для опису моделі було прийнято такі припущення:

1. Заготовка розглядається як суцільна; пористість не є визначальним чинником у базовій моделі.
2. Після виходу на робочий режим процес моделюється як нестационарний (time-dependent) для врахування еволюції напружено-деформованого стану в часі в координатах, пов'язаних із матрицею.
3. Теплофізичні параметри (теплопровідність k , теплоємність c_p , густина ρ) прийняті сталими. Реологічна поведінка (швидкість повзучості) залежить від температури T за законом Арреніуса.
4. На межі між інструментом та матеріалом прийнято такі граничні умови: кінематична умова ковзання без тертя (Roller), термічна умова – задана температура матриці $T = T_m$, а також враховано дисипативне нагрівання від пластичної деформації.
5. Інтенсивна пластична деформація в конічній частині матриці створює несприятливий напружений стан у приповерхневому шарі, що підвищує ймовірність поверхневого розтріскування.

Керованими параметрами процесу у фізичній моделі є швидкість пуансона, температура заготовки й матриці, а також геометрія матриці (кут конуса, довжина калібрувальної ділянки та вихідний діаметр).

2.3. Математична модель процесу гарячої екструзії термоелектричного матеріалу на основі Ві–Те

На основі описаної фізичної моделі процес екструзії описують системою рівнянь збереження маси, імпульсу та енергії для термов'язкопластичного середовища з контактними граничними умовами. Для умов гарячої екструзії інерційними ефектами можна знехтувати, тому використовується квазістатична

форма запису.

Рівняння нерозривності виражає фундаментальний закон збереження маси для суцільного середовища. Для в'язкопластичних матеріалів під час гарячої деформації, де об'ємні зміни є надзвичайно малими порівняно зі зсувними деформаціями, воно набуває форми умови нестисливості і описується формулою 2.3.1:

$$\nabla v = 0 \quad (2.3.1)$$

де v – поле швидкості пластичної течії.

Фізично це означає, що об'єм матеріалу, який надходить в елементарний об'єм, дорівнює об'єму, що виходить із нього в кожен момент часу.

Рівняння рівноваги є математичним виразом другого закону Ньютона для суцільного середовища в квазістатичному наближенні (2.3.2), що справедливо для повільних процесів гарячої екструзії:

$$\nabla \sigma = 0 \quad (2.3.2)$$

де $\sigma = -pI + \tau$ – тензор напружень, p – гідростатичний тиск, τ – змінна частина тензора напружень.

Фізично це означає, що сума всіх внутрішніх сил, які діють на кожен елементарний об'єм матеріалу, врівноважена в кожен момент часу.

Для матеріалів на основі Ві–Те у температурному діапазоні гарячої деформації використано степеневий закон течії (закон Нортон) із температурною залежністю (2.3.3):

$$\varepsilon_{ек.} = A \left(\frac{\sigma_{ек.}}{\sigma_{реф.}} \right)^n \exp \left(-\frac{Q}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{реф.}} \right) \right) \quad (2.3.3)$$

де $\varepsilon_{ек.}$ – швидкість повзучості; $\sigma_{ек.}$ – еквівалентне напруження; $\sigma_{реф.} = 1$ МПа – референтне, напруження; $A = 0,01 \text{ с}^{-1}$ – коефіцієнт швидкості повзучості; $n = 4$ – показник степеня; $Q = 145 \text{ кДж/моль}$ – енергія активації; $T_{реф.} = 693,15 \text{ К}$ – референтна температура; R – універсальна газова стала.

Температурне поле визначається рівнянням теплопровідності з урахуванням конвективного переносу та дисипативного нагрівання (2.3.4):

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v \nabla T \right) = \nabla (k \nabla T) + \beta (\tau : \dot{\epsilon}) \quad (2.3.4)$$

де $\rho = 7700 \text{ кг/м}^3$ – густина; $c_p = 154 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{К)}$ – питома теплоємність; $k = 1,5 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}$ – теплопровідність; $\beta = 0,9$ – частка механічної роботи, що переходить у тепло.

Механічні граничні умови: на пуансоні задано швидкість $v = v_n$, на осі симетрії – умова осьової симетрії; на стінках контейнера й матриці – умова ідеального ковзання без тертя (Roller).

Теплові граничні умови: на матриці та контейнері задано температуру $T = T_m$; на вільній поверхні екструдату – конвективний теплообмін із коефіцієнтом $h = 10 \text{ Вт/(м}^2 \cdot \text{К)}$.

2.4. Комп'ютерна модель процесу гарячої екструзії термоелектричного матеріалу на основі Bi–Te розроблена в COMSOL Multiphysics

Для чисельної реалізації математичної моделі використано програмний комплекс COMSOL Multiphysics версії 6.2, який дозволяє розв'язувати зв'язані мультифізичні задачі методом скінченних елементів. Вибір цього програмного забезпечення зумовлений його здатністю ефективно моделювати термомеханічні процеси з урахуванням нелінійної в'язкопластичної поведінки матеріалу, контактної взаємодії та теплопереносу.

2.4.1. Геометрична модель та граничні умови

Враховуючи осьову симетрію процесу екструзії стрижня круглого перерізу,

геометричну модель побудовано в двовимірному наближенні (2D Axisymmetric). Геометрія моделі включає такі елементи: циліндрична заготовка радіусом 20 мм і висотою 60 мм, конічна частина матриці з кутом 30° і довжиною 28 мм, калібрувальна ділянка радіусом 4 мм і довжиною 10 мм. Матриця та контейнер змодельовані як жорсткі термопружні тіла для коректного задання граничних умов.

Для побудови моделі використано такі фізичні модулі COMSOL Multiphysics:

1. Solid Mechanics з підмодулями Linear Elastic Material та Creep для опису повзучості за законом Нортон. Увімкнено опцію Large Deformation для врахування геометричної нелінійності при великих деформаціях.
2. Heat Transfer in Solids для розрахунку температурного поля з урахуванням теплопровідності, конвекції та дисипативного нагрівання від пластичної деформації.
3. Multiphysics Coupling для забезпечення двостороннього зв'язку між механічною та тепловою задачами: температура впливає на в'язкість матеріалу, а механічна дисипація є джерелом тепла.

У розділі Materials створено користувацький матеріал Bi_2Te_3 із такими властивостями: густина $\rho = 7700 \text{ кг/м}^3$, питома теплоємність $c_p = 154 \text{ Дж/(кг}\cdot\text{K)}$, теплопровідність $k = 1,5 \text{ Вт/(м}\cdot\text{K)}$. Для опису в'язкопластичної поведінки в інтерфейсі Solid Mechanics, Creep обрано модель Norton Power Law із параметрами: $A = 0,01 \text{ с}^{-1}$, показник степеня $n = 4$, енергія активації $Q = 145 \text{ кДж/моль}$.

На осі симетрії задано умову Axial Symmetry, на пуансоні – Prescribed Displacement із швидкістю переміщення $v_{\text{п}} = 0,5\text{--}1,5 \text{ мм/хв}$; контакт між заготовкою та матрицею реалізовано через вузол Roller. Початкова температура заготовки $T_0 = 340 \text{ }^\circ\text{C}$; на поверхні матриці – Temperature Boundary Condition із $T_{\text{м}} = 340 \text{ }^\circ\text{C}$; на виході екструдату – Convective Heat Flux із коефіцієнтом $h = 10 \text{ Вт/(м}^2\cdot\text{K)}$ і температурою середовища $T_{\text{сер.}} = 25 \text{ }^\circ\text{C}$. Дисипативне нагрівання увімкнено через опцію Heat Source, Viscous Dissipation.

Для дискретизації розрахункової області використано сітку з трикутних елементів (User-controlled mesh) із базовим розміром Finer. Загальна кількість доменних елементів робочої сітки становить 332. Валідацію комп'ютерної моделі виконано шляхом перевірки збіжності рішення за сіткою: подрібнення сітки до рівня Extremely Fine (4305 елементів) призводить до зміни розрахованої сили екструзії менше ніж на 2 %.

Для розв'язання нелінійної зв'язаної задачі використано часовий динамічний розв'язник (Time Dependent). Параметри розв'язника: часовий діапазон 9 с, критерій збіжності – 10^{-4} . Для генерації вибірки для машинного навчання проведено серію параметричних розрахунків (Parametric Sweep) із варіюванням таких параметрів: температура заготовки $T_{\text{заг}} = 340\text{--}500\text{ }^{\circ}\text{C}$ із кроком $20\text{ }^{\circ}\text{C}$, температура матриці $T_{\text{м}} = 340\text{--}500\text{ }^{\circ}\text{C}$ із кроком $20\text{ }^{\circ}\text{C}$, швидкість пуансона $v_{\text{п}} = 0,5\text{--}1,5\text{ мм/хв}$ із кроком $0,5\text{ мм/хв}$.

2.4.2. Результати комп'ютерного моделювання

У процесі моделювання було отримано 243 розрахункові точки. Результати розрахунку сили екструзії за $t = 9\text{ с}$ для різних температур та швидкостей пуансона наведено у таблиці 2.4.2.1.

Таблиця 2.4.2.1

Результати розрахунку сили екструзії у динамічному режимі

T, °C	v = 0,48 мм/хв	v = 1,02 мм/хв	v = 1,50 мм/хв
500	19,20	43,95	68,77
480	19,95	45,60	70,65
460	20,78	47,36	72,57
440	21,66	49,16	74,74

T, °C	v = 0,48 мм/хв	v = 1,02 мм/хв	v = 1,50 мм/хв
420	22,58	50,99	77,39
400	23,53	52,95	80,39
380	24,50	55,18	83,34
360	25,60	57,37	86,52
340	26,96	59,15	89,82

На рис. 2.4.2.1 наведено графічну залежність сили екструзії від температури за різних швидкостей пуансона, а на рис. 2.4.2.2 – розподіл еквівалентних напружень за Мізесом.

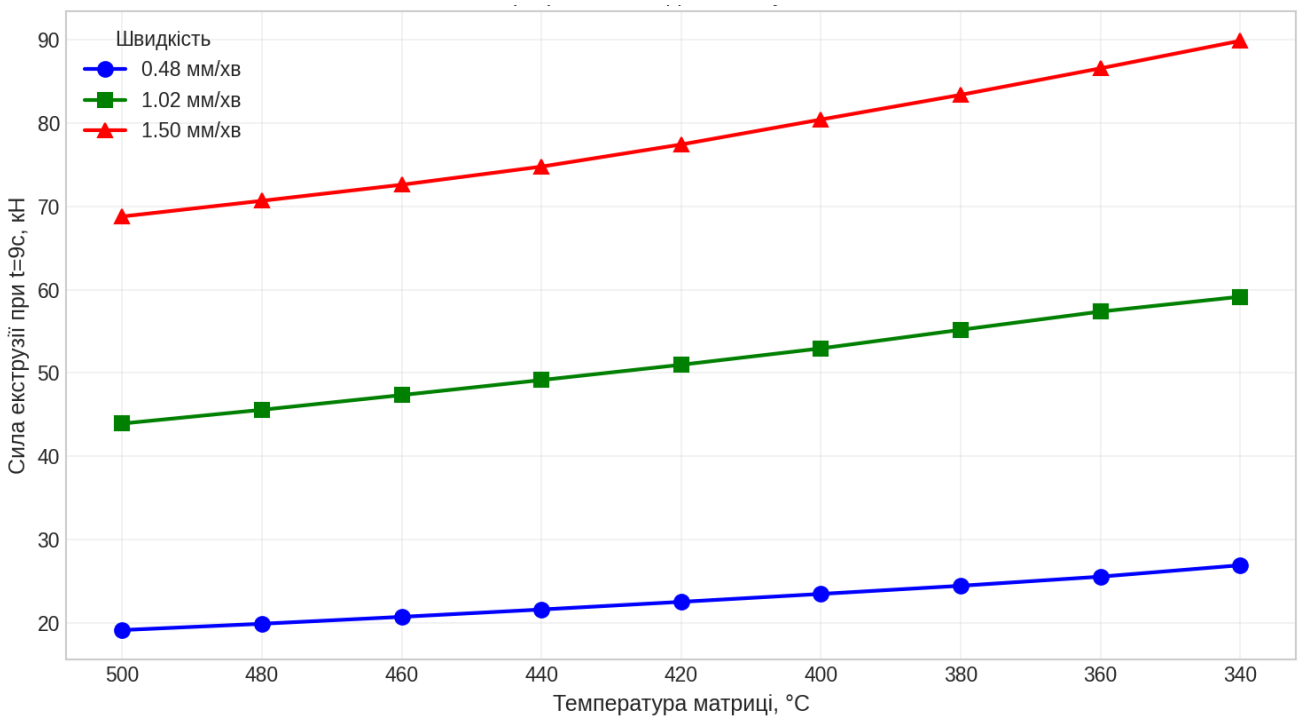


Рис. 2.4.2.1 – Залежність сили екструзії від температури матриці за різних швидкостей пуансона

Аналіз отриманих результатів демонструє суттєвий вплив швидкості деформації на силу екструзії. Зі збільшенням швидкості пуансона з 0,48 мм/хв до 1,50 мм/хв (у 3,1 раза) середня сила екструзії зростає з 22,8 кН до 78,2 кН. Це пояснюється в'язкопластичною природою деформації: за вищих швидкостей деформації матеріал не встигає релаксувати напруження через механізм повзучості, що призводить до підвищення ефективного опору деформації.

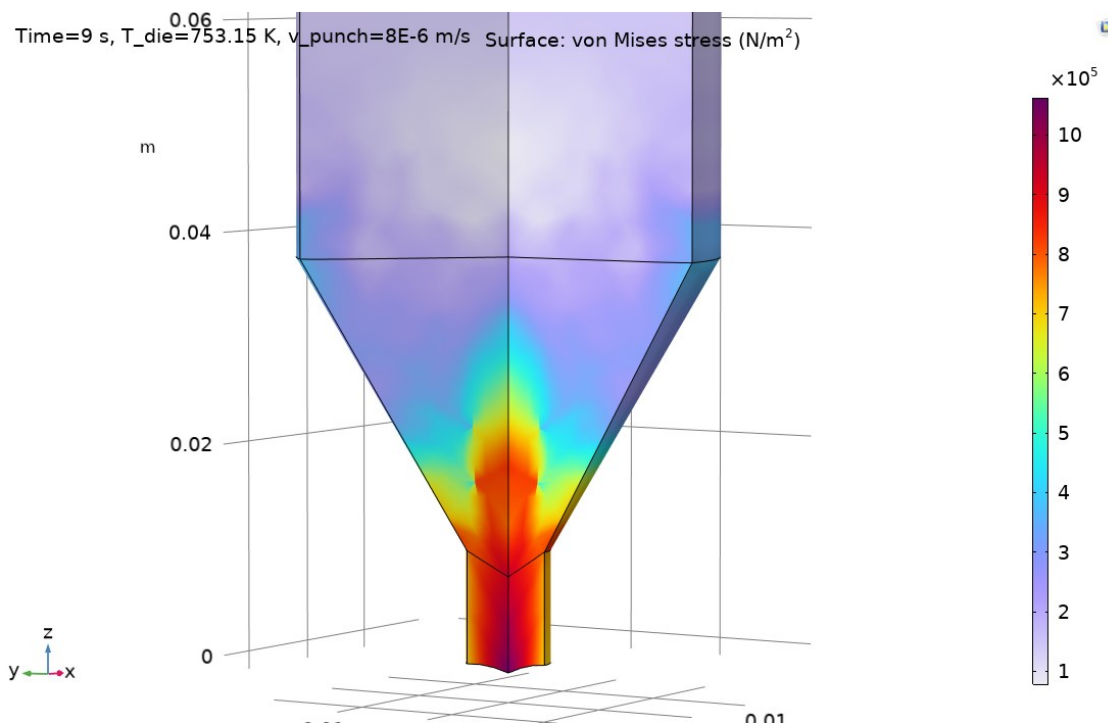


Рис. 2.4.2.2 – Розподіл еквівалентних напружень за Мізесом

Вплив температури на силу екструзії є менш вираженим порівняно з впливом швидкості. Зі зниженням температури з 500 °С до 340 °С сила екструзії зростає на 40-50 % для всіх досліджених швидкостей, що відповідає експоненційній залежності швидкості повзучості від температури за законом Арреніуса.

Результати розрахунку максимального головного напруження σ_1 на поверхні

екструдату для різних температур та швидкостей наведено в табл. 2.4.2.2.

На рис. 2.4.2.3 наведено графічну залежність максимального головного напруження від температури за різних швидкостей пуансона, а на рис. 2.4.2.4 – розподіл густини дисипації енергії повзучості.

Таблиця 2.4.2.2

Максимальне головне напруження в МПа при різних швидкостях деформації

T, °C	v = 0,48 мм/хв	v = 1,02 мм/хв	v = 1,50 мм/хв
500	271	597	818
480	246	545	900
460	283	484	867
440	323	458	816
420	371	425	739
400	429	488	631
380	469	548	591
360	466	620	649
340	426	685	709

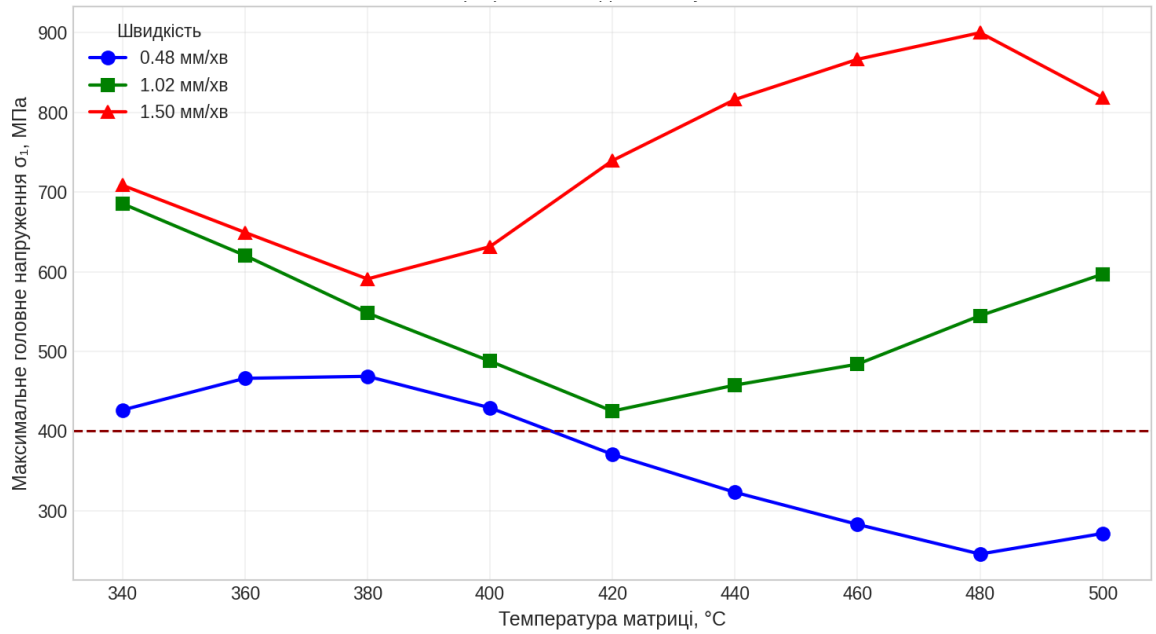


Рис. 2.4.2.3 – Залежність максимального головного напруження від температури матриці за різних швидкостей пуансона

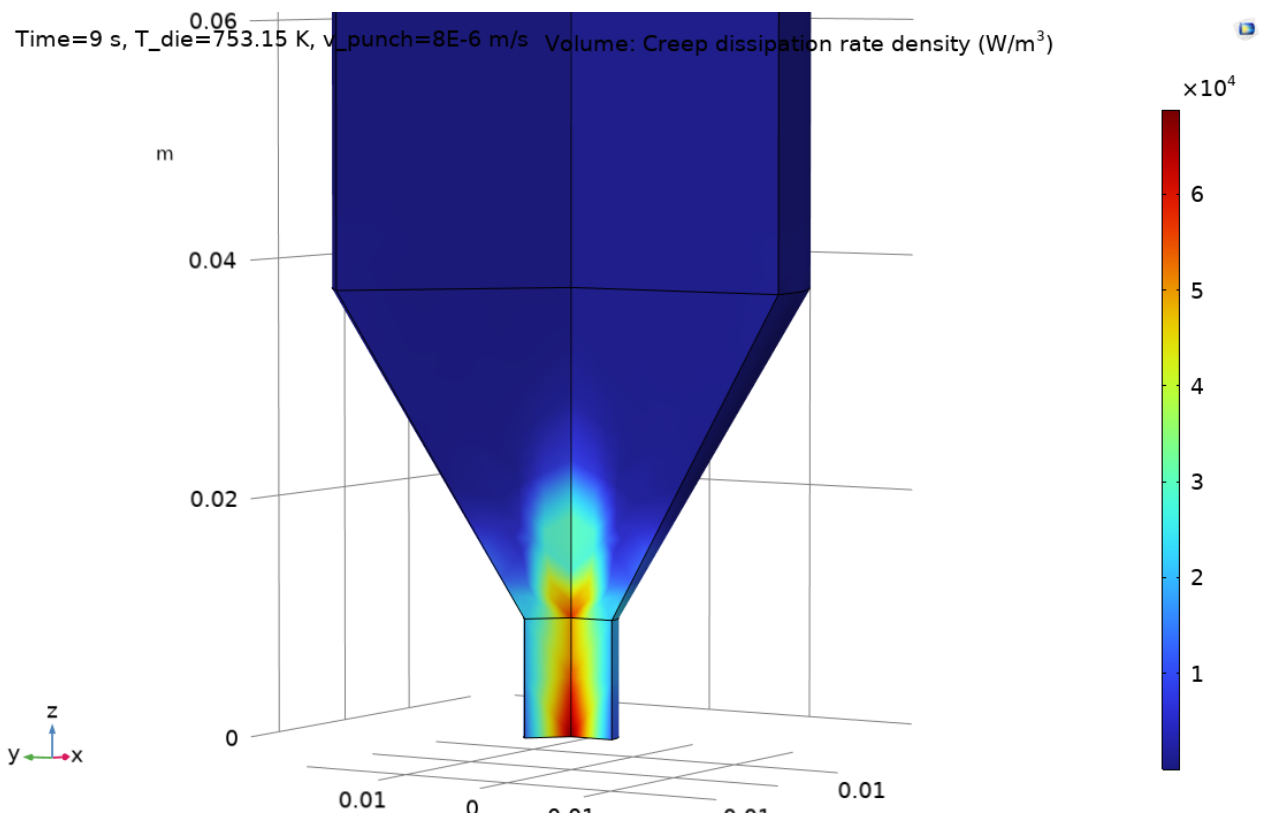


Рис. 2.4.2.4 – Розподіл густини дисипації енергії повзучості

Аналіз напруженого стану показує, що максимальні головні напруження σ_1 суттєво залежать від швидкості деформації. За низької швидкості ($v = 0,48$ мм/хв) напруження перебувають у діапазоні 246–469 МПа, тоді як за високої швидкості ($v = 1,50$ мм/хв) вони досягають 591–900 МПа. Середнє значення напруження зростає з 365 МПа до 747 МПа (збільшення на 105%) зі збільшенням швидкості у 3,1 раза. За швидкості $v = 0,48$ мм/хв критичний рівень 400 МПа перевищується тільки за температур нижче 400°C . Однак при швидкостях $v \geq 1,02$ мм/хв напруження перевищують 400 МПа практично у всьому діапазоні температур, що свідчить про підвищений ризик утворення поверхневих тріщин. Зведені результати параметричного моделювання наведено на рис. 2.4.2.5.

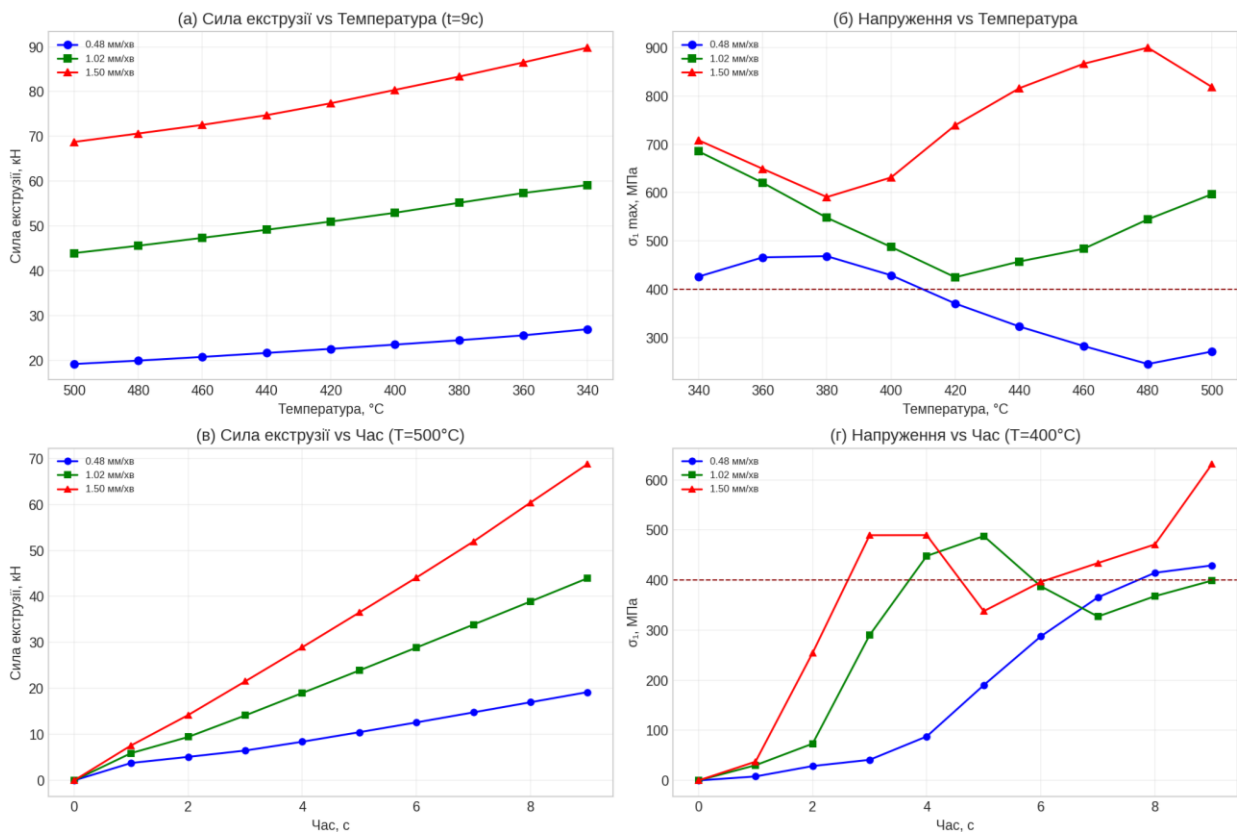


Рис. 2.4.2.5. – Зведені результати параметричного моделювання процесу екструзії матеріалу Bi_2Te_3

Таблиця 2.4.2.3

Порівняння середніх значень параметрів процесу екструзії

Параметр	$v = 0,48$ мм/хв	$v = 1,02$ мм/хв	$v = 1,50$ мм/хв
Середня сила, кН	22,8	51,3	78,2
Середнє σ_1 , МПа	365	539	747
$\Delta T_{\max}$, °С	0,32	0,32	0,45

У таблиці 2.4.2.3 наведено порівняння середніх значень параметрів процесу екструзії. На основі проведеного параметричного моделювання процесу гарячої екструзії термоелектричного матеріалу Bi_2Te_3 встановлено такі закономірності:

1. Швидкість пуансона є домінуючим чинником, що визначає силу екструзії. Зі збільшенням швидкості з 0,48 мм/хв до 1,50 мм/хв (в 3,1 раза) середня сила екструзії зростає з 22,8 кН до 78,2 кН. Ця залежність є нелінійною і підпорядковується степеневому закону. Фізично це пояснюється тим, що за вищих швидкостей деформації матеріал не встигає релаксувати напруження через механізм повзучості Нортона, що призводить до підвищення миттєвого опору деформації.
2. Температура матриці має помірний вплив на силу екструзії: зі зниженням температури з 500 °С до 340 °С сила зростає на 40–50 % для всіх досліджених швидкостей. Залежність $F(T)$ підпорядковується експоненційному закону Арреніуса з коефіцієнтом впливу приблизно 0,25–0,30 % на кожний градус зниження температури.
3. Максимальне головне напруження σ_1 є критичним параметром для оцінки ризику утворення тріщин. За низької швидкості ($v = 0,48$ мм/хв) критичний рівень 400 МПа перевищується лише за температур нижче 400 °С, тоді як за $v = 1,50$ мм/хв напруження досягають 591–900 МПа у всьому діапазоні

температур, що свідчить про необхідність обмеження швидкості екструзії.

4. На основі аналізу результатів можна сформулювати рекомендації щодо оптимальних режимів екструзії матеріалу Bi_2Te_3 . Для забезпечення якості поверхні екструдату ($\sigma_1 < 400$ МПа) та мінімізації енергоємності процесу рекомендується використовувати швидкість пуансона $v \leq 0,48$ мм/хв за температур $T \geq 400$ °С. За необхідності підвищення продуктивності можливе збільшення швидкості до $v = 1,02$ мм/хв, але тільки за температур $T \geq 450$ °С з обов'язковим контролем якості поверхні.
5. Приріст температури в зоні деформації внаслідок дисипації механічної енергії є незначним і становить 0,24–0,45 °С. Це пояснюється високою швидкістю релаксації напружень за обраних параметрів повзучості та ефективним відведенням тепла через матрицю. Низький тепловий ефект свідчить про те, що процес екструзії за досліджених режимів є практично ізотермічним.

Встановлені оптимальні технологічні режими екструзії формують основу для подальшого порівняння з літературними даними, що зумовлює необхідність розробки інструментарію для автоматизованого збору та систематизації відповідної інформації з наукових публікацій.

2.5. Модуль попередньої обробки документів системи збору інформації із літературних джерел

2.5.1. Обробка PDF документів

Значна кількість наукових публікацій представлена у форматі PDF, що створює особливі труднощі для автоматизованої обробки. PDF є форматом представлення документів, орієнтованим на точне відтворення візуального вигляду, а не на зберігання структурованих даних, тому вилучення тексту з PDF-файлів є непростим

завданням. Особливо складними є випадки, коли документ містить багатостовпкову верстку, вбудовані таблиці, математичні формули та графічні елементи. Додаткові труднощі виникають через різноманітність способів кодування тексту в PDF-файлах, зокрема у випадках, коли шрифти не містять інформації про відповідність гліфів символам Unicode, що вимагає застосування евристики для відновлення тексту.

Для розбору PDF-документів було обрано комбінований підхід із застосуванням кількох спеціалізованих бібліотек. Основним інструментом є PyMuPDF, яка поширюється на умовах GNU AGPL v3.0. [121] та забезпечує швидке й надійне вилучення текстового вмісту з PDF-файлів. PyMuPDF забезпечує вилучення метаданих документа та підтримує роботу із зашифрованими PDF за наявності пароля (перевірка `needs_pass/is_encrypted`, автентифікація `authenticate`). Бібліотека також надає координатну інформацію для текстових блоків та слів (наприклад, через `Page.get_text("blocks")`), що може бути використано для реконструкції порядку читання та логічної структури сторінки. Для документів зі складною версткою додатково застосовується `pdfplumber` [122], який надає детальну інформацію про об'єкти сторінки (символи, лінії, прямокутники) і має вбудовані механізми вилучення табличних даних та режим текстової екстракції з урахуванням візуального макета. За потреби порядок читання або групування елементів може уточнюватися на основі координат і кластеризації.

Алгоритм обробки PDF-документа починається з аналізу його структури та визначення типу верстки. Система автоматично визначає одностовпкову або багатостовпкову верстку на основі аналізу розподілу текстових блоків за горизонталлю з використанням методу виявлення піків у гістограмі горизонтальних позицій. Для кожної сторінки виконується вилучення текстових блоків зі збереженням інформації про їхнє геометричне розташування, зокрема координат лівого верхнього та правого нижнього кутів, розмір шрифту та тип шрифту. Ця

інформація використовується для реконструкції логічного порядку читання тексту, що є вкрай важливим для документів із багатоколонковою версткою. Текстові блоки сортуються спочатку за вертикальною позицією згори донизу, а потім за горизонтальною – зліва направо, з урахуванням можливих колонок, визначених на етапі аналізу структури.

Особливу увагу приділено вилученню даних із таблиць, оскільки значна частина експериментальних даних про термоелектричні властивості представлена саме в табличній формі. За статистикою, зібраною на основі літературних джерел із 3500 статей за термоелектричною тематикою, приблизно 65% числових значень властивостей містяться в таблицях, а решта 35% – у тексті статті або на графіках. На рис. 2.5.1.1 представлено блок-схему роботи алгоритму.

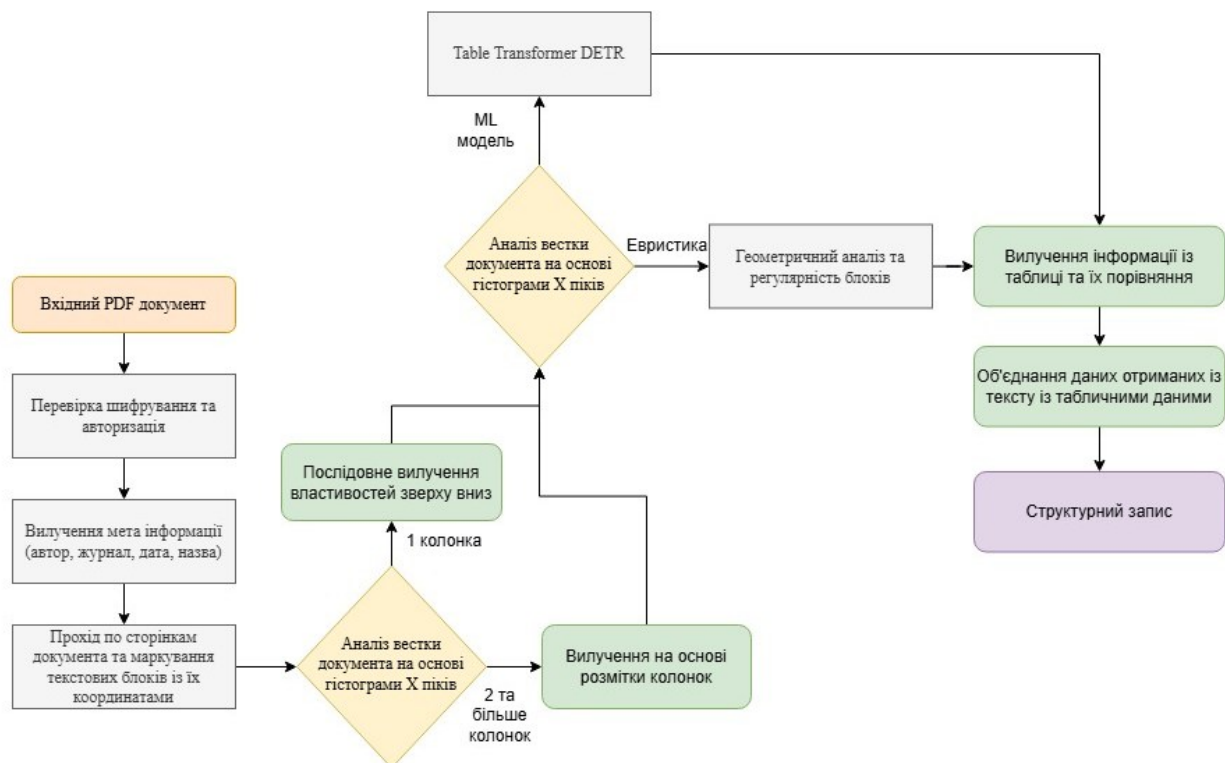


Рис. 2.5.1.1 – Схема алгоритму отримання даних із PDF-документа

Для виявлення таблиць застосовується поєднання евристичних методів і моделі машинного навчання – Table Transformer [123]. Евристичний підхід базується на аналізі геометричних закономірностей, зокрема регулярного розташування текстових блоків та наявності горизонтальних і вертикальних ліній.

Table Transformer є нейронною мережею на основі архітектури DETR (Detection Transformer) [124], спеціально навченою для виявлення структури таблиць у документах. Модель приймає на вхід зображення сторінки документа та повертає координати виявлених таблиць разом із їхньою внутрішньою структурою, а саме рядки, стовпці та комірки.

2.5.2. Оптичне розпізнавання інформації із сканованих зображень

Частина наукових публікацій, особливо ранніх років, доступна лише у вигляді сканованих копій без текстового шару. За власними оцінками, такі документи становлять приблизно 15–20 % від загального обсягу, особливо серед публікацій до 2000 року та матеріалів конференцій. Для їх обробки необхідне застосування технологій оптичного розпізнавання символів (OCR). Вибір OCR-системи є вкрай важливим, оскільки якість розпізнавання безпосередньо впливає на точність подальшого аналізу, а помилки на етапі OCR накопичуються на всіх наступних етапах і можуть призвести до повної втрати інформації про властивості матеріалів.

Як OCR-систему обрано Tesseract OCR версії 5.0 [125] із підтримкою моделей LSTM (Long Short-Term Memory). Tesseract версії 5.0 продовжує архітектуру LSTM-розпізнавання, введену у версії 4.0, із покращеною підтримкою API (Application Programming Interface) та стабільністю, що забезпечує точність на рівні 90–93 % для сканованих зображень друкованого тексту з наших матеріалів.

Особливу увагу приділено розпізнаванню хімічних формул, грецьких літер (α , β , κ , σ , λ), індексів, експонент та показника ZT , які широко використовуються в

термоелектричній літературі. Для цього систему Tesseract доповнено спеціалізованим словником термоелектричних термінів та типових хімічних формул. Словник містить понад 5000 назв матеріалів та їхніх варіантів, типові шаблони запису властивостей та одиниць вимірювання. Під час розпізнавання система враховує контекст та надає перевагу варіантам, наявним у словнику, що суттєво знижує кількість помилок у спеціалізованій термінології.

Для підвищення точності розпізнавання складних елементів, таких як хімічні формули та математичні вирази, додатково застосовується спеціалізована модель на основі Vision Transformer. Ця модель навчена на наборі даних Im2Latex [126] із математичними виразами та на додатковому наборі хімічних формул, зібраному з наукових публікацій. Модель забезпечує точність розпізнавання на рівні 92 % для типових формул, що трапляються в термоелектричній літературі. Особливо добре вона справляється з формулами, що містять верхні та нижні індекси, грецькі літери та дробі.

Лабораторні журнали часто містять попередні результати вимірювань, дані про невдалі експерименти які рідко публікуються, але можуть бути корисними для розуміння меж застосовності матеріалів, а також детальну інформацію про умови синтезу та вимірювань, що не завжди включається до публікацій через обмеження обсягу. Розпізнавання рукописного тексту є значно складнішою задачею порівняно з друкованим текстом через варіативність почерків та можливу неоднозначність написання окремих символів.

Для вирішення цього завдання застосовано мультимодальну модель на основі архітектури Vision-Language [127]. Модель приймає на вхід зображення рукописного тексту та створює текстову транскрипцію. Як базову модель використано TrOCR від Microsoft Research [128], яка поєднує візуальний кодувальник на основі BEiT [129] з текстовим декодувальником на основі архітектури RoBERTa (Robustly Optimized BERT Pretraining) [130]. TrOCR

демонструє найкращі результати серед відкритих моделей на стандартних тестових наборах для розпізнавання рукописного тексту, зокрема IAM Handwriting Database [131]. На рис. 2.5.2.1 представлено блок-схему роботи алгоритму оптичного розпізнавання інформації зі сканованих зображень.

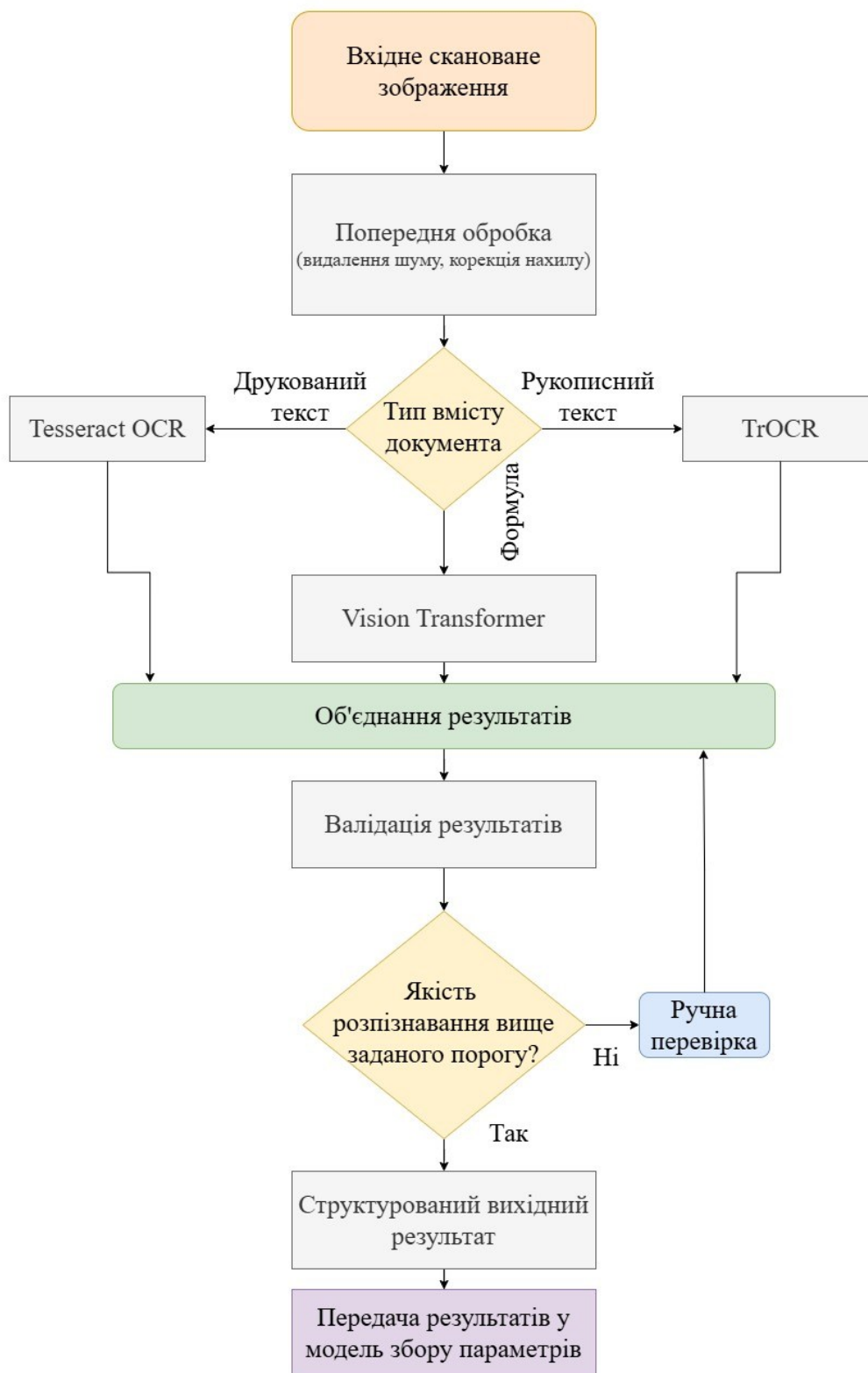


Рис. 2.5.2.1 – Блок-схема алгоритму оптичного розпізнавання інформації із сканованих документів

Альтернативним підходом до оцифрування рукописних записів є використання сучасних мультимодальних LLM, таких як GPT (Generative Pre-trained Transformer) або Claude. Ці моделі демонструють здатність інтерпретувати рукописний текст у контексті, що дозволяє не лише транскрибувати текст а й виправляти очевидні помилки запису на основі семантичного розуміння. Модель здатна розпізнати що «термоЕРС» у контексті означає коефіцієнт Зеебека, навіть якщо написання тексту нечітке. Однак застосування таких моделей через API пов'язане з питаннями конфіденційності даних, оскільки лабораторні записи можуть містити неопубліковані результати, та значними фінансовими витратами при обробці великих обсягів документів. Тому в розробленій системі комерційні мультимодальні моделі використовуються лише як концепт для складних випадків, де локальні моделі не забезпечують достатньої якості, та за явної згоди користувача на передачу даних зовнішньому API.

2.6. Визначення ключових ознак на основі фізичної моделі

Ефективність термоелектричного матеріалу характеризується термоелектричною добротністю ZT , яка визначається за формулою 2.7.1. [3]

$$ZT = \alpha^2 \frac{\sigma T}{\kappa} \quad (2.7.1)$$

де α – коефіцієнт Зеебека, σ – електропровідність, T – абсолютна температура, κ – загальна теплопровідність.

Це співвідношення визначає максимально досяжну ефективність термоелектричного перетворення енергії. Коефіцієнт корисної дії термоелектричного генератора або холодильника зростає зі збільшенням ZT [132], тому пошук матеріалів із максимальним ZT є головною метою досліджень у цій галузі, якщо не брати до уваги економічну доцільність застосування. Ці параметри

визначають структуру підходів, за якою система має збирати дані.

Коефіцієнт Зеебека α зазвичай виражається в мкВ/К і є ключовою властивістю, що визначає здатність матеріалу генерувати електричну напругу у відповідь на градієнт температури. Фізично він відображає асиметрію розподілу носіїв заряду відносно рівня Фермі: за наявності градієнта температур носії з вищою енергією дифундують до холодного кінця, створюючи різницю потенціалів. Знак коефіцієнта Зеебека вказує на тип основних носіїв заряду: негативне значення відповідає електронній провідності (n -тип), позитивне – дірковій провідності (p -тип). Типові значення для ефективних термоелектричних матеріалів знаходяться у діапазоні від 100 до 300 мкВ/К за абсолютною величиною [133]. Для металів коефіцієнт Зеебека зазвичай не перевищує 10-20 мкВ/К, тому для термоелектричних застосувань переважно використовують напівпровідники.

Електропровідність σ вимірюється в См/см і характеризує здатність матеріалу проводити електричний струм. Електропровідність визначається концентрацією носіїв заряду та їхньою рухливістю і описується формулою 2.7.2:

$$\sigma = ne\mu \quad (2.7.2)$$

де n – концентрація носіїв заряду, e - елементарний заряд, μ – рухливість носіїв. Для термоелектричних матеріалів оптимальні значення електропровідності зазвичай знаходяться в діапазоні 100–1000 См/см [132]. Високі значення електропровідності характерні для металів, де вона перевищує 10 000 См/см, але супроводжується низькими значеннями коефіцієнта Зеебека через високу концентрацію носіїв, що знижує загальну ефективність.

Теплопровідність κ вимірюється у Вт/(м·К) і є сумою двох компонентів: електронної теплопровідності та решіткової (фононної) теплопровідності. Електронна компонента пов'язана з електропровідністю через співвідношення Відемана–Франца [134]. Це співвідношення встановлює фундаментальне обмеження: підвищення електропровідності автоматично збільшує електронну

теплопровідність. Решіткова теплопровідність визначається фононним переносом – передачею тепла через коливання кристалічної решітки. На відміну від електронної компоненти, решіткова теплопровідність може бути знижена незалежно від електропровідності шляхом введення дефектів кристалічної структури, наночастинок або створення складних кристалічних структур із великими елементарними комірками [7]. Для високоефективних термоелектричних матеріалів бажаними є значення загальної теплопровідності менше $2 \text{ Вт}/(\text{м} \cdot \text{К})$ [135].

Окрім основних термоелектричних параметрів, система має збирати низку допоміжних характеристик, важливих для повного опису матеріалу та відтворюваності результатів. Ці параметри дозволяють глибше зрозуміти механізми термоелектричних явищ і прогнозувати поведінку матеріалів за зміни початкових умов. До них належать: концентрація, рухливість та ефективна маса носіїв заряду, ширина забороненої зони та фактор потужності.

Концентрація носіїв заряду є ключовим параметром оптимізації термоелектричних матеріалів. З літератури відомо, що оптимальне значення концентрації носіїв заряду зазвичай перебуває в діапазоні від 10^{19} до 10^{20} см^{-3} [3] для напівпровідників, за якого досягається максимальне значення фактора потужності. За нижчих концентрацій коефіцієнт Зеєбека високий, але електропровідність занадто низька; за вищих – електропровідність зростає, але коефіцієнт Зеєбека падає швидше. Цей параметр контролюється шляхом легування матеріалу донорними або акцепторними домішками. Рухливість носіїв заряду визначає, наскільки легко носії рухаються під дією електричного поля, і залежить від механізмів розсіювання на фононах, домішках, дефектах та межах зерен. Ефективна маса носіїв пов'язана з кривизною енергетичних зон і впливає як на коефіцієнт Зеєбека, так і на рухливість носіїв заряду.

Критично важливими для коректної інтерпретації даних є умови вимірювання. Температура вимірювання повинна обов'язково фіксуватися для кожного значення

властивості, оскільки всі термоелектричні параметри мають виражену температурну залежність. Коефіцієнт Зеебека зазвичай зростає з температурою до певного максимуму, після чого може зменшуватися через виродження напівпровідника. Електропровідність для напівпровідників зазвичай зростає з температурою, а для металів – падає. Теплопровідність має складну температурну залежність, що визначається конкуренцією різних механізмів розсіювання фононів. У літературі зустрічаються як вимірювання за фіксованої температури (зазвичай кімнатної – 300 К), так і в широкому діапазоні, наприклад: від 300 К до 800 К для високотемпературних матеріалів або від 10 К до 300 К для кріогенних застосувань.

Іншими важливими умовами вимірювання є: атмосфера (вакуум, інертний газ або повітря, оскільки деякі матеріали окиснюються на повітрі за високих температур), напрямок вимірювання відносно кристалографічних осей (що критично для анізотропних матеріалів, де властивості можуть суттєво відрізнятися залежно від напрямку); а також методика вимірювання. Зокрема, для визначення теплопровідності застосовують стаціонарний [136] або імпульсний методи [137], для прямого вимірювання ZT – метод Хармана [138], а для електропровідності – чотиризондовий метод [139].

2.7. Схема бази даних для накопичення зібраної інформації

На основі аналізу фізичної моделі термоелектричних явищ та типових закономірностей представлення даних у науковій літературі розроблено схему реляційної бази даних для зберігання зібраних властивостей. Схема побудована за принципом третьої нормальної форми та забезпечує гнучкість для зберігання даних різного рівня повноти: від мінімального набору (матеріал, властивість та значення) до повного опису з усіма умовами вимірювання та метаданими джерела. На рис. 2.7.1 наведено запропоновану схему залежностей сутностей бази даних.

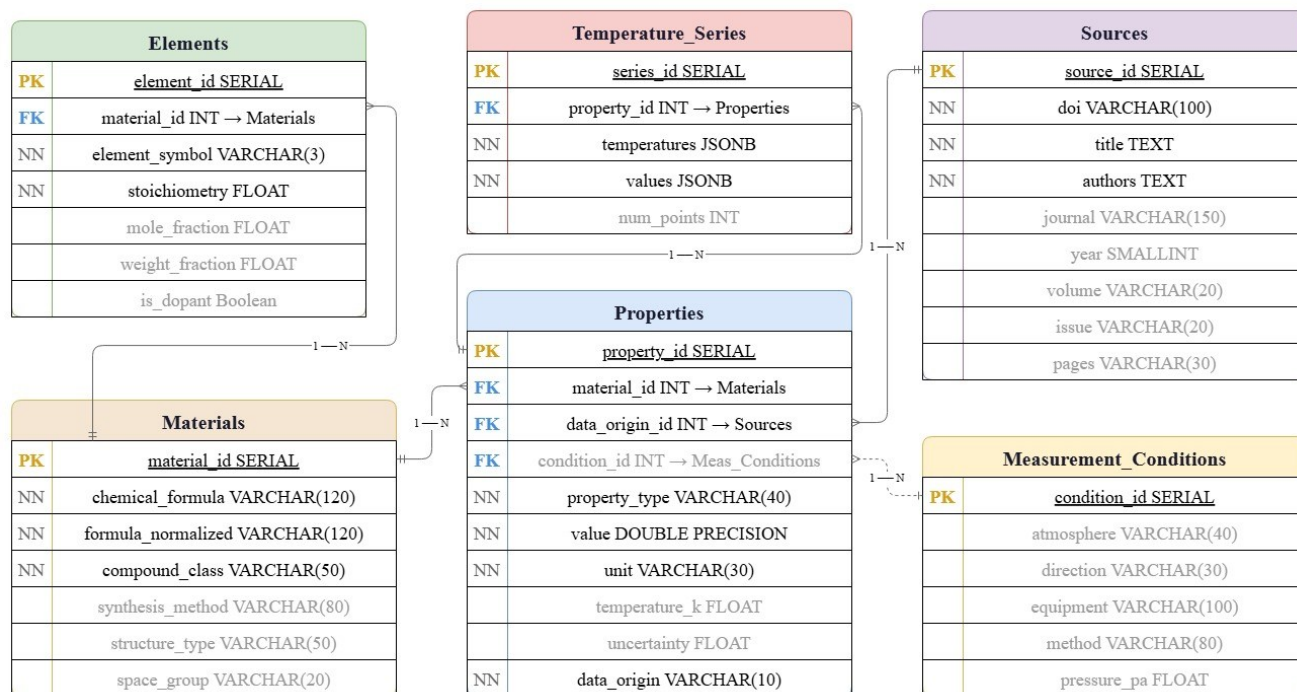


Рис. 2.7.1 – Схема бази даних для зберігання інформації отриманої із літератури

Центральним елементом бази даних є таблиця **Materials**, яка зберігає інформацію про хімічний склад матеріалу. Для кожного матеріалу фіксується: хімічна формула у стандартизованому форматі; клас сполуки (халькогенід, скутерудит, клатрат, сполуки Напів-Гейслера, оксид); метод синтезу (якщо вказано: спікання, зонна плавка, механічне легування, SPS (Spark Plasma Sintering)); структурний тип (кубічний, тетрагональний чи гексагональний). Для легованих матеріалів додатково фіксується тип домішки, хімічний символ легувального елемента та його концентрація. Хімічна формула нормалізується до стандартного вигляду з використанням бібліотеки `rumatgen` [140] для забезпечення узгодженості під час пошуку: елементи впорядковуються за електронегативністю згідно з конвенцією IUPAC, а індекси зводяться до найменших цілих чисел. Окрема таблиця **Elements** зберігає елементарний склад матеріалу для кожного хімічного елемента

(стехіометричний коефіцієнт, мольна частка), що дає змогу виконувати пошук за вмістом окремих компонентів.

Таблиця `Properties` зберігає виміряні значення термоелектричних властивостей. Кожен запис пов'язаний із конкретним матеріалом та містить тип властивості (наприклад, `seebeck`, `electrical_conductivity`, `resistivity`, `thermal_conductivity`, `zt`, `power_factor`, `carrier_concentration`, `mobility`, `effective_mass`, `band_gap`), числове значення, одиниці вимірювання в уніфікованих одиницях, температуру вимірювання у кельвінах та похибку вимірювання (якщо вона вказана в джерелі). Додатково зберігаються поля, які вказують на спосіб вилучення даних: `text` – для тексту статті, `table` – для таблиці, `figure` – для даних, вилучених із графіка, оскільки ця інформація є важливою для оцінки надійності значень.

Таблиця `Sources` містить бібліографічну інформацію про джерело даних: DOI, назву статті, список авторів, назву журналу, рік публікації, том, випуск та номери сторінок. Кожен запис властивості пов'язаний із джерелом через зовнішній ключ, що забезпечує швидкий пошук першоджерела за запитуваними даними. Таблиця `Measurement_Conditions` зберігає додаткову інформацію про умови вимірювання: атмосферу, напрямок вимірювання, використане обладнання та методику. Ці поля є необов'язковими, оскільки не всі публікації надають повну інформацію про умови вимірювання. Схема бази даних також містить таблицю `Temperature_Series` для зберігання температурних залежностей як масивів значень, що дозволяє ефективно працювати з даними, представленими у вигляді графіків, використовуючи типи даних `JSONB`. Зв'язок між `Properties` та `Sources` реалізовано як «багато до одного»: кожен запис властивості посилається на одне джерело, тоді як одне джерело може містити багато записів. Зв'язок із `Measurement_Conditions` також є зв'язком «багато до одного», оскільки однакові умови можуть відповідати кільком вимірюванням.

2.8. Порівняльний аналіз архітектур мовних моделей

2.8.1. Моделі на основі архітектури Encoder-only (BERT)

Архітектура BERT, що розшифровується як Bidirectional Encoder Representations from Transformers, є однією з найпоширеніших для завдань розуміння природної мови та залишається стандартом де-факто для класифікації та маркування послідовностей. BERT використовує двонаправлений механізм уваги (attention), що дає змогу моделі враховувати контекст з обох сторін кожного токена під час формування представлення цього токена. Ця властивість є особливо цінною для завдань розпізнавання іменованих сутностей (NER), де оточення сутності є вкрай важливим для правильної класифікації. Наприклад, щоб визначити, чи є число 300 температурою (300 K), чи значенням коефіцієнта Зеєбека (300 мкВ/К), необхідно аналізувати слова з обох боків від нього. Базова модель BERT-base-uncased містить 110 мільйонів параметрів і навчена на загальних текстових джерелах, зокрема Wikipedia та BookCorpus, загальним обсягом близько 3,3 мільярда tokenів WordPiece [141].

SciBERT є варіантом BERT, попередньо натренованим на 1,14 мільйона наукових статей із Semantic Scholar [142], що охоплюють комп'ютерні науки (18 %) та біомедицину (82 %). SciBERT використовує спеціалізований словник із 30 522 tokenів (аналогічний за розміром до оригінального BERT, але побудований на основі наукової літератури методом WordPiece), що забезпечує краще покриття наукової термінології порівняно з оригінальним словником BERT. Наприклад, термін «thermoelectric» у SciBERT є одним токеном, тоді як у базовому BERT він розбивається на кілька субтокенів. Дослідження показують, що SciBERT перевершує базовий BERT на 2–4 відсоткових пункти за метрикою F1 у завданнях NER у наукових текстах різних доменів [143].

MatBERT [144] та MatSciBERT [145] продовжують ідею адаптації до предметної області й спеціально орієнтовані на матеріалознавство. MatBERT навчений на корпусі з 2 мільйонів анотацій статей із Web of Science у галузі матеріалознавства та хімії твердого тіла. MatSciBERT базується на SciBERT із додатковим навчанням на матеріалознавчих текстах методом продовженого попереднього навчання. Ці моделі демонструють найкращі результати на еталонних тестах, зокрема на наборі даних MatScholar; для загального розпізнавання матеріалознавчих сутностей MatSciBERT-CRF досягає Macro-F1 = 0,864 та Micro-F1 = 0,875 [145].

Основною перевагою моделей сімейства BERT є їхня ефективність у завданнях класифікації та маркування послідовностей. Для завдання NER модель BERT доповнюється лінійним шаром поверх останнього прихованого стану кожного токена. Цей шар передбачає мітку класу для кожного токена за схемою BIO (Begin, Inside, Outside) або BIOES (Begin, Inside, Outside, End, Single), де кожному токenu присвоюється мітка, що вказує на його позицію відносно меж сутності. Зокрема, у схемі BIO мітка B позначає перший токен сутності, I – наступні токени тієї самої сутності, а O – токени поза межами будь-якої сутності. Розширена схема BIOES додатково розрізняє сутності з одного токена (S – Single) та кінцеві токени сутностей із декількох токенів (E – End), що підвищує точність визначення меж. Наприклад, у реченні « Bi_2Te_3 має коефіцієнт Зеєбека 300 мкВ/К» токен « Bi_2Te_3 » отримує мітку B-Material, токени «коефіцієнт» та «Зеєбека» – відповідно B-Property та I-Property, «300» – B-Value, а «мкВ/К» – B-Unit, а слово «має» отримує мітку O. Навчання такої архітектури є швидким та вимагає помірних обчислювальних ресурсів. Порівняно з попереднім навчанням, донавчання є відносно недорогим з обчислювальної точки зору – за даними авторів BERT [141], усі результати статті можуть бути відтворені протягом щонайбільше однієї години на одному Cloud TPU (Tensor Processing Unit) або за кілька годин на одному GPU (Graphics Processing

Unit).

Обмеженням архітектури BERT є фіксована максимальна довжина вхідної послідовності – 512 токенів [141] для стандартних моделей, що може бути недостатньо для обробки довгих наукових статей, які типово містять від 5000 до 10 000 токенів.

На рис. 2.8.1.1 представлено схему процесу отримання іменованих сутностей (NER) в науковому тексті на основі моделі BERT.

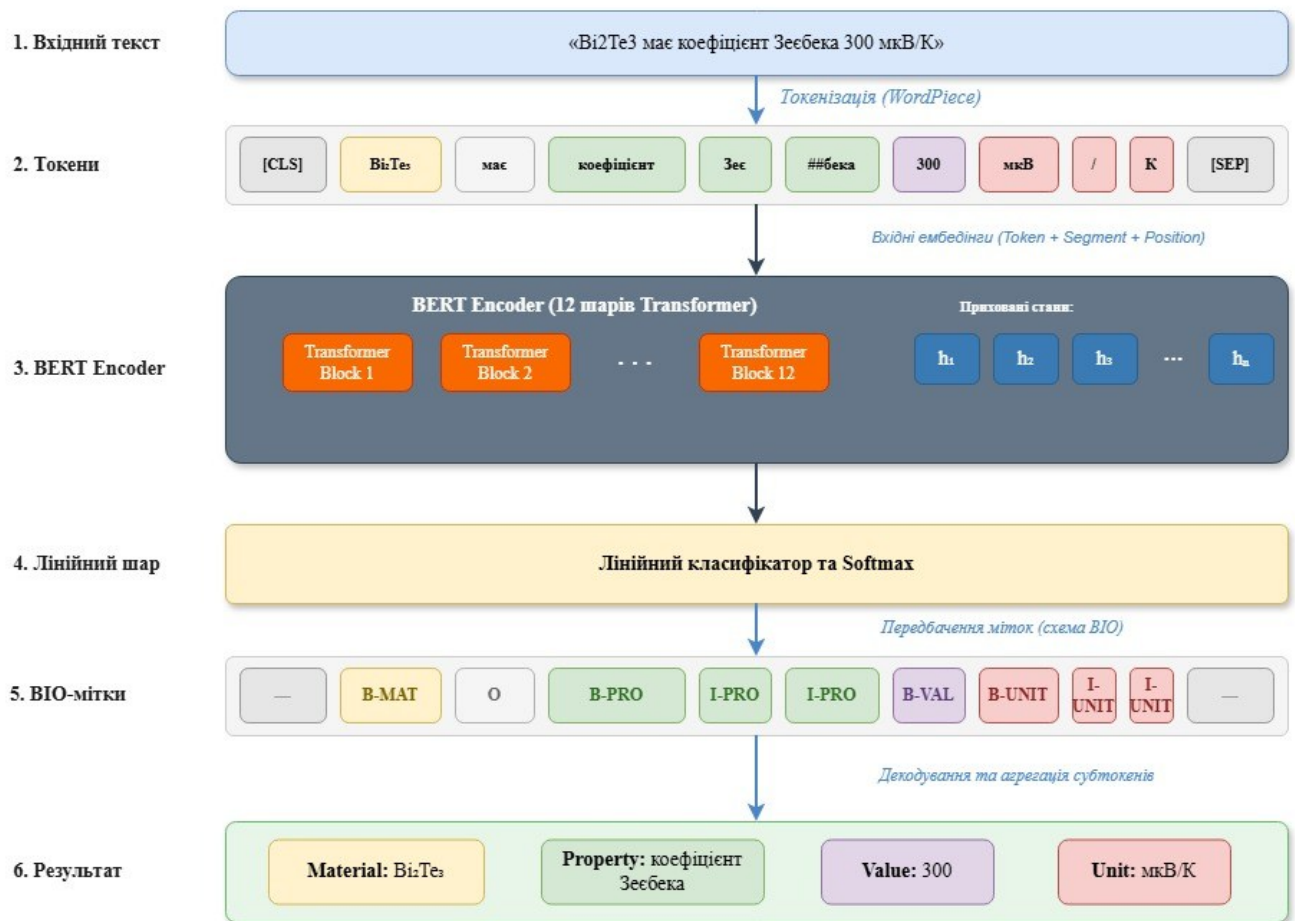


Рис. 2.8.1.1 – Процес отримання іменованих сутностей (NER) на основі моделі BERT

2.8.2. Моделі на основі архітектури Decoder-only (GPT)

Архітектура Decoder-only, найвідоміша завдяки сімейству моделей GPT (від англ. *Generative Pre-trained Transformer*), використовує авторегресивний підхід до моделювання мови. На відміну від BERT, GPT-моделі генерують текст послідовно зліва направо й використовують лише попередній контекст для передбачення наступного токена. Цей підхід, хоча й здається більш обмеженим, виявився надзвичайно ефективним під час масштабування моделей до мільярдів параметрів. Сучасні моделі цього сімейства, зокрема GPT-3 (175 мільярдів параметрів) [146], GPT-4 [147], GPT-5 [148], Llama 3 (від 1 до 405 мільярдів параметрів) [149], Mistral 7B [150], демонструють значну здатність до розуміння та генерації тексту, зокрема виконання завдань, для яких їх явно не навчали.

Ключовою перевагою великих моделей типу decoder-only є їхня здатність до навчання з малою кількістю прикладів (few-shot learning) або навіть без прикладів (zero-shot learning) [146]. Це означає, що модель може виконувати нові завдання, отримавши лише їх текстовий опис та кілька демонстраційних прикладів безпосередньо в запиті (промпті), без необхідності додаткового навчання параметрів. Цей підхід, що отримав назву «навчання в контексті» (in-context learning), є особливо корисним, за відсутності великого анотованого набору даних або коли є необхідність у швидкій адаптації системи до нового типу даних. Для вилучення термоелектричних властивостей можна сформулювати запит із кількома прикладами коректного вилучення, і модель зможе застосувати цей шаблон до нових текстів.

Для отримання структурованої відповіді від GPT-моделі про термоелектричні властивості потрібно надати моделі інструкції щодо формату виведення (наприклад, JSON-структура) та кілька прикладів коректного вилучення. Типова структура запиту охоплює системну інструкцію, опис формату виведення, 2-3

демонстраційні приклади з вхідним текстом та очікуваним результатом, а також текст для обробки. Модель генерує відповідь у заданому форматі, яку потім аналізують для отримання структурованих даних.

Експерименти показують високу точність моделей GPT для вилучення термоелектричних властивостей: у роботі Ghosh та ін. [151] багатоагентний процес на основі GPT-4.1 із zero-shot запитамі досягає $F1 = 0,91$ для термоелектричних властивостей та $F1 = 0,82$ для структурних дескрипторів на вибірці з 50 статей. Водночас моделі схильні до «галюцинацій» — генерування вигаданих даних за неоднозначного тексту, а також до підставляння типових значень для відомих матеріалів із навчального набору, що є неприпустимим для наукової бази даних.

Використання комерційних моделей через API, таких як GPT-3.5 або GPT-4, GPT-5, пов'язане зі значними фінансовими витратами під час обробки великих обсягів документів, а також із питаннями щодо конфіденційності. Вартість обробки однієї статті (5000 токенів) через API моделі GPT-4.1 становить приблизно 2 центи, що дозволяє обробити 10 000 наукових публікацій за 100 до 200 доларів США [152] станом на 2025 рік. Проте ще у 2023 році вартість була на порядок вищою. Лімітуючим фактором є передача неопублікованих результатів або даних з обмеженим доступом через зовнішні сервіси, що може бути неприйнятним із погляду інтелектуальної власності. Серед відкритих моделей сімейства decoder-only варто відзначити Llama 3 від Meta, а також Mistral від Mistral AI. Ці моделі можна розгорнути локально та донавчити на специфічних даних без передачі інформації третім сторонам. Для донавчання великих моделей застосовують методи ефективного навчання, такі як LoRA (Low-Rank Adaptation) [153] та QLoRA (Quantized LoRA) [154], що дозволяють адаптувати моделі з мільярдами параметрів на споживчих графічних прискорювачах. На рис. 2.8.2.1 наведено структуру запиту до LLM для вилучення властивостей термоелектричних матеріалів.

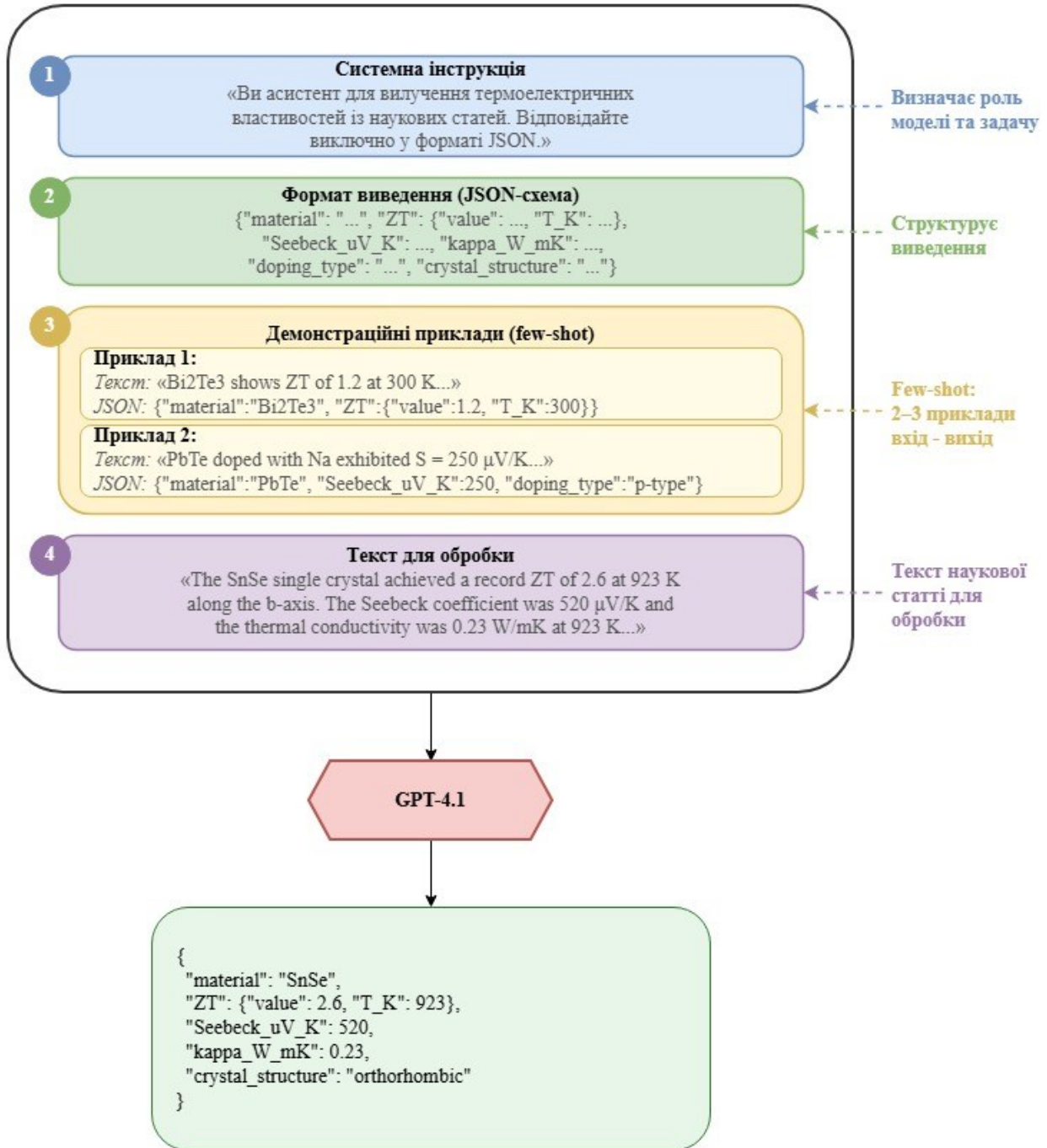


Рис. 2.8.2.1 – Структура запиту (prompt) для вилучення термоелектричних властивостей

2.8.3. Моделі на основі архітектури Encoder-Decoder (T5, BART)

Архітектура Encoder-Decoder поєднує переваги обох підходів. Енкодер формує контекстне представлення вхідного тексту з двонаправленою увагою, на відміну від BERT, який тренується на задачі маскованого передбачення токенів [155]. Декодер генерує вихідну послідовність авторегресивно, але з додатковою перехресною увагою (cross-attention) до представлення енкодера. Ця архітектура природно підходить для задач sequence-to-sequence: машинного перекладу, автоматичного реферування, відповідей на запитання та структурованого вилучення інформації.

T5 (Text-to-Text Transfer Transformer) від Google Research формулює всі задачі NLP як перетворення тексту в текст. Цей уніфікований підхід дає змогу використовувати одну архітектуру для широкого спектра задач і легко додавати нові типи сутностей шляхом зміни формату виводу.

BART (Bidirectional and Auto-Regressive Transformers) від Meta попередньо тренується шляхом відновлення пошкодженого тексту із застосуванням різних типів спотворень. Існують спроби дотренування BART на наукових корпусах (наприклад, SciBart від CoronaWhy [156]), однак, на відміну від SciBERT [142], ця модель не набула широкого практичного застосування. Перевагою encoder-decoder моделей є гнучкість формату виводу. На відміну від BERT-подібних моделей, де формат виводу обмежений або одним вектором на токен (token classification), або фіксованим фрагментом вхідного тексту, T5 та BART можуть генерувати вивід довільної структури. Це корисно для вилучення складних відношень та випадків, коли властивість виражена непрямо або потребує нормалізації. У 2020 році Raffel та ін. [157] показали, що модель T5-11B досягає результатів рівня SOTA (state-of-the-art – найкращий показник на момент публікації серед усіх відомих систем) на 18 із 24 розглянутих задач. Ці задачі охоплюють GLUE і SuperGLUE – стандартизовані набори тестів для оцінки загального розуміння мови, що включають класифікацію,

логічне виведення, відповіді на запитання, машинний переклад між англійською, німецькою, французькою та румунською мовами, а також автоматичне реферування. Такі результати підтверджують ефективність уніфікованого підходу «текст на вхід – текст на вихід» при масштабуванні моделі до 11 мільярдів параметрів.

2.8.4. Порівняльна оцінка та вибір архітектури

Для обґрунтованого вибору архітектури було проведено порівняльні експерименти на тестовому наборі даних із 1200 анотованих фрагментів термoeлектричної літератури (рис. 2.8.4.1). Набір охоплює експериментальні статті (75 %), оглядові роботи (17 %), технічні звіти та патенти (8 %), опубліковані на arXiv. Анотування виконувалося за допомогою моделі gpt-4o-mini із подальшою ручною перевіркою розміток сутностей, властивостей, числових значень, одиниць вимірювання, температури та зв'язків між ними (HAS_PROPERTY, HAS_VALUE, MEASURED_AT).

Набір розбито на навчальну, валідаційну та тестову частини у співвідношенні 70/15/15 % (840, 180 та 180 фрагментів). Для оцінки стійкості результатів використовувалась 5-кратна крос-валідація на навчально-валідаційній частині з фіксованим тестовим набором. Усі локальні моделі навчалися на GPU NVIDIA H100 80GB (256 GB RAM); час інференсу вимірювався як середнє з трьох запусків після warm-up. Для GPT-4o використовувався API OpenAI; час обробки включає мережеву затримку.

GPT-4o тестувався у режимі п'яти прикладів, відібраних із валідаційної вибірки, що покривають основні типи сутностей та зв'язків.

The image shows a screenshot of a document annotation interface. At the top, there is a sidebar with navigation tabs: #1, [()], +, koropmykola@gmail.com (4 minutes ago), gpt-prelabel-v1 (1 day ago). Below the sidebar, there are five tabs: MAT 1, PROP 2, VALUE 3, UNIT 4, and TEMP 5. The main text area contains a paragraph about Bi2Te3 materials, with various parts highlighted and labeled with terms like HAS_VALUE, HAS_PROPERTY, MEASURED_AT, and HAS_UNIT. The text is as follows:

strong ionic-covalent bonds, but bonding between the neighbouring Te1 layers is weak and of the van der Waals nature. The layered crystal structure endows strongly anisotropic TE properties. For example, the in-plane lattice thermal conductivity in Bi2Te3 single crystals is around $1.5 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, which is larger than the cross-plane thermal conductivity by a factor of 2.1.¹²² Similarly, the ratio of cross-plane electrical resistivity ($\rho_{33} \approx 1.3 \times 10^{-5} \Omega \text{ m}$) to the in-plane electrical resistivity ($\rho_{11} \approx 1.3 \times 10^{-5} \Omega \text{ m}$) is about 3.48 at 300 K.¹²³ The band structure of Bi2Te3 is quite complex. The crystal symmetry gives rise to anisotropic valleys (carrier pockets) in both the conduction and valence bands.¹²⁴ In practice, Bi2Te3-Sb2Te3 alloys (75% of Sb2Te3 alloyed with 25% of Bi2Te3) are used as the p-type leg and Bi2Te3 + 5% Bi2Se3 doped with halogen species is used as the n-type leg.¹²⁵ In general, commercial Bi2Te3-based materials are synthesised by the directional solidification processes, such as zone melting (ZM) or the Bridgman growth. The multi-valley character of the band structure ensures that Bi2Te3-based materials possess excellent, albeit anisotropic, electronic transport properties. Alloying introduces numerous point defects which, together with the native defects of the antisite character and vacancies, scatter lattice phonons and substantially reduce the lattice thermal conductivity.² Bi2Te3 materials were identified as a prospective TE in the mid-1950s by Goldsmid,¹ and the beneficial effect of alloying with Sb2Te3 and Bi2Se3 was demonstrated by the Ioffe's team.² The early promising values of the figure of merit near unity have not been improved significantly until recently when efforts have concentrated on tuning the microstructure by developing alternative synthesis routes. Owing to the exceptionally rapid solidification in the melt-spinning (MS) process, nanocrystalline domains and amorphous phases form in the obtained melt-spun ribbons prepared from stoichiometric melts (Fig. 14b-f). Following a quick sintering process, using spark-plasma sintering (SPS), numerous 10–20 nm nanograins are formed. 14 a Crystal structure of Bi2Te3. b Microstructure of Bi2(Sb,Te)3-based materials prepared by BM. c Coherent grain boundaries between nanocrystals in melt-spun Bi2(Sb,Te)3-based materials. d Grain boundaries and e dense dislocation arrays in grain boundaries of melt-spun Bi2(Sb,Te)3 prepared from materials containing excess of Te. f Nano-SiC grains in Bi2(Sb,Te)3-based materials. (Taken from Refs.29,126–128) 15 a Crystal structure of PbX (X = Te, Se and S). b Temperature dependence of the TE figure of merit zT of PbTe-based materials. (Taken from Refs.68,79,145,148,153,158) Shi et al. Recent advances in high-performance bulk TE materials 12 International Materials Reviews 2016 Downloaded by [University of Nebraska, Lincoln] at 00:20 03 June 2016

Рис. 2.8.4.1 – Приклад анотованого фрагменту наукової статті у Label Studio після попереднього встановлення міток за допомогою моделі GPT-4o-mini

Таблиця 2.8.4.1

Конфігурація гіперпараметрів для подальшого навчання моделі на спеціалізованій літературі

Назва моделі	Швидкість навчання	Розмір батча	Кількість епох
Bert-base	2×10^{-5}	16	10
SciBERT	2×10^{-5}	16	10
MatSciBERT	2×10^{-5}	16	10
T5-base	3×10^{-4}	8	15

Таблиця 2.8.4.2

Порівняння на тестовій вибірці ефективності мовних моделей для збору термоелектричних властивостей матеріалів із наукової літератури

Мовна модель	F1 для задачі NER	F1 для задачі RE	σ Ner	σ RE	Час обробки одного фрагменту
Bert-base	0,63	0,65	$\pm 0,0045$	$\pm 0,0134$	52 мс
SciBERT	0,67	0,7	$\pm 0,0031$	$\pm 0,0118$	58 мс
MatSciBERT	0,72	0,76	$\pm 0,0037$	$\pm 0,0098$	62 мс
GPT-4o	0,81	0,82	-	-	3450 мс
T5	0,51	0,65	$\pm 0,0345$	$\pm 0,0223$	180 мс

Результати порівняння демонструють низку важливих закономірностей. MatSciBERT забезпечує найкращу точність NER серед моделей, які можуть

працювати на локальному обладнанні, за високої швидкості виконання запитів (62 мс). Це підтверджує важливість предметної адаптації: модель, попередньо навчена на матеріалознавчих текстах, значно перевершує як загальні моделі (BERT-base), так і наукові моделі ширшого профілю (SciBERT) у специфічному завданні вилучення термоелектричних властивостей.

GPT-4o показує порівнянні результати для NER ($F1 = 0,81$) та найкращі для вилучення відношень ($F1 = 0,82$), що свідчить про перевагу великих генеративних моделей у завданнях, які потребують глибокого розуміння контексту. Однак GPT-4o залежить від зовнішнього API, що обмежує його застосування для масової обробки документів і має потенційні ризики для конфіденційності.

На основі проведеного аналізу для базової реалізації системи було обрано MatSciBERT як основну модель для NER та встановлення відношень між сутностями завдяки найвищій точності й ефективності. Для задачі RE над MatSciBERT додано класифікаційну «голову», яка визначає тип зв'язку між парами виявлених сутностей із використанням маркерної схеми, де спеціальні токени [E1], [/E1], [E2], [/E2] позначають межі сутностей у вхідному тексті. Для складних або неоднозначних випадків, виявлених на етапі валідації, передбачена можливість залучення GPT-4o або інших сучасних LLM як допоміжних моделей через API для уточнення результатів або у застосуваннях, де немає ризику для конфіденційності.

2.9. Навчання моделей на літературних даних

2.9.1. Формування анотованого набору даних

Якість моделі, яка пройшла додаткове навчання на спеціалізованій літературі, безпосередньо залежить від обсягу та достовірності анотованого набору даних. Формування такого набору для задач NER та RE є трудомістким процесом, що

потребує поєднання автоматизованих інструментів та експертної перевірки. Для побудови вибірки було обрано дворівневий підхід, що поєднує автоматичну попередню розмітку та ручне редагування.

На першому етапі з наукових публікацій на сервісі arXiv за термоелектричною тематикою відібрано 6000 текстових фрагментів завдовжки від 100 до 500 токенів, кожен із яких містить щонайменше одну згадку про термоелектричні властивості. Попередню розмітку всіх 6000 фрагментів виконано за допомогою моделі GPT-4o-mini, яка автоматично ідентифікувала сутності та зв'язки відповідно до визначеної схеми анотації.

На другому етапі попередня розмітка проходила ручну перевірку та коригування на платформі Label Studio (рис. 2.8.4.1) [158] з налаштованим інтерфейсом для одночасного маркування сутностей та відношень.

Процес перевірки та виправлень виконувався поетапно. Спочатку перевірено 1200 фрагментів, які використовували для порівняльної оцінки архітектур мовних моделей (розділ 2.8.4). Після обрання MatSciBERT як оптимальної моделі перевірку було завершено для всіх 6000 фрагментів.

Під час перевірки виправлялись помилки розмітки GPT-4o-mini, зокрема неточні межі сутностей, пропущені зв'язки та хибні спрацьовування. Загалом приблизно 17 % розміток GPT-4o-mini потребували коригування. Фрагменти, що не містили релевантних термоелектричних даних або мали неоднозначну розмітку, яку не вдалось розв'язати, було вилучено з набору.

Фінальний набір даних містить 6000 перевірених фрагментів, розбитих на навчальну (70 %, 4200 фрагментів), валідаційну (15 %, 900 фрагментів) та тестову (15 %, 900 фрагментів) частини зі стратифікацією за типами публікацій. Тестова вибірка для оцінки фінальної моделі складається з 600 фрагментів, зібраних та анотованих окремо від інших наборів за аналогічною схемою.

Схема анотації охоплює сім класів сутностей для задачі NER, наведених у

табл. 2.11.1.1. Порівняно з базовими п'ятьма класами (MATERIAL, PROPERTY, VALUE, UNIT, TEMPERATURE), що використовувалися під час порівняння архітектур у розділі 2.8.4, схему розширено класами DOPANT та METHOD. Ці додаткові класи дозволяють фіксувати інформацію про легувальні домішки та методи синтезу або вимірювання – параметри, важливі для відтворюваності результатів та повноти опису матеріалів у базі даних. Увесь процес анотації наведено на рис. 2.9.1.1.

Таблиця 2.9.1.1

Схема анотації класів та сутностей для завдання NER

Клас сутності	Опис
MATERIAL	Назва або хімічна формула матеріалу
PROPERTY	Тип властивості (наприклад, Seebeck coefficient, electrical conductivity, thermal conductivity, ZT , power factor)
VALUE	Числове значення властивості
UNIT	Одиниця вимірювання
TEMPERATURE	Температура вимірювання
DOPANT	Легуюча домішка та її концентрація
METHOD	Метод синтезу або вимірювання

Анотація відношень полягає в маркуванні пар сутностей у межах одного речення або сусідніх речень, що відповідає типовим шаблонам подання даних у науковій літературі. До прикладу, зв'язок «матеріал – властивість» задається міткою HAS_PROPERTY, відповідно зв'язок «властивість – значення» – HAS_VALUE, а зв'язок «властивість – температура» – MEASURED_AT.

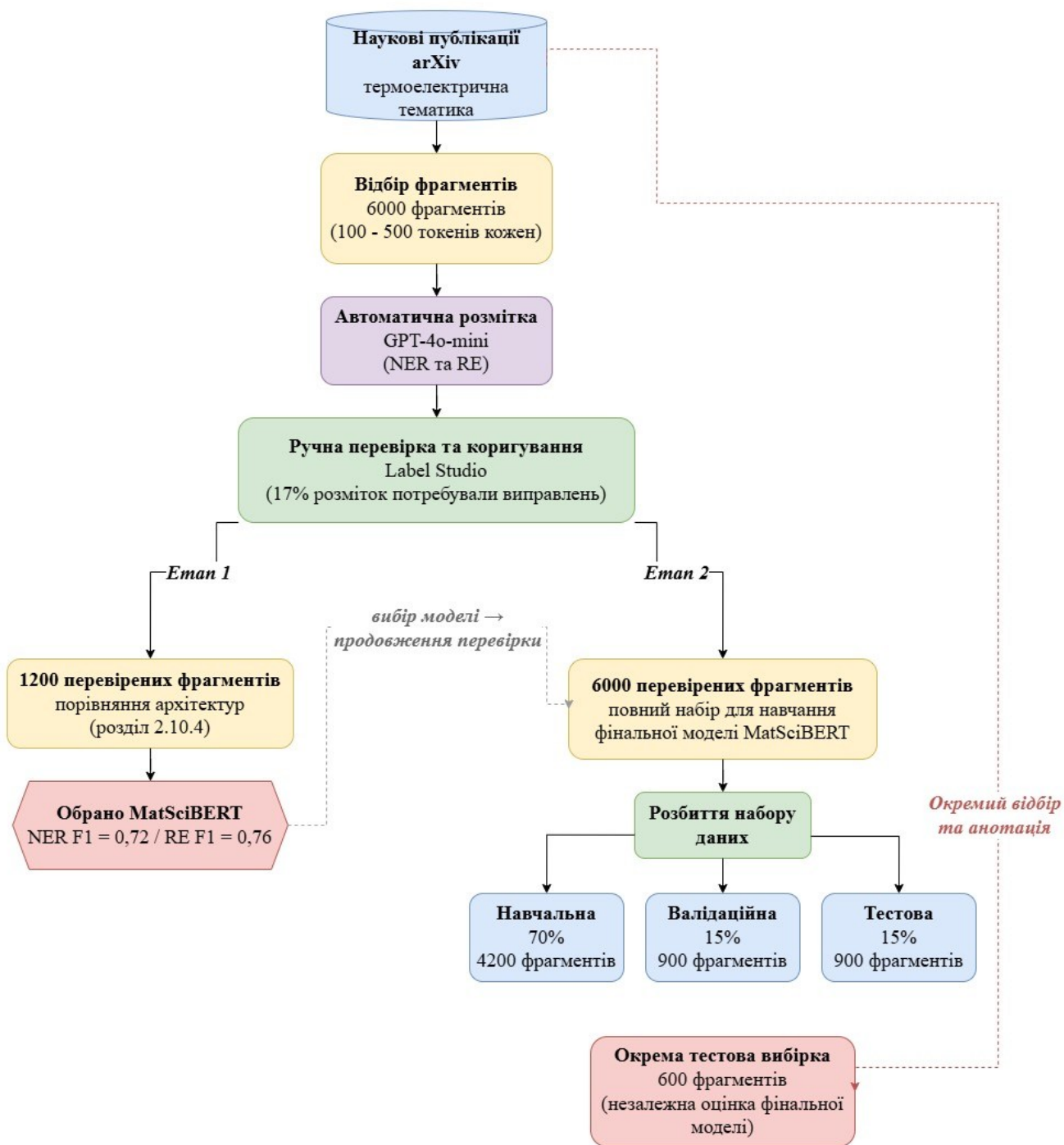


Рис. 2.9.1.1 – Схема підготовки навчальних вибірок даних

2.9.2. Додаткове навчання MatSciBERT для задач NER та класифікаційної голови для встановлення зв'язків між сутностями

Додаткове навчання моделі MatSciBERT для задачі NER реалізовано за стандартною схемою класифікації токенів. На останній прихований шар MatSciBERT додано лінійний класифікаційний шар, який передбачає мітку класу для кожного токена за схемою маркування BIO (розділ 2.8.1). Гіперпараметри донавчання обрано на основі пошуку за сіткою (grid search) [159] на валідаційній вибірці (15 %, 900 фрагментів). Оптимальна конфігурація відповідає параметрам, наведеним у таблиці 2.8.4.1: швидкість навчання 2×10^{-5} із косинусним зменшенням швидкості навчання, розмір пакета 16, кількість епох – 10 з ранньою зупинкою за відсутності поліпшення валідаційної метрики протягом трьох епох. Додатково застосовано регуляризацію методом виключення нейронів (dropout) із коефіцієнтом 0,1 та згасання ваг (weight decay) 0,01. Для обробки текстів, довших за максимальну довжину послідовності (512 токенів), застосовано метод ковзного вікна (sliding window) з перекриттям 128 токенів. Передбачення для токенів у зонах перекриття об'єднуються через усереднення ймовірностей.

Для розширення тренувального набору застосовано техніку збагачення даних (data augmentation) двох типів: синонімічну заміну термінів (наприклад, «thermal conductivity» – «heat conductivity», «Seebeck coefficient» – «thermopower») та перестановку пар сутностей у реченні зі збереженням семантичних зв'язків. Кожен тип аугментації генерує один додатковий приклад на кожен оригінальний фрагмент, що збільшує ефективний розмір тренувального набору приблизно втричі. Навчання виконувалось у середовищі Google Colab Pro з GPU NVIDIA H100 80 GB із використанням тренування зі змішаною точністю (mixed precision, FP16).

Задачу вилучення відношень реалізовано як класифікацію пар сутностей на основі тієї самої моделі MatSciBERT, що використовується для NER. Як описано в

розділі 2.8.4, над енкодером MatSciBERT додано окрему класифікаційну голову для RE, яка визначає тип зв'язку між парами виявлених сутностей. Використовується маркерна схема, де спеціальні токени [E1], [/E1], [E2], [/E2] позначають межі двох сутностей у вхідному тексті. Класифікатор приймає конкатенацію прихованих станів маркерних токенів та визначає тип зв'язку: HAS_PROPERTY, HAS_VALUE, MEASURED_AT або NO_RELATION. На етапі підготовки даних для навчання додаткової голови з анотованого набору генеруються всі можливі пари сутностей у межах одного речення або сусідніх речень. Позитивні приклади містять анотовані зв'язки, негативні – пари без зв'язків, де вага класу NO_RELATION знижена пропорційно до його частки у наборі за допомогою зваженої функції втрат (weighted cross-entropy). Гіперпараметри RE-голови: швидкість навчання 1×10^{-4} , розмір пакета – 16, 10 епох із ранньою зупинкою. Вищу швидкість навчання для RE-голови обрано з огляду на те, що ваги енкодера зафіксовані, а голова навчається з випадкової ініціалізації. Навчання NER-голови та RE-голови виконується послідовно: спочатку навчається NER-голова на повному наборі, потім – RE-голова з використанням ознак енкодера, отриманих після NER-навчання. Методологія додаткового навчання MatSciBERT наведено на рис. 2.9.2.1.

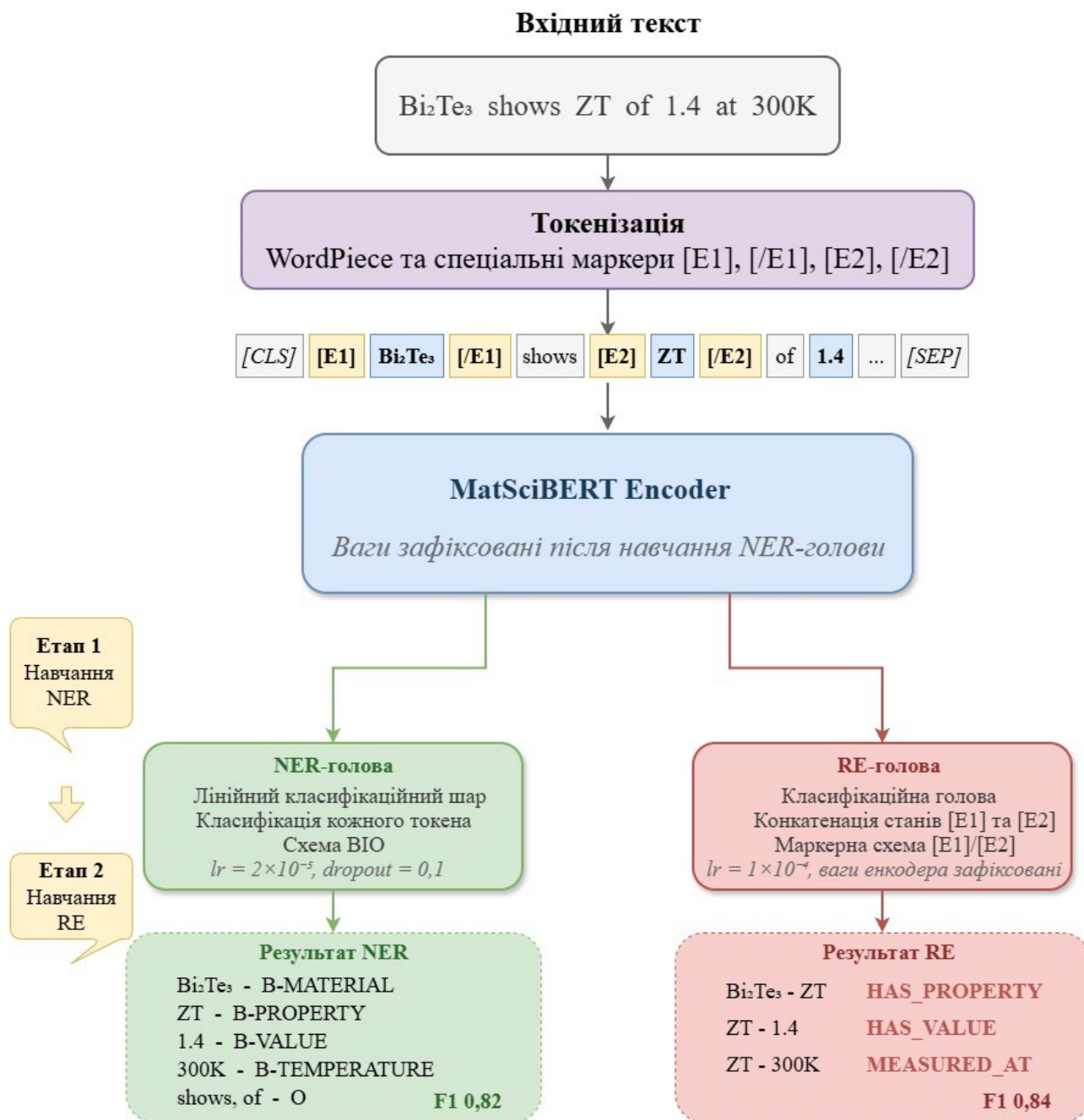


Рис. 2.9.2.1 – Архітектура моделі MatSciBERT із двома класифікаційними головами для задач NER та RE

2.9.3. Оцінка якості додатково навчених моделей та їх валідація

Оцінка якості фінальної моделі, навченої на повному наборі з 6000 верифікованих фрагментів, виконана на окремій тестовій вибірці з 600 фрагментів, що не перетинається ні з навчальним набором, ні з тестовою вибіркою зі 180 фрагментів, яку використовували для порівняння архітектур у розділі 2.8.4. Це забезпечує незалежну оцінку якості фінальної моделі без ризику витоку даних.

Для задачі NER метрики обчислюються на рівні сутностей, де сутність вважається правильно розпізнаною лише за умови збігу і класу, і меж. Фінальна модель досягає $F1 (NER) = 0,82$ на тестовій вибірці з 600 фрагментів. Для задачі RE класифікаційна голова MatSciBERT досягає $F1 (RE) = 0,84$. Слід зазначити, що оцінка на 6000 фрагментах виконана за розширеною схемою із сімома класами, тоді як оцінка на 1200 – за п'ятьма класами, що робить приріст ще вагомим. Порівняння з результатами, отриманими на етапі вибору архітектури (табл. 2.8.4.2), наведено в табл. 2.9.3.1.

Таблиця 2.9.3.1

Порівняння результатів MatSciBERT на етапі вибору архітектури
(1200 фрагментів) та після додаткового навчання на повному наборі
(6000 фрагментів)

Конфігурація навчання	F1 NER	F1 RE	Тестова вибірка
MatSciBERT (1200)	0,72	0,76	180
MatSciBERT (6000)	0,82	0,84	600

Збільшення обсягу навчальних даних у п'ять разів (із 1200 до 6000 фрагментів) забезпечило приріст F1 NER на 0,10 в. п. (із 0,72 до 0,82) та F1 RE на 0,08 в. п. (із 0,76 до 0,84). Цей приріст підтверджує, що модель не досягла насичення за обсягом даних на 1200 фрагментах і розширення набору було виправданим. Найбільший

внесок у покращення якості забезпечили додаткові приклади для менш представлених класів (DOPANT, METHOD) та складних випадків вилучення відношень MEASURED_AT із віддаленим контекстом.

Детальний аналіз помилок на тестовій вибірці виявляє характерні закономірності. Для NER основні труднощі виникають під час розпізнавання складних хімічних формул із багаторівневими індексами, відокремлення властивостей матеріалу від параметрів приладу чи установки, а також під час обробки скорочень та нестандартних позначень, не наведених у навчальних даних. Для RE найскладнішим залишається тип відношення MEASURED_AT, коли температура вимірювання вказана у віддаленому контексті (через кілька речень) або неявно (наприклад, «at room temperature» без числового значення 300 K).

Для перевірки фізичної коректності вилучених даних реалізовано набір валідаційних правил: коефіцієнт Зеєбека для напівпровідників зазвичай перебуває в діапазоні від -500 до +500 мкВ/К; теплопровідність не може бути від'ємною; значення ZT для сучасних матеріалів рідко перевищує 3,0; електропровідність напівпровідників зазвичай не перевищує 10^5 См/м. Записи, що порушують ці правила, автоматично позначаються міткою «потребує перевірки» (requires_review) для подальшої ручної модерації. Для складних або неоднозначних випадків, виявлених на етапі валідації, передбачена можливість залучення GPT-4o або інших сучасних LLM як допоміжних моделей через API для уточнення результатів у застосуваннях, де немає ризику для конфіденційності неопублікованих даних.

2.10. Алгоритм збору даних із наукової літератури

2.10.1. Інтеграція модулів в єдину систему

У попередніх розділах описано окремі компоненти системи: модуль розбору

PDF-документів та OCR (розділ 2.5), фізичну модель термоелектричних властивостей і перелік цільових параметрів (розділ 2.6), схему бази даних (розділ 2.7) та додатково навчену модель MatSciBERT із NER-головою та RE-головою (розділ 2.9). У цьому розділі описано інтеграцію цих компонентів у єдиний автоматизований процес обробки наукових документів.

Оркестрацію етапів реалізовано за допомогою фреймворку Apache Airflow, який забезпечує надійне виконання завдань, моніторинг прогресу, обробку помилок та автоматичний повторний запуск невдалих кроків, на рис. 2.10.1.1 наведено візуальний інтерфейс та розроблений процес збору даних із термоелектричної наукової літератури.

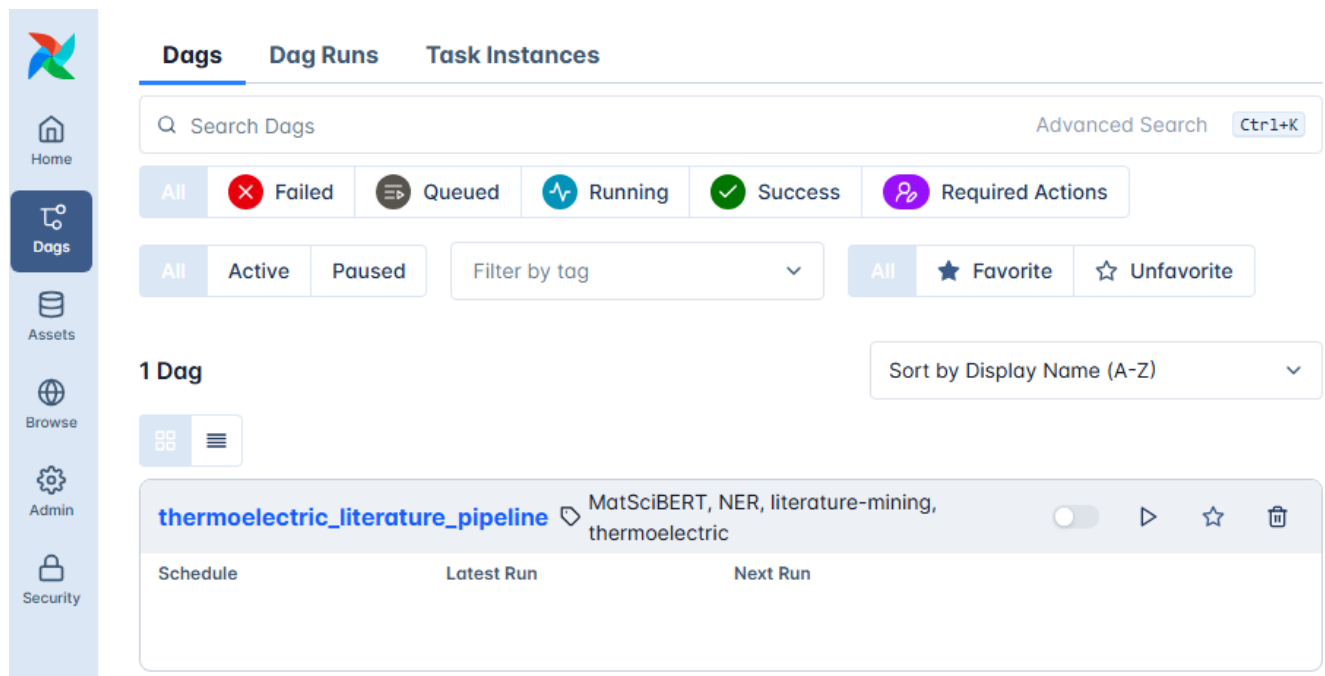


Рис. 2.10.1.1 – Візуальний інтерфейс оркестратора Apache Airflow

Кожен функціональний модуль процесу реалізовано як окремий Docker-контейнер, що забезпечує ізоляцію залежностей між компонентами (наприклад,

PyTorch для ML-моделей, PyMuPDF для роботи з PDF, pymatgen для хімічної інформатики) та горизонтальне масштабування системи шляхом додавання робочих вузлів.

Послідовність обробки документа складається з дев'яти етапів, що утворюють спрямований ациклічний граф (DAG) в термінології Airflow (рис. 2.10.1.2):

1. Приймання документа – завантаження PDF-файлу, перевірка цілісності та вилучення метаданих (DOI, заголовки, автори).

2. Розбір документа – вилучення тексту, таблиць та зображень засобами, описаними в розділі 2.5 (PyMuPDF, Table Transformer, Tesseract, TrOCR).

3. Сегментація та фільтрація – розбиття тексту на абзаци, ідентифікація секцій статті, вилучення нерелевантних секцій (подяки, бібліографія, заяви про конфлікт інтересів).

4. Попередній відбір – класифікація абзців моделлю DistilBERT (деталі у підрозділі 2.10.2).

5. Розпізнавання сутностей – застосування NER-голови MatSciBERT (розділ 2.9.2).

6. Вилучення відношень – застосування RE-голови MatSciBERT (розділ 2.9.2).

7. Нормалізація – стандартизація хімічних формул та одиниць вимірювання (деталі у підрозділі 2.10.4).

8. Валідація – перевірка фізичної правдоподібності значень за правилами, описаними в розділі 2.10.4.

9. Збереження – запис структурованих даних до бази даних PostgreSQL відповідно до схеми, описаної в розділі 2.7.

Етапи 1–6 виконуються послідовно для кожного документа. Етапи 7–9 виконуються послідовно для кожного фрагменту, але паралельно для різних фрагментів одного документа. Для різних документів увесь процес виконується паралельно завдяки механізму робочих вузлів (workers) Airflow.

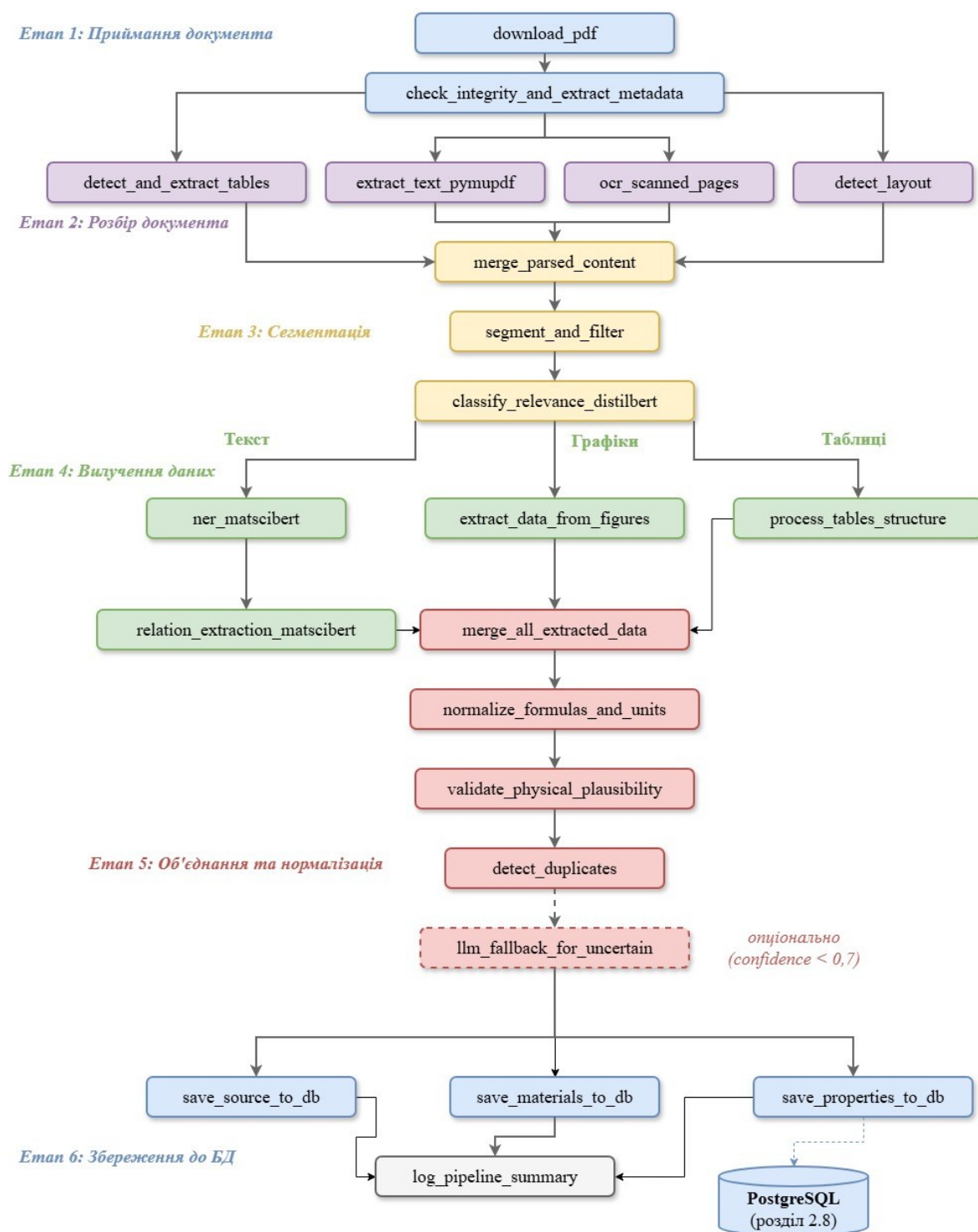


Рис. 2.10.1.2 – Структура спрямованого ациклічного графа обробки наукового документа в Apache Airflow

2.10.2. Попередній відбір релевантних абзаців

Не всі абзаци наукової статті містять числові дані про термоелектричні властивості. Застосування MatSciBERT до кожного абзацу без попередньої фільтрації є надмірно ресурсомістким: типова стаття містить 50–100 абзаців, із яких лише 10–20 містять релевантні дані. Для скорочення обсягу обчислень на етапі 4 процесу реалізовано бінарну класифікацію абзаців на релевантні чи нерелевантні (relevant або irrelevant) за допомогою моделі DistilBERT.

DistilBERT обрано завдяки її компактності: модель удвічі менша за BERT-base (66М проти 110М параметрів) при збереженні 97 % її якості на загальних задачах. Оскільки задача попередньої фільтрації є бінарною класифікацією з відносно простими ознаками (наявність числових значень, одиниць вимірювання, назв матеріалів), повна потужність MatSciBERT тут не є необхідною, а швидкість фільтрації є критичною для загальної пропускну здатності системи.

Модель додатково навчена на підмножині анотованого набору даних (розділ 2.9.1), де кожен фрагмент отримав бінарну мітку: relevant (містить щонайменше одну трійку «матеріал – властивість – значення») або irrelevant. Поріг класифікації підібрано на валідаційній вибірці з пріоритетом повноти ($\text{Recall} > 0,95$), щоб мінімізувати втрату релевантних абзаців навіть ціною пропускання деякої кількості нерелевантних. Така конфігурація забезпечує, що менше 5 % релевантних абзаців відфільтровуються на цьому етапі.

2.10.3. Обробка табличних даних

Як зазначено в розділі 2.5.1, приблизно 65 % числових значень термоелектричних властивостей міститься в таблицях. Виявлення таблиць у PDF-документах виконується засобами Table Transformer (розділ 2.5.1). Після

ідентифікації таблиці виконується її семантична інтерпретація, специфічна для термоелектричного домену, яка описана нижче.

Структурний аналіз таблиці полягає у визначенні ролі заголовків рядків та стовпців. Типова структура термоелектричної таблиці така: перший стовпець містить назви зразків або матеріалів, заголовок кожного наступного стовпця вказує властивість (S , σ , κ , ZT тощо) з одиницями вимірювання, а комірки містять числові значення. Для автоматичного розпізнавання типу властивості в заголовках таблиць реалізовано окрему класифікаційну модель на основі DistilBERT, навчену на наборі заголовків термоелектричних таблиць. Модель класифікує заголовок до одного з класів: SEEBECK, CONDUCTIVITY, THERMAL_CONDUCTIVITY, ZT , TEMPERATURE, COMPOSITION, OTHER.

Окрему увагу приділено обробці таблиць із температурною залежністю властивостей, де структура відрізняється від типової: рядки відповідають різним температурам, а стовпці – різним властивостям або зразкам. Для розрізнення цих двох типів таблиць класифікатор аналізує вміст першого стовпця: якщо він містить переважно числові значення з одиницями температури (K, °C), таблиця інтерпретується як температурна залежність.

Після семантичної інтерпретації кожна комірка перетворюється на структурований запис, що містить матеріал (із заголовка рядка), тип властивості (із заголовка стовпця), числове значення (із комірки) та температуру (із контексту таблиці або рядка). Цей підхід дозволяє обійти етапи NER та RE для табличних даних, оскільки семантична структура таблиці вже кодує зв'язки між сутностями.

2.10.4. Обробка даних із графіків та нормалізація даних

Температурні залежності термоелектричних властивостей часто наведені у вигляді графіків, що потребує спеціалізованого підходу до вилучення числових

даних. На рис. 2.10.4.1 зображено схему роботи алгоритму для збору параметрів із графіків. Для обробки графіків реалізовано багатоетапний процес на основі моделі YOLOv8, додатково навченої на наборі анотованих зображень наукових графіків.

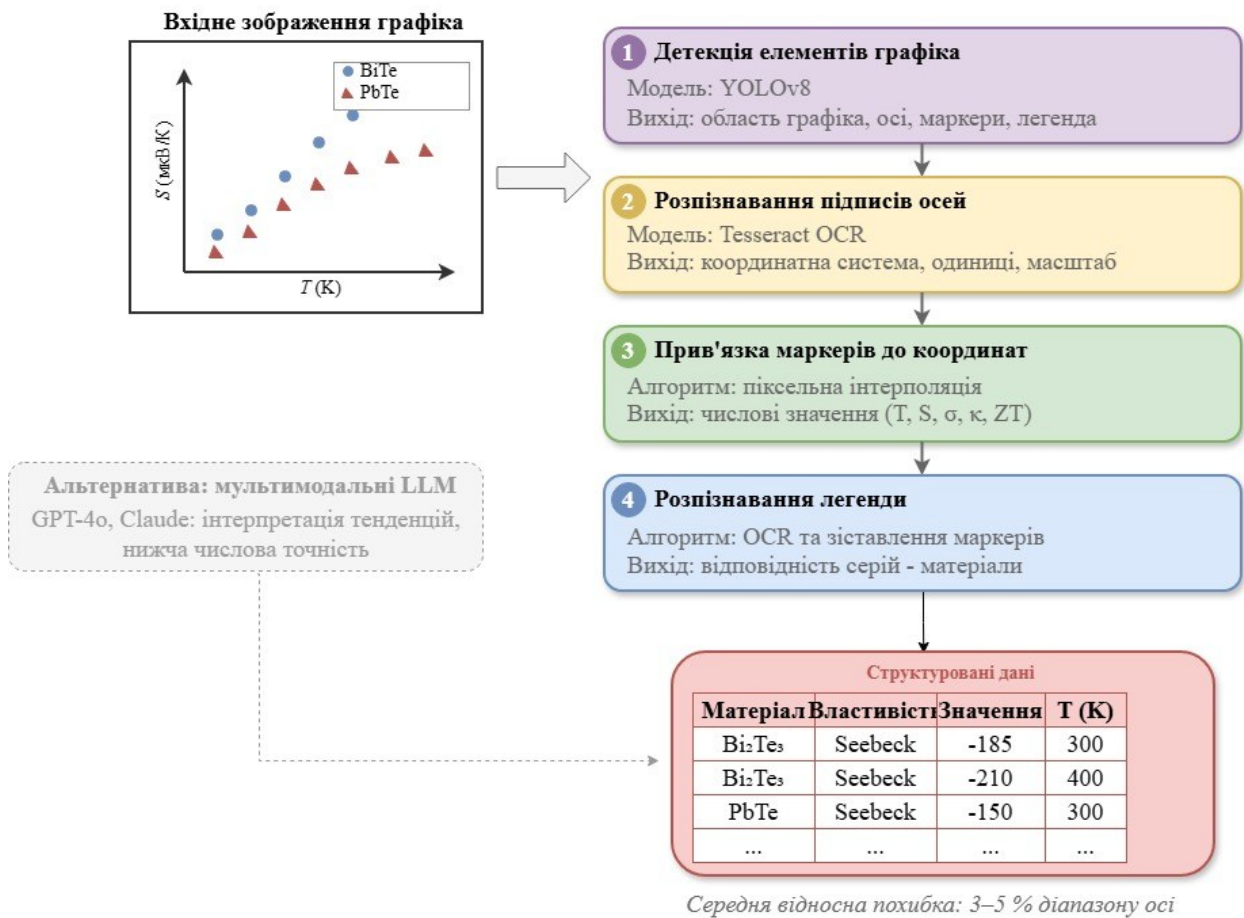


Рис. 2.10.4.1 – Етапи вилучення числових даних із графіків наукових публікацій

На першому етапі YOLOv8 виявляє область графіка, осі, маркери даних та легенду. На другому етапі OCR (Tesseract) розпізнає підписи осей та мітки масштабу, що дозволяє побудувати координатну систему. На третьому етапі виявлені маркери даних (точки, лінії) прив'язуються до координатної системи для отримання числових значень. На четвертому етапі розпізнається легенда для

визначення відповідності кожного набору даних конкретному матеріалу.

Альтернативним підходом є використання мультимодальних моделей (GPT-4o, Claude) для прямої інтерпретації графіків. Цей підхід демонструє нижчу точність вилучення числових значень, ніж спеціалізований процес, але може бути корисним для загальної інтерпретації тенденцій. Точність вилучення даних із графіків оцінюється шляхом порівняння з табличними даними тієї самої публікації (якщо вони доступні). Середня відносна похибка для координат точок становить 3–5 % від діапазону осі.

Модуль нормалізації забезпечує узгодженість даних у базі, описаній у розділі 2.7. Нормалізація охоплює три аспекти: хімічні формули, одиниці вимірювання та фізичну валідацію. Нормалізація хімічних формул виконується бібліотекою `rumatgen` (розділ 2.7): елементи впорядковуються за електронегативністю згідно з конвенцією IUPAC, індекси зводяться до найменших цілих чисел, а для сполук зі змінним складом зберігається параметр x . Одиниці вимірювання конвертуються до стандартизованих, визначених у розділі 2.6: коефіцієнт Зеєбека – мкВ/К, електропровідність – См/м, теплопровідність – Вт/(м·К), температура – К.

Валідація фізичної правдоподібності виконується за правилами, описаними в розділі 2.10.3. Додатково на цьому етапі реалізовано виявлення дублікатів: система перевіряє, чи не було вже збережено ідентичне значення для того самого матеріалу, властивості та температури з іншого джерела. У разі виявлення дублікатів зберігаються обидва записи з відповідними посиланнями на джерела, що дозволяє оцінити узгодженість результатів різних дослідницьких груп.

Для фрагментів із низькою впевненістю моделі ($\text{confidence} < 0,7$) передбачена можливість залучення GPT-4o через API для верифікації результатів у застосуваннях, де немає ризику для конфіденційності неопублікованих даних. На рис. 2.10.4.2 наведено результати виконання процесу вилучення властивостей

термоелектричних матеріалів для одного наукового документа.

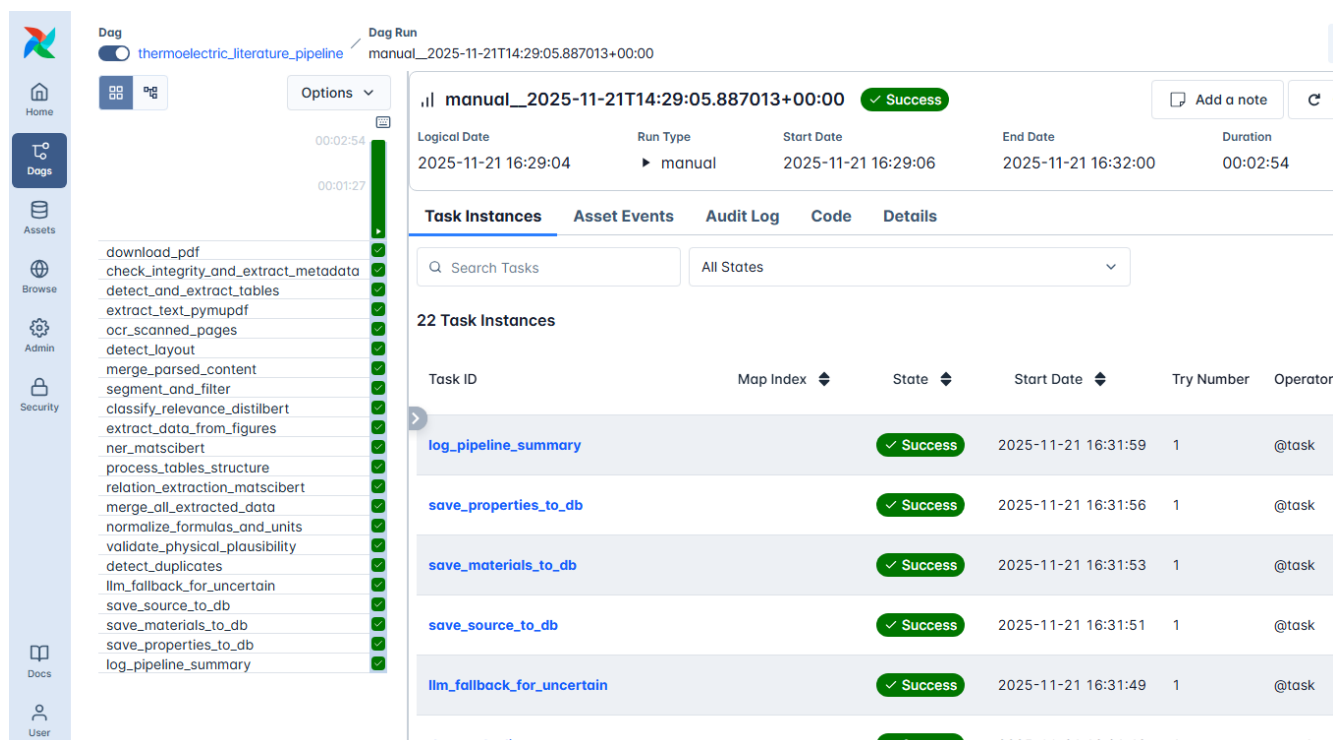


Рис. 2.10.4.2 – Візуальний інтерфейс оркестратора Apache Airflow із результатами виконання DAG обробки наукового документа

На рис. 2.10.4.2 наведено вебінтерфейс оркестратора Apache Airflow із результатами успішного виконання DAG «thermoelectric_literature_pipeline». Ліворуч відображено список із 22 задач (tasks) у порядку виконання від download_pdf до log_pipeline_summary, усі зі статусом Success (зелені позначки). Праворуч розташована таблиця Task Instances із деталями: часом запуску, статусом та номером спроби. Запуск виконано вручну, загальна тривалість обробки одного документа – 2 хвилини 54 секунди.

2.11. Технічна реалізація системи та оцінка продуктивності

Систему реалізовано мовою програмування Python 3.10 із використанням сучасних бібліотек для машинного навчання та обробки даних. Основу становить фреймворк PyTorch 2.0 для реалізації та навчання нейронних мереж. Бібліотека Transformers від Hugging Face надає імплементації попередньо натренованих мовних моделей, зокрема MatSciBERT та DistilBERT, а також інструменти для їхнього донавчання. Для обробки PDF-документів використовуються бібліотеки PyMuPDF, pdfplumber та pdf2image. OCR забезпечується інтеграцією з Tesseract через pytesseract та моделлю TrOCR для рукописного тексту. Виявлення таблиць реалізовано з використанням моделі Table Transformer із пакета Detectron2. Хімічна інформатика реалізована за допомогою бібліотеки rumatgen для роботи з хімічними формулами та структурами. База даних побудована на PostgreSQL 15. Керування процесом обробки реалізовано за допомогою Apache Airflow 3, а контейнеризацію – засобами Docker. REST API реалізовано на основі FastAPI з документацією OpenAPI.

Програму організовано за модульним принципом, де кожен функціональний компонент є окремим Python-пакетом. Основні модулі: ingestion (завантаження документів із різних джерел), parsing (розбір PDF, таблиць та графіків), models (реалізації та обгортки для ML-моделей), extraction (NER та вилучення відношень), normalization (нормалізація та валідація даних), database (ORM-моделі та робота з PostgreSQL), api (REST API на FastAPI). Також проєкт містить визначення DAG для Apache Airflow, конфігураційні файли у форматі YAML, а також модульні й інтеграційні тести.

Тестування продуктивності виконано в середовищі Google Colab Pro з GPU NVIDIA H100 80 GB та 256 GB RAM (Random Access Memory). Система забезпечує пропускну здатність 25 документів на годину для типових наукових статей обсягом

8–15 сторінок. Профілювання основних етапів обробки наведено на рис. 2.11.1.

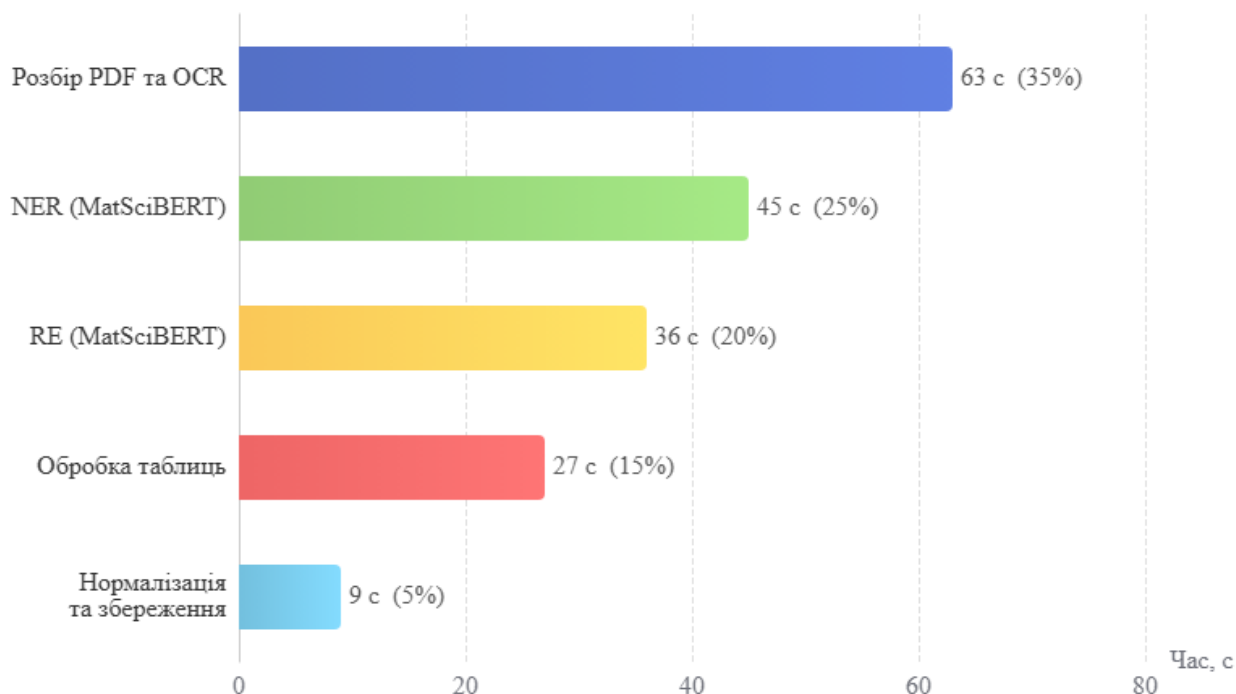


Рис. 2.11.1 – Профілювання часу обробки за етапами
(середнє для статті обсягом 12 сторінок)

Найбільш затратним за часом етапом є розбір PDF та OCR (35 % загального часу), що зумовлено необхідністю обробки зображень сторінок для виявлення таблиць та розпізнавання сканованих фрагментів. Горизонтальне масштабування досягається додаванням робочих вузлів (workers) у кластер Airflow, що дозволяє збільшувати пропускну здатність пропорційно кількості вузлів.

Висновки до розділу 2

1. На основі аналізу літературних джерел показано, що фрагментарність,

неструктурованість та вузька спеціалізація наявних даних про термоелектричні матеріали на основі Bi–Te є основними обмеженнями для широкого застосування методів машинного навчання у термоелектричному матеріалознавстві. Обґрунтовано необхідність створення спеціалізованої системи автоматизованого збору даних (data extraction) та запропоновано архітектуру інтегрованої системи, що охоплює повний цикл дослідження і складається з п'яти функціональних модулів.

2. Побудовано фізичну та комп'ютерну моделі гарячої екструзії термоелектричних матеріалів на основі Bi–Te у середовищі COMSOL Multiphysics 6.2. За результатами параметричного розрахунку (243 ітерації) встановлено домінуючий вплив швидкості деформації на силу екструзії, що дозволило визначити межі стабільності процесу та сформувати базу синтетичних даних для подальшого навчання прогностичних моделей.
3. На основі фізичної моделі добротності ZT та результатів комп'ютерного моделювання екструзії визначено структуру цільових ознак для системи збору даних. Ця структура поєднує термоелектричні параметри (коефіцієнт Зеєбека, електропровідність, теплопровідність) з технологічними характеристиками режимами синтезу, що є необхідною умовою для побудови мультимодальних прогностичних моделей.
4. Виконано порівняльний аналіз п'яти архітектур мовних моделей та встановлено, що предметна адаптація (domain adaptation) є визначальним фактором для ефективного вилучення термоелектричних параметрів.
5. Встановлено, що збільшення обсягу навчальних даних у 5 разів (зі 1200 до 6000 фрагментів) забезпечує приріст F1 (NER) на 10 в.п. (з 0,72 до 0,82) та F1 (RE) на 8 в.п. (з 0,76 до 0,84). Це свідчить про відсутність ефекту насичення моделі на початковому обсязі даних і підтверджує доцільність подальшого розширення навчального набору для підвищення точності екстракції даних.

6. Реалізовано спеціалізовану систему автоматизованого збору термоелектричних параметрів із наукових джерел, що має пропускну здатність 25 документів на годину. Розроблений інструментарій дозволяє формувати структуровану базу даних властивостей матеріалів на основі Ві–Те для їхнього подальшого прогнозування та оптимізації методами машинного навчання.

РОЗДІЛ 3. РЕАЛІЗАЦІЯ МУЛЬТИМОДАЛЬНОЇ СИСТЕМИ КОМП'ЮТЕРНОГО ЗОРУ ДЛЯ КОРЕЛЯЦІЙНОГО АНАЛІЗУ МІКРОСТРУКТУРИ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИХ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ Bi–Te

3.1. Концепція побудови системи комп'ютерного зору

Напівпровідникові сплави на основі сполуки Bi–Te та її твердих розчинів демонструють найвищі серед усіх відомих термоелектричних матеріалів значення добротності $ZT \approx 1,0\text{--}1,2$ у діапазоні температур 250–400 К. Це робить їх незамінними для застосувань у побутовій техніці, портативній електроніці, системах термостабілізації лазерних діодів та біомедичних пристроях. Як показано в розділі 2.6, оптимізація ZT потребує одночасного підвищення коефіцієнта потужності та зниження теплопровідності, що є взаємопов'язаною задачею через спільну залежність цих параметрів від концентрації носіїв заряду та мікроструктури матеріалу. Традиційні методи дослідження, що базуються на емпіричному підборі параметрів синтезу та ручному аналізі мікроструктури, виявляються недостатньо ефективними для розв'язання цієї багатопараметричної задачі.

Мікроструктура термоелектричних матеріалів охоплює розмір зерен, густину меж зерен, наявність дислокацій, нанопреципітатів вторинних фаз та пористість, що суттєво впливає на механізми перенесення заряду й тепла. Межі зерен та точкові дефекти розсіюють фонони, знижуючи решіткову теплопровідність $\kappa_{\text{реш.}}$; водночас вони можуть негативно впливати на рухливість носіїв заряду μ . Тому встановлення кількісних кореляцій між мікроструктурними характеристиками та функціональними властивостями є критично важливим для обґрунтованої оптимізації термоелектричних матеріалів.

Комп'ютерний зір та машинне навчання за останні роки стали потужними

інструментами в матеріалознавстві. Успішне застосування цих технологій продемонстровано для аналізу мікроструктури BiTe [160-161]. Проте для аналізу мікроструктурних зображень термоелектричних матеріалів на основі Bi-Te ці підходи залишалися малодослідженими, як було показано в огляді літератури. Це зумовлює актуальність розробки комплексної мультимодальної системи, яка поєднує автоматизований аналіз зображень мікроструктури з прогнозуванням термоелектричних властивостей. Зібрана у другому розділі база даних містить числові значення властивостей та технологічні параметри, проте не включає інформації про мікроструктуру, що обмежує прогностичні можливості системи.

Метою даного розділу є опис архітектури, програмної реалізації та функціональних можливостей розробленої мультимодальної системи комп'ютерного зору для аналізу мікроструктури та прогнозування термоелектричних властивостей матеріалів на основі Bi-Te . Система інтегрує дані атомно-силової мікроскопії (АСМ), металографічної мікроскопії, хімічного складу, термоелектричних властивостей та технологічних режимів синтезу в єдину мультимодальну структуру для глибокого навчання нейронних мереж.

3.2. Об'єкти дослідження та методика підготовки зразків

3.2.1. Характеристика та технологія синтезу досліджуваних матеріалів

Об'єктами експериментального дослідження обрано екструдовані полікристалічні термоелектричні матеріали на основі халькогенідної системи Bi-Te обох типів електричної провідності: електронного (n -тип) та діркового (p -тип). Вибір цієї матеріальної системи узгоджується з фізичною моделлю процесу гарячої екструзії, описаною у розділі 2.2, та забезпечує можливість валідації результатів комп'ютерного моделювання на реальних зразках. Як зазначено в розділі 2.2,

матеріали на основі Bi–Te характеризуються схильністю до сколювання вздовж базисної площини (00 l), температурою плавлення близько 586 °C та в'язкопластичною поведінкою в діапазоні температур 400–500 °C зі степеневим законом течії. Кристалічна будова з характерними слабкими ван-дер-ваальсовими зв'язками між п'ятишаровими пакетами (розділ 2.2) обумовлює анізотропію фізичних властивостей, яку необхідно враховувати під час інтерпретації мікроструктурних зображень.

Для матеріалів *p*-типу провідності використано серію твердих розчинів системи Bi₂Te₃–Sb₂Te₃ з оптимальним співвідношенням компонентів, що забезпечує максимальне значення термоелектричної добротності ZT у діапазоні температур 300–400 K. Для матеріалів *n*-типу використано серію твердих розчинів системи Bi₂Te₃–Bi₂Se₃, леговану донорними домішками для досягнення оптимальної концентрації носіїв заряду. Згідно з даними розділу 2.6, оптимальне значення концентрації носіїв заряду зазвичай перебуває в діапазоні від 10¹⁹ до 10²⁰ см⁻³ для напівпровідників, за якого досягається максимальне значення фактора потужності.

Технологічний процес виготовлення екструдованих термоелектричних матеріалів реалізовано відповідно до фізичної моделі, описаної у розділі 2.2. Процес включає декілька послідовних етапів: синтез вихідного сплаву заданого складу методом прямого спікання компонентів у вакуумованих кварцових ампулах; гомогенізувальний відпал за температур 500–550 °C; механічне подрібнення литого злитка до порошкоподібного стану; власне гаряча екструзія попередньо спресованих порошкових заготовок через профільовану матрицю під дією високого одновісного тиску за підвищених температур.

Параметри процесу екструзії обрано на основі результатів комп'ютерного моделювання в COMSOL Multiphysics (розділ 2.4). Відповідно до рекомендацій, сформульованих за результатами параметричного моделювання, для забезпечення

якості поверхні екструдату ($\sigma_1 < 400$ МПа) та мінімізації енергоємності процесу використано швидкість пуансона $v \leq 0,48$ мм/хв за температур $T \geq 400$ °С. Як показано в табл. 2.4.2.1, за таких параметрів сила екструзії становить 19–24 кН залежно від температури, що є прийнятним для використаного обладнання. Геометричні параметри процесу відповідають комп'ютерній моделі (розділ 2.4).

Зразки для проведення комплексу структурних та електрофізичних досліджень вирізано з екстудованих циліндричних стрижнів у вигляді плоских дисків діаметром 8 мм та товщиною 2–4 мм. Орієнтацію площини диска обрано перпендикулярно до осі екструзії, що забезпечує вимірювання термоелектричних властивостей у площині переважної орієнтації базисних площин, де спостерігаються максимальні значення питомої електропровідності. Приклад досліджуваних зразків наведено на рис. 3.2.1.1.

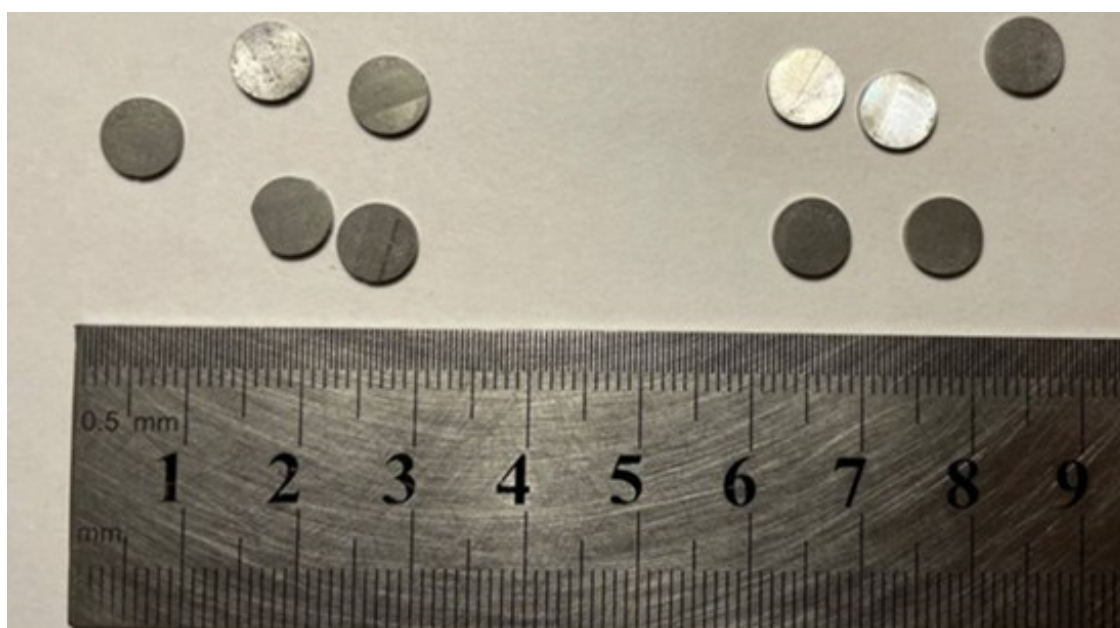


Рис. 3.2.1.1 – Приклад досліджуваних екстудованих зразків термоелектричного матеріалу на основі Bi–Te

3.2.2. Підготовка поверхні для досліджень мікроструктури

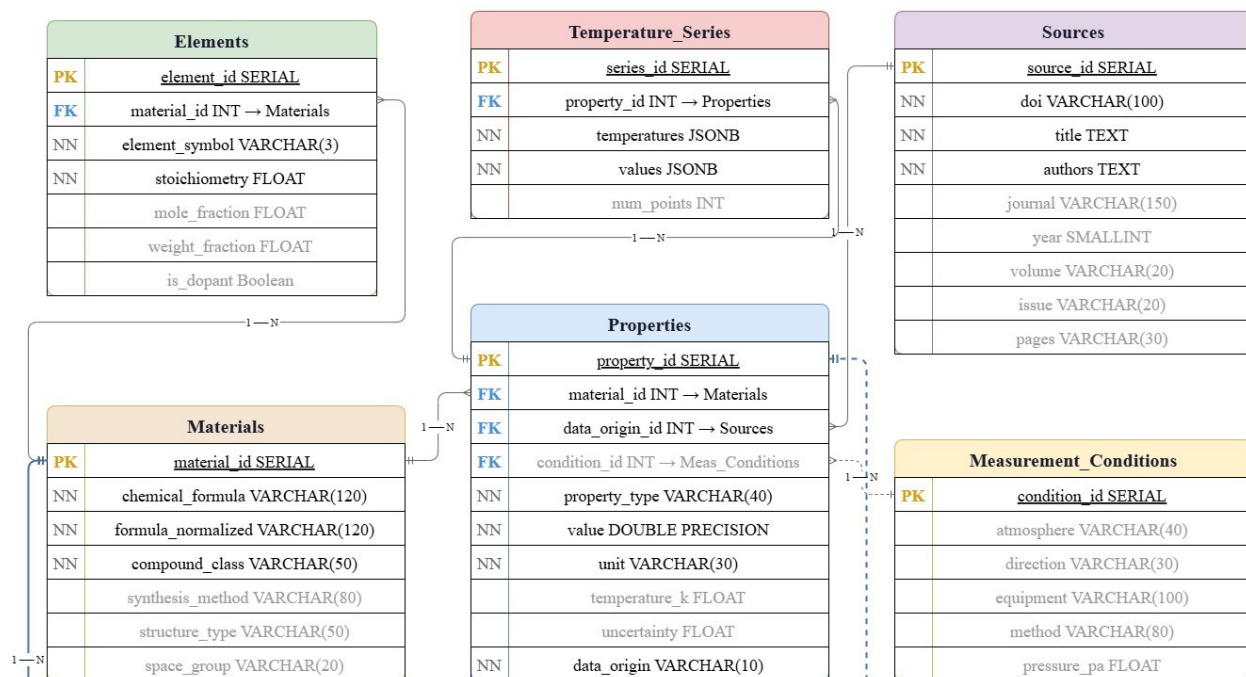
Підготовка поверхні зразків до мікроструктурних досліджень здійснювалася за стандартною металографічною методикою шляхом послідовного механічного шліфування водостійким абразивним папером зернистістю від P400 до P2500 з подальшим багатостадійним поліруванням алмазними пастами з розміром зерна 3, 1 та 0,25 мкм на тканинних полірувальних кругах. Фінішне хіміко-механічне полірування виконували колоїдним розчином оксиду кремнію (суспензія OP-S) для отримання гладкої поверхні, придатної для проведення атомно-силової мікроскопії.

Якість полірування контролювали візуально за відсутністю подряпин під час спостереження в оптичний мікроскоп за збільшення в 500 разів, а також за результатами пробних АСМ-сканувань.

3.3. Розширення архітектури бази даних мікроструктурними зображеннями

Для інтеграції мікроструктурних даних розроблено додатковий блок із шести таблиць (рис. 3.3.1), що зберігає сумісність із наявною системою збору даних з літератури (розділи 2.7–2.11) та забезпечує об'єднання інформації з трьох джерел: автоматично вилученої з публікацій, отриманої моделюванням у COMSOL та експериментально виміряної. Таблиця Samples є проміжною сутністю між Materials та експериментальними вимірюваннями. Ідентифікатор зразка кодує тип провідності (N/P), номер партії, порядковий номер та дату виготовлення. Таблиця Extrusion_Parameters зберігає параметри процесу екструзії (T_{billet} , T_{die} , v_{punch} , $F_{\text{extrusion}}$, σ_{1_max} , ΔT_{max}), що забезпечує зв'язок з результатами комп'ютерного моделювання (розділ 2.4).

Літературний та журнальний блок (Розділ 2)



Мікроструктурний блок (Розділ 3)

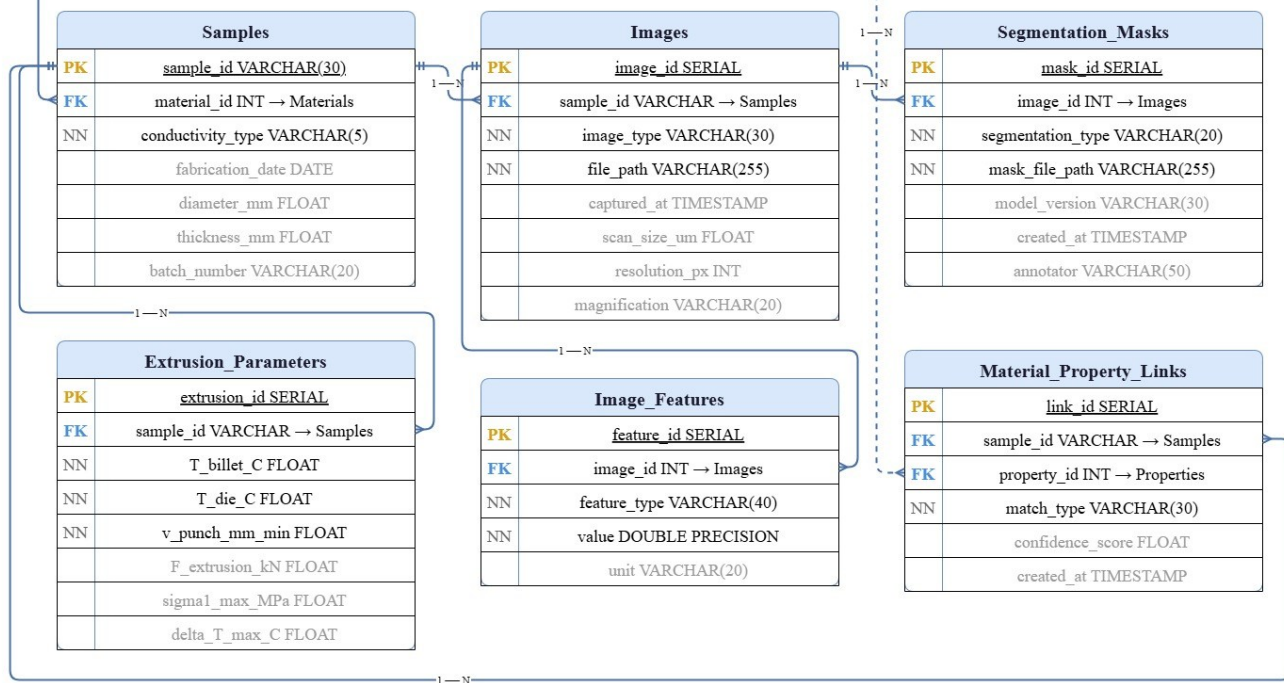


Рис. 3.3.1 – Повна схема розширеної бази даних

Зображення мікроструктури зберігаються у файловій системі за шаблоном `/storage/samples/{sample_id}/images/{image_type}/{filename}`, узгодженим зі структурою модуля `./database` (розділ 2.11). Таблиця `Images` містить метадані: тип зображення (`afm_topography`, `afm_phase`, `metallography_brightfield`, `metallography_darkfield`), параметри зйомки та шлях до файлу. Таблиця `Image_Features` зберігає кількісні характеристики зображень (`grain_size_mean`, `boundary_density`, `porosity`, `roughness_ra` тощо), отримані алгоритмами обробки або моделями машинного навчання. Таблиця `Segmentation_Masks` зберігає маски сегментації – як ручну розмітку для навчання, так і результати автоматичної сегментації з фіксацією версії моделі.

Таблиця `Material_Property_Links` реалізує зв'язок «багато-до-багатьох» між `Samples` та `Properties`, дозволяючи асоціювати зразок із літературними даними для матеріалів аналогічного складу. Механізм зв'язування реалізовано на рівні прикладної логіки: під час додавання зразка система виконує пошук за нормалізованими хімічними формулами (`pyratgen`) із критеріями точного збігу формули, збігу базової системи або класу сполуки. Це забезпечує контекстну інформацію для валідації вимірювань та побудови прогностичних моделей.

3.4. Методика проведення атомно-силової мікроскопії для дослідження поверхні термоелектричних матеріалів на основі Bi-Te

3.4.1. Фізичні принципи та апаратна реалізація атомно-силової мікроскопії

Атомно-силова мікроскопія (АСМ) є одним із найпотужніших сучасних інструментів для дослідження топографії та локальних фізичних властивостей поверхні твердих тіл з просторовою роздільною здатністю на рівні нанометрів.

АСМ базується на безпосередній фізичній взаємодії зонда з поверхнею, що забезпечує отримання тривимірної інформації про рельєф без потреби у спеціальній підготовці зразків.

Фізичною основою методу є реєстрація сил міжатомної взаємодії між гострим зондом (кантилевером) з радіусом закруглення вістря 5–50 нм та досліджуваною поверхнею при їх взаємному зближенні на відстань близько декількох нанометрів. На великих відстанях (більше 10–20 нм), переважає далекодієне притягання вандер-ваальсового типу, а при подальшому зближенні сила притягання зростає та досягає максимуму на відстані приблизно 0,3–0,5 нм. При ще меншому зазорі включається короткодіюче пружне відштовхування електронних оболонок атомів, що швидко зростає за степеневим законом.

Для проведення досліджень термоелектричних матеріалів на основі системи Ві–Те застосовувався сканувальний зондовий мікроскоп моделі NT-206 (рис. 3.4.1.1).

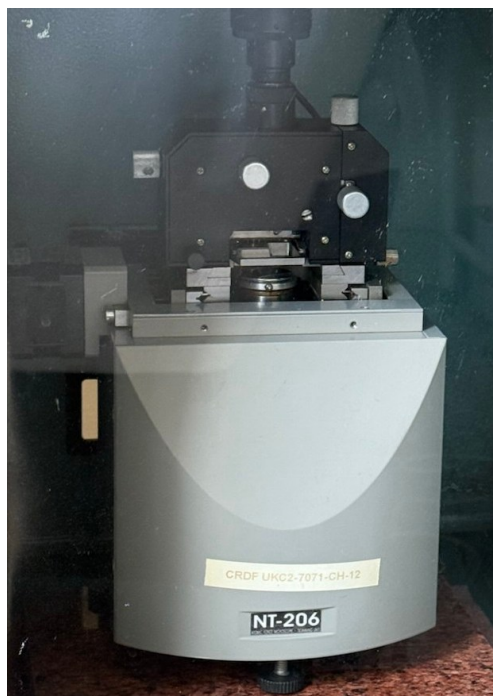


Рис. 3.4.1.1 – АСМ NT-206

Технічні характеристики мікроскопа: максимальний діапазон сканування $46 \times 46 \text{ мкм}^2$ по осях X та Y, до 6 мкм по вертикальній осі Z; роздільна здатність позиціонування – 0,05 нм завдяки п'єзокерамічним приводам із замкнутим контуром зворотного зв'язку.

3.4.2. Методика проведення АСМ-вимірювань

Вимірювання топографії поверхні термоелектричних зразків проводили у контактному режимі роботи АСМ, за якого вістря зонда перебуває в безпосередньому механічному контакті з досліджуваною поверхнею протягом усього процесу сканування. Для сканування використовувалися промислові кремнієві кантилевери типу CSC-38 виробництва MikroMasch із номінальними характеристиками: довжина консолі 350 мкм, резонансна частота – 15–20 кГц, силова константа пружності – 0,03–0,3 Н/м, радіус закруглення вістря – менше 10 нм.

Стандартним параметром сканування обрано область розміром $46 \times 46 \text{ мкм}^2$ із роздільною здатністю 256×256 точок вимірювання, що відповідає латеральному кроку дискретизації і приблизно дорівнює 180 нм. Такий розмір області є оптимальним компромісом, який дозволяє охопити статистично репрезентативну ділянку полікристалічної поверхні з декількома десятками зерен і водночас забезпечує достатню деталізацію для виявлення меж зерен та дрібних дефектів розміром від сотень нанометрів.

Формат зберігання АСМ-даних (.mps) та їхню подальшу конвертацію у стандартні растрові формати (.png, .tiff) було забезпечено за допомогою програми SurfaceViewer. Метадані кожного сканування автоматично отримуються із заголовка файлу та зберігаються у відповідних полях таблиці Images бази даних. Приклади отриманих АСМ-зображень наведено на рис. 3.4.2.1 та рис. 3.4.2.2.

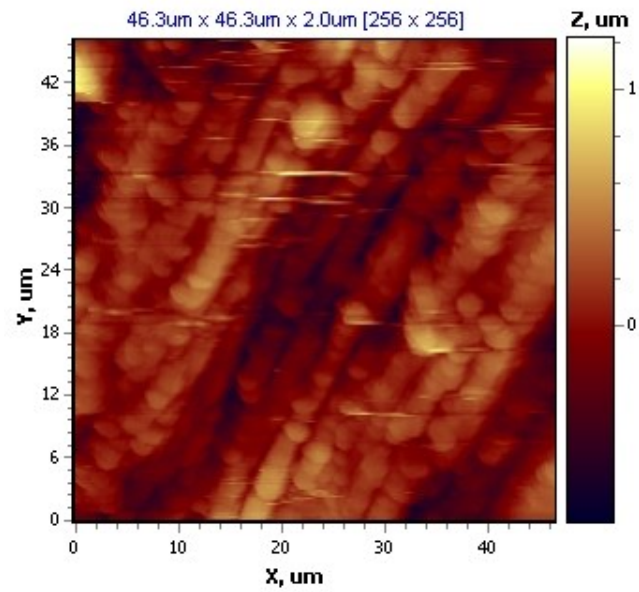


Рис. 3.4.2.1 – АСМ-зображення поверхні кристала в 2D режимі

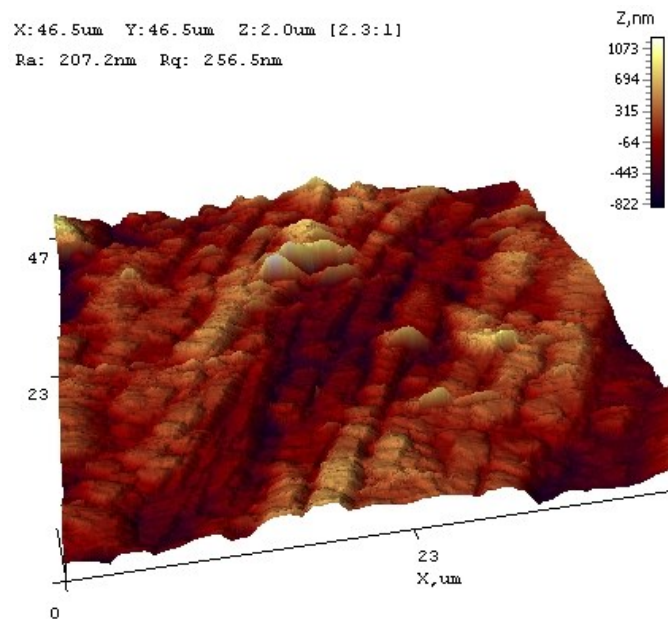


Рис. 3.4.2.2 – АСМ-зображення поверхні кристала в 3D режимі

3.4.3. Алгоритми обробки топографічних даних

Первинна обробка топографічних даних атомно-силової мікроскопії обов'язково охоплює етап корекції систематичних похибок вимірювань, що виникають внаслідок недосконалості апаратури та умов експерименту. Алгоритми обробки реалізовано в модулі preprocessing розробленої системи з використанням бібліотек NumPy та SciPy для чисельних розрахунків.

Корекція нахилу середньої площини виконується методом найменших квадратів шляхом апроксимації масиву топографічних даних площиною першого порядку $z(x,y) = ax + by + c$ та подальшого віднімання апроксимувальної площини від вихідного масиву висот. Для зразків зі значними локальними неоднорідностями застосовується апроксимація з автоматичним ітераційним виключенням точок-викидів.

Фільтрація шуму реалізована комбінацією методів: медіанна фільтрація з ядром 3×3 для зменшення імпульсного шуму, гауссівська фільтрація з $\sigma = 1-2$ пікселі для згладжування високочастотного білого шуму та фільтрація у частотній області для видалення періодичних завад. Параметри фільтрації підбираються експериментально на основі аналізу спектра потужності зображення.

Кількісний аналіз топографії включає обчислення стандартизованих параметрів шорсткості згідно з ISO 4287 та ISO 25178. Середньоарифметична шорсткість R_a обчислюється за формулою (3.4.4.1):

$$R_a = \left(\frac{1}{N}\right) \sum |z_i - \bar{z}| \quad (3.4.4.1)$$

де z_i – значення висоти в i точці; $\bar{z}$ – середнє значення висоти по всій області поверхні; N – загальна кількість точок вимірювання.

Середньоквадратична шорсткість R_q є коренем із середнього квадрата відхилень висоти та обчислюється за формулою (3.4.4.2):

$$R_q = \sqrt{\left[\frac{1}{N} \sum (z_i - \bar{z})^2\right]} \quad (3.4.4.2)$$

Цей параметр математично еквівалентний стандартному відхиленню розподілу висот і є більш чутливим до значних відхилень від середнього рівня порівняно з R_a . Відношення $\frac{R_q}{R_a}$ для поверхонь з гауссівським розподілом висот теоретично становить 1,25; при цьому суттєве відхилення від цього значення вказує на негауссівський характер розподілу, зокрема на наявність глибоких западин, гострих виступів або асиметрії профілю. Для типових полірованих зразків термоелектричних матеріалів значення R_a перебувають у діапазоні 50–300 нм залежно від якості полірування та особливостей мікроструктури.

3.5. Методика проведення оптичної металографічної мікроскопії

Оптична металографічна мікроскопія у відбитому світлі доповнює АСМ-дослідження, забезпечуючи охоплення значно більших областей для статистичного аналізу структури зерен. Якщо АСМ надає детальну топографічну інформацію на ділянках до 46×46 мкм², то металографія дозволяє аналізувати області розміром до декількох міліметрів, що є критичним для оцінки однорідності мікроструктури екструдованих матеріалів.

Основним режимом спостереження обрано мікроскопію темного поля, що забезпечує підвищений контраст при візуалізації меж зерен, мікротріщин, пор та включень. У цьому режимі гладка матриця матеріалу виглядає темною, а структурні особливості – яскравими на темному фоні. Такий «негативний» контраст є ефективним для виявлення навіть слабо виражених дефектів, практично невидимих у звичайному світлому полі.

Цифрова реєстрація металографічних зображень виконувалася камерою

PixeLINK PL-A741 із роздільною здатністю 1280×1024 пікселів та 8-бітною глибиною кольору (256 градацій сірого). Вибір монохромного сенсора зумовлений вимогами до максимальної просторової роздільної здатності для металографічних застосувань. Калібрування масштабу здійснювалося з використанням сертифікованого об'єкт-мікрометра з ціною поділки 10 мкм. Приклади отриманих зображень наведено на рис. 3.5.1.

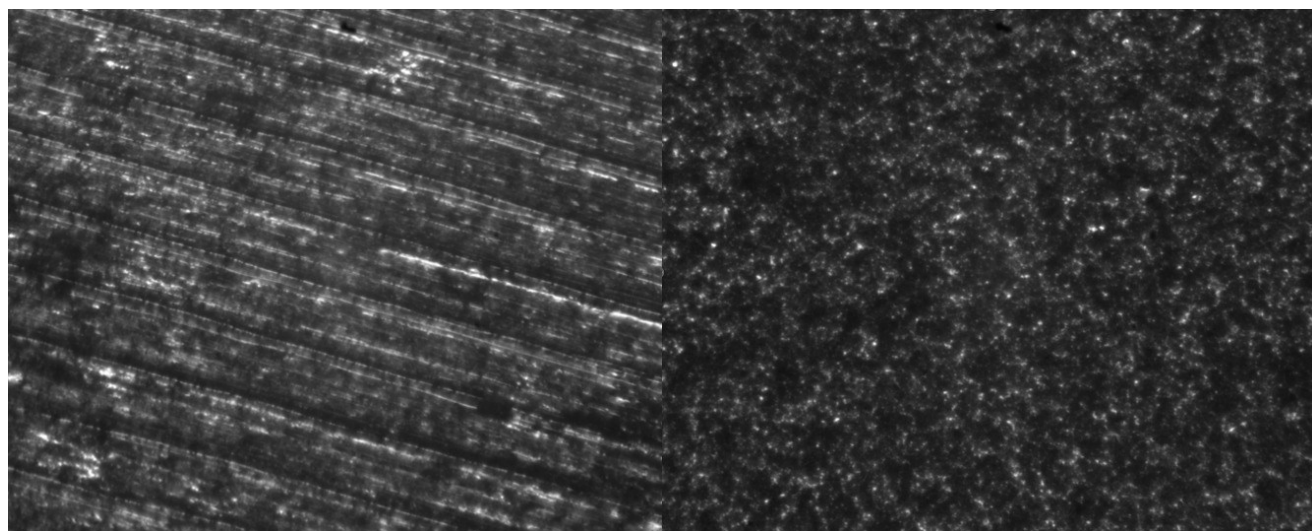


Рис. 3.5.1 – Оптичне металографічне зображення ТЕМ на основі Ві–Те *p*-типу

Металографічний аналіз дозволяє експериментально верифікувати результати комп'ютерного моделювання процесу екструзії (розділ 2.4). Зокрема, орієнтація витягнутих зерен та характер текстури на металографічних знімках корелюють із напрямком екструзії матеріалу, передбаченим моделлю. Розподіл еквівалентних напружень за Мізесом (рис. 2.4.2.2) та густини дисипації енергії повзучості (рис. 2.4.2.4) визначають очікувану неоднорідність мікроструктури вздовж поперечного перерізу екструдату.

Для зразків, виготовлених за різних технологічних режимів (таблиця 2.4.2.1),

виконується порівняльний аналіз мікроструктури. За швидкості пуансона $v = 0,48$ мм/хв спостерігається рівномірна дрібнозерниста структура із середнім розміром зерна 15–25 мкм. Зі збільшенням швидкості до $v = 1,50$ мм/хв фіксується посилення анізотропії зерен та поява ознак поверхневого пошкодження, що узгоджується з підвищенням максимального головного напруження σ_1 до 700–900 МПа (таблиця 2.4.2.2).

3.6. Методика вимірювання термоелектричних властивостей зразків

3.6.1. Картографування розподілу термоЕРС

Вимірювання локальних термоелектричних властивостей досліджуваних зразків виконували експрес-методом «гарячого зонда», що дозволяє картографувати розподіл коефіцієнта Зеєбека поверхнею дискового зразка. Методика узгоджена з параметрами властивостей, що збираються системою автоматизованого вилучення з літератури (розділ 2.9): коефіцієнт Зеєбека α вимірюється у мкВ/К, а його знак вказує на тип провідності (позитивний – p -тип, негативний – n -тип). Приклади отриманих розподілів наведено на рис. 3.6.1.1.

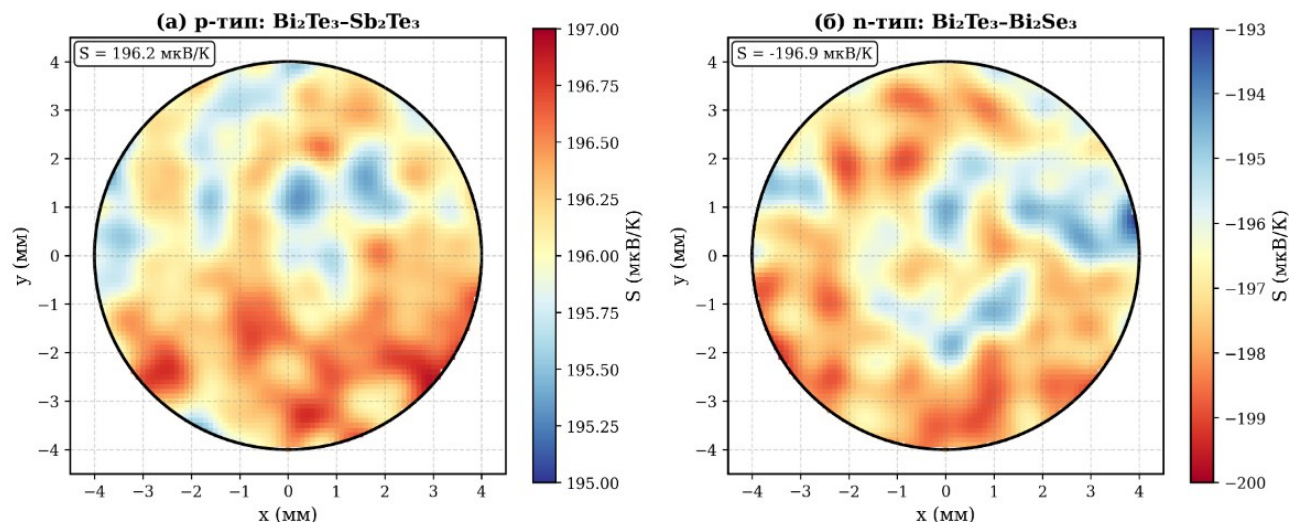


Рис. 3.6.1.1 – Карта розподілу термоЕРС для диску термоелектричного матеріалу p - та n - типу провідності

Типова процедура картографування передбачає вимірювання термоЕРС у вузлах прямокутної сітки з кроком 0,1–1,0 мм. Для дискового зразка діаметром 8 мм це забезпечує від 50 до 5000 точок вимірювання. Результати візуалізуються у вигляді двовимірних кольорових карт (рис. 3.6.1.1), де значення кодуються градієнтом кольору. Середнє значення коефіцієнта Зеєбека для зразків p -типу становить 196 мкВ/К, для n -типу дорівнює -197 мкВ/К, що відповідає діапазону 100-300 мкВ/К для ефективних термоелектричних матеріалів, зазначеному в розділі 2.9.

Спостережувані просторові варіації термоЕРС ($\pm 0,5$ –2% від середнього) відображають локальні неоднорідності хімічного складу та концентрації носіїв заряду. Ці дані зберігаються у таблиці Properties з типом `property_type = 'seebeck_map'` та посиланням на відповідний зразок, що дозволяє корелювати неоднорідність властивостей з особливостями мікроструктури на АСМ та металографічних зображеннях.

Виміряні значення термоелектричних властивостей зразків порівнюються з даними, вилученими системою автоматизованого збору з наукової літератури (розділ 2.9–2.11). Для матеріалів системи Ві–Те база даних містить понад 2847 записів з різних літературних джерел. Статистичний аналіз цих даних дозволяє визначити типові діапазони властивостей та виявити аномальні значення.

Механізм зв'язування реалізовано через таблицю `Material_Property_Links` із використанням нормалізованих хімічних формул (бібліотека `pyratgen`, розділ 2.10.4). Для кожного експериментально дослідженого зразка система автоматично знаходить релевантні літературні дані та обчислює статистичні показники: середнє значення, стандартне відхилення, мінімум та максимум для кожної властивості. Відхилення виміряного значення більш ніж на 2σ від середнього літературного позначається для ручної перевірки.

3.7. Програмний інструмент для мультимодального аналізу

Програмний комплекс на базі комп'ютерного зору розроблено як розширення системи автоматизованого збору термоелектричних властивостей, описаної у другому розділі. Архітектура узгоджена з програмним стеком базової системи (розділ 2.11).

Розроблене розширення доповнює функціональність базової системи модулями для роботи з мікроструктурними зображеннями. Процес обробки даних (`Apache Airflow`, розділ 2.10.4) доповнено DAG-розширеннями для обробки зображень паралельно з обробкою текстових документів.

Ключовою особливістю інтеграції є єдина база даних `PostgreSQL`, що містить як дані з літератури (таблиці `Materials`, `Properties`, `Sources`), так і мікроструктурні дані. Це забезпечує можливість побудови мультимодальних моделей, що одночасно використовують числові властивості з публікацій, параметри моделювання

екструзії та характеристики мікроструктури.

Графічний інтерфейс реалізовано, як вебзастосунок на основі фреймворку Angular 15+ (рис. 3.7.1). Інтерфейс організовано за схемою з навігаційним меню ліворуч та робочою областю в центрі. Верхня панель містить поле пошуку з підтримкою автодоповнення для швидкого знаходження зразків, зображень та результатів.

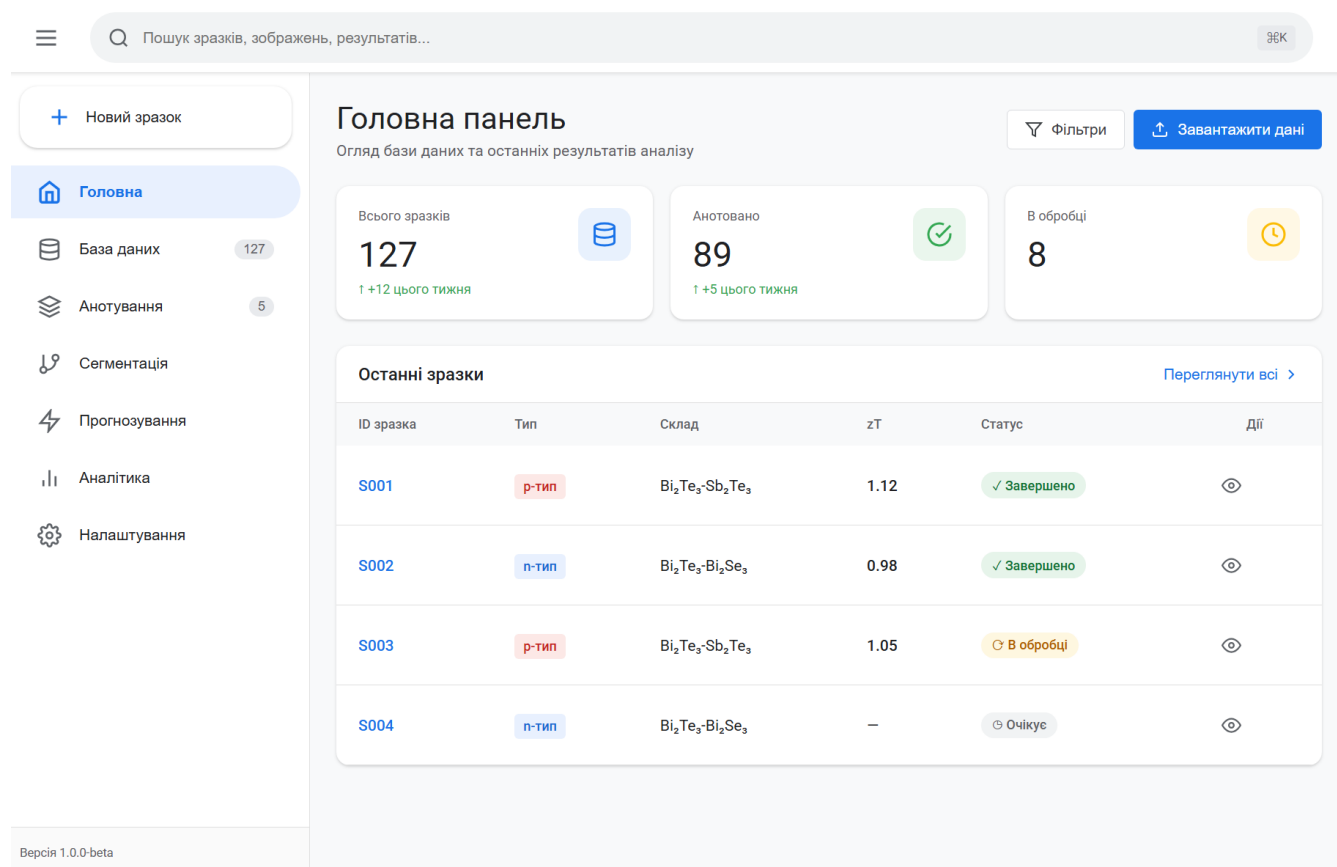


Рис. 3.7.1 – Графічний інтерфейс мультимодальної системи

Навігаційна панель, розташована ліворуч, містить пункти: «Головна» – центральна панель огляду зі статистикою; «База даних» – каталог зразків із можливістю фільтрації за типом провідності, діапазоном властивостей, датою; «Анотування» – модуль розмітки зображень; «Сегментація» – модуль автоматичної

сегментації з візуалізацією результатів; «Прогнозування» – модуль машинного навчання для передбачення властивостей; «Аналітика» – розширені звіти та візуалізації; «Налаштування» - конфігурація системи.

Таблиця останніх зразків на головній панелі відображає унікальний ідентифікатор, тип провідності, хімічний склад, значення ZT та статус обробки. Статус кодується кольором для швидкого візуального сприйняття. Кнопки «Фільтри» та «Завантажити дані» забезпечують налаштування пошуку та імпорт.

3.7.1. Модулі обробки зображень для мультимодального аналізу мікроструктури

Модуль імпорту підтримує завантаження АСМ-даних у вихідному форматі .mps з автоматичною обробкою метаданих із заголовка файлу та металографічних знімків у форматах TIFF, PNG з EXIF-метаданими. Процедура імпорту охоплює валідацію цілісності та формату файлу, конвертацію .mps у стандартні растрові формати, нормалізацію значень до діапазону $[0, 255]$ або $[0, 1]$ та реєстрацію запису в таблиці Images з копіюванням файлу до сховища.

Попередня обробка зображень реалізована з використанням бібліотек OpenCV, scikit-image та NumPy. Для АСМ-даних виконується вирівнювання площини методом найменших квадратів, корекція дрейфу та фільтрація шуму. Для металографії – корекція нерівномірності освітлення, усунення віньєтування та автоматична сегментація фону методом Оцу (Otsu) [162]. Це адаптивна порогова бінаризація, що мінімізує внутрішньокласову дисперсію яскравості для автоматичного визначення оптимального порога розділення об'єктів і фону. Параметри обробки зберігаються в метаданих для забезпечення відтворюваності.

Анотування зображень реалізує гібридний підхід: аналогічно до розділу 2.10.1, де автоматична NER-розмітка коригується вручну, спочатку виконується

автоматична попередня розмітка класичними методами комп'ютерного зору, після чого вручну коригується результат у графічному інтерфейсі на базі Label Studio, що також використовується для анотації текстових даних у модулі NER (розділ 2.10.1), забезпечуючи єдине середовище розмітки для всіх типів даних.

Схема класів для сегментації мікроструктури включає шість категорій: матриця зерна (*grain_matrix*), межі зерен (*grain_boundary*), дислокації (*dislocation*), нанопреципітати (*nanoprecipitate*), пори (*pore*) та мікротріщини (*microcrack*). Результати зберігаються у форматі PNG-масок з одним каналом, де значення пікселя відповідає номеру класу. Таблиця *Segmentation_Masks* фіксує метадані анотації: ідентифікатор оператора, час роботи, версію схеми класів. Попередня автоматична розмітка реалізована засобами бібліотек OpenCV та scikit-image. Для виділення меж зерен застосовано детектор країв Кенні зі скелетонізацією, для нанопреципітатів та пор – порогову бінаризацію з морфологічною фільтрацією, для дислокацій та мікротріщин – перетворення Хафа. Параметри алгоритмів адаптуються автоматично залежно від режиму зйомки. Області, не віднесені до жодного спеціалізованого класу, класифікуються як матриця зерна. Приклад результату наведено на рис. 3.7.1.1.

Отримані маски кодуються у форматі RLE та завантажуються до Label Studio через REST API для подальшої ручної розмітки.

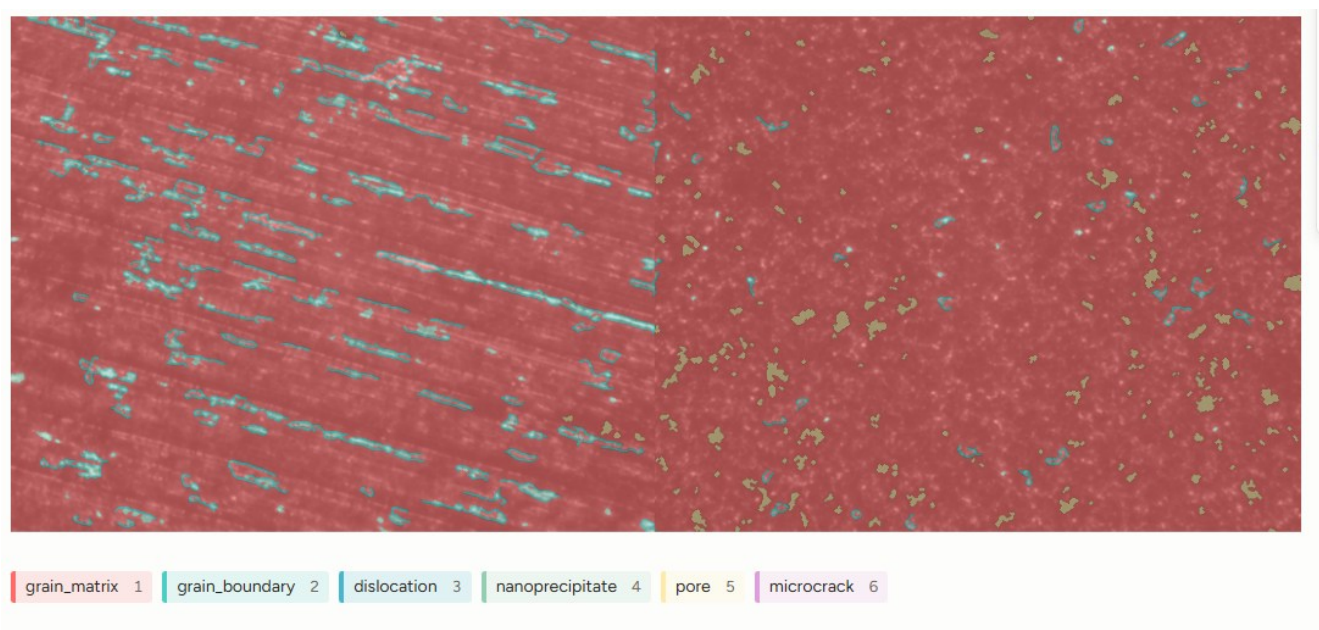


Рис. 3.7.1.1 – Результат автоматичної сегментації металографічного зображення екструдованого зразка Bi–Te

Формування навчальних наборів передбачає розподіл даних у співвідношенні 80/10/10 (навчальна, валідаційна, тестова вибірки). Розбиття виконується на рівні зразків, а не окремих зображень, для запобігання витоку інформації між вибірками. Аугментація (збагачення) включає геометричні трансформації (обертання на $90^\circ/180^\circ/270^\circ$, горизонтальне та вертикальне відзеркалення, масштабування, пружні деформації) та фотометричні (зміна яскравості, контрасту, додавання гауссівського шуму), що дозволяє збільшити ефективний розмір навчальної вибірки у 3–5 разів. Архітектура модуля також передбачає можливість генеративної аугментації на основі CycleGAN для синтезу зображень із різною морфологією зерен, проте ця функціональність потребує подальшого дослідження та валідації. Експорт наборів підтримує формат PyTorch Dataset для прямого завантаження у DataLoader, кожен набір супроводжується файлом метаданих із параметрами аугментації та статистикою класів.

3.8. Архітектура моделі семантичної сегментації мікроструктури

3.8.1. Архітектура мережі

Для автоматизованої семантичної сегментації структурних особливостей поверхні термоелектричних матеріалів розроблено глибоку нейронну мережу на основі архітектури U-Net – повнозгорткової мережі з симетричною структурою «енкодер-декодер» та skip connections, що поєднує високорівневі семантичні ознаки з низькорівневою просторовою інформацією для точного встановлення меж об'єктів. Вибір U-Net зумовлений її доведеною ефективністю для сегментації мікроскопічних зображень [163]. Енкодерна частина мережі побудована на основі архітектури ResNet-34 [164], попередньо навченої на наборі даних ImageNet [165].

Оскільки АСМ-дані є одноканальними (на відміну від RGB), перший згортковий шар модифіковано: ваги фільтрів $7 \times 7 \times 3$ усереднені по каналу кольору та репліковані у фільтри $7 \times 7 \times 1$. Енкодер складається з початкової згортки (stride 2), операції max pooling (stride 2) та чотирьох залишкових блоків із поступовим збільшенням кількості каналів ($64 \rightarrow 128 \rightarrow 256 \rightarrow 512$) та зменшенням просторової роздільної здатності з 256×256 до 8×8 пікселів. Декодер є симетричним енкодеру та містить чотири блоки, які включають збільшення роздільної здатності через білінійну інтерполяцію, поєднання через прямі з'єднання з ознаками енкодера та згорткові шари.

Для підвищення точності сегментації дрібних структурних особливостей (нанопреципітатів, тонких меж зерен) інтегровано механізм Attention Gates [166]. Attention Gates виконують адаптивну модуляцію ознак на прямих з'єднаннях, дозволяючи мережі фокусуватися на інформативних областях зображення.

Модуль Feature Pyramid Network (FPN) об'єднує карти ознак із різних рівнів декодера у мультимасштабне представлення [167]. Латеральні з'єднання приводять

карти ознак кожного рівня до спільної розмірності 256 каналів через згортки 1×1 . Після приведення до однакової просторової роздільної здатності карти ознак з усіх семи рівнів конкатенуються, формуючи єдине мультимасштабне представлення розмірністю 1792 каналів. Це покращує детекцію як великих об'єктів (зерен розміром 10–50 мкм), так і дрібних (преципітатів < 1 мкм).

Модуль передбачення контурів (boundary head) додатково генерує карту контурів меж поряд із семантичними мітками. Це підсилює градієнти функції втрат у приграничних областях, підвищуючи точність сегментації меж зерен. Передбачення контурів меж через зважену навчальну суму поєднується з результатом сегментації. Загальну схему семантичної сегментації АСМ та металографічних зображень представлено на рис. 3.8.1.1.

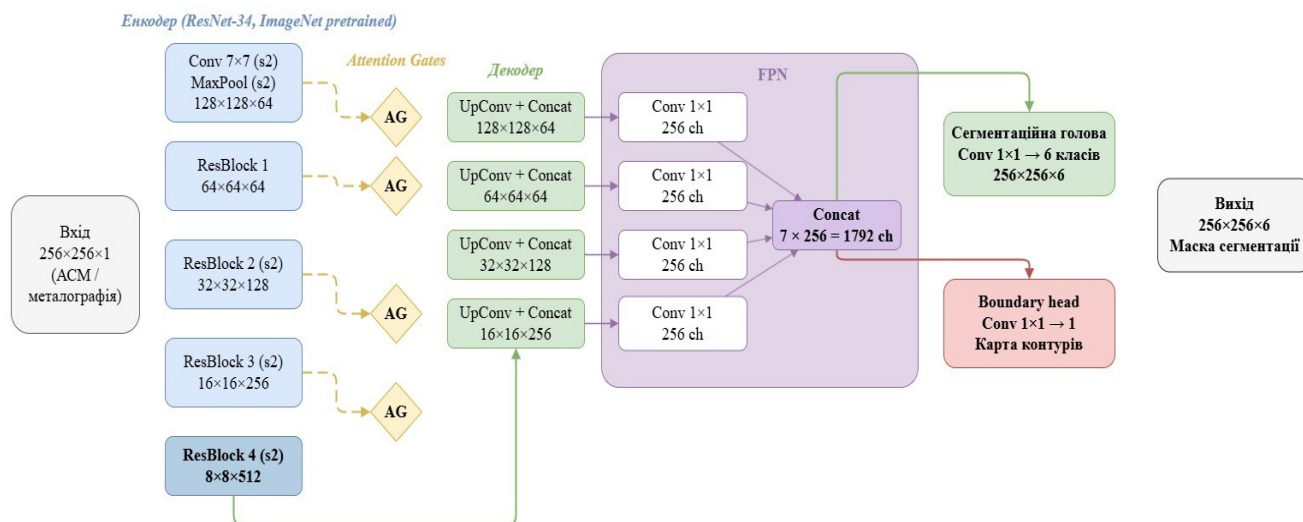


Рис. 3.8.1.1 – Архітектура моделі семантичної сегментації

3.8.2. Навчання моделі

Функція втрат для навчання моделі сегментації є зваженою сумою чотирьох

компонент за формулою (3.8.2.1):

$$L_{\text{заг}} = \lambda_1 L_{CE} + \lambda_2 L_D + \lambda_3 L_B + \lambda_4 L_F \quad (3.8.2.1)$$

де $\lambda_1 = 1,0$, $\lambda_2 = 1,0$, $\lambda_3 = 0,5$, $\lambda_4 = 0,5$ – вагові коефіцієнти; L_{CE} – стандартна крос-ентропійна функція втрат для класифікації пікселів, яка вимірює різницю між передбачуваними ймовірностями класу та істинними мітками; L_D – функція втрат Dice, що враховує дисбаланс класів та обчислює перекриття між прогнозованою та істинною маскою; L_B – функція втрат для покращення точності меж сегментації та зменшення неточності виділення контурів об'єктів; L_F – фокальна функція втрат для підвищення уваги до рідкісних класів та концентрації на складних прикладах.

Гіперпараметри: швидкість навчання 10^{-4} з косинусним зменшенням швидкості навчання, розмір пакета – 16, кількість епох – 50 з ранньою зупинкою. Застосовано регуляризацію Dropout (0,3) та згасання ваг (0,01). Навчання виконувалось у програмному середовищі Google Colab Pro на GPU H200 з використанням змішаної точності (FP16).

Для оцінки якості використовуються метрики, аналогічні до NER (розділ 2.8.4): точність (precision), повнота (recall) та F1-score на рівні пікселів та на рівні об'єктів. Додатково обчислювалося відношення площі перетину передбаченої та істинної масок до площі їхнього об'єднання (IoU) для кожного класу та середній mIoU (арифметичне середнє). На тестовій вибірці з 50 зображень модель досягла mIoU = 0,74, F1 = 0,85 для класу grain_boundary та F1 = 0,88 для класу grain_matrix.

3.9. Мультимодальна модель прогнозування термоелектричних властивостей

Розроблена мультимодальна модель об'єднує три типи даних для

прогнозування термоелектричних властивостей: зображення мікроструктури (АСМ та металографія), структуровані числові дані (хімічний склад, параметри екструзії з моделі COMSOL) та експериментально виміряні характеристики.

Архітектура моделі передбачає три паралельні вхідні гілки з подальшим злиттям у спільному латентному просторі через механізм крос-модальної уваги, зображеної на рис. 3.9.1. На відміну від універсальних мультимодальних моделей, запропонована архітектура використовує спеціалізовані енкодери для кожної модальності. Візуальний енкодер для АСМ та металографічних зображень базується на архітектурі ResNet-34 зі спільними вагами. Оскільки обидва типи зображень є монохромними та відображають мікроструктуру різного масштабу, застосовується архітектура зі спільними вагами – обидва потоки зображень обробляються одним енкодером. Металографічні зображення попередньо масштабуються до 256×256 пікселів зі збереженням співвідношення сторін через обрізання з центруванням. Перший згортковий шар модифіковано для одноканального входу шляхом усереднення ваг (ділення на 3 канали). Як і в моделі сегментації (розділ 3.8.1), візуальний енкодер доповнено модулем FPN, що формує мультимасштабне представлення розмірністю 1792 канали. Після глобального усереднення за просторовими вимірами (global average pooling – операція, що обчислює середнє значення кожної карти ознак, перетворюючи просторове представлення у фіксований вектор) розмірність зменшується до 256 через щільний шар із нормалізацією та функцією активації ReLU. Результатом є латентні представлення $Z_{асм} \in \mathbb{R}^{256}$ та $Z_{мет} \in \mathbb{R}^{256}$.

Енкодер структурованих даних обробляє вектор числових параметрів: концентрації хімічних елементів (нормалізовані за допомогою `pyratgen`), параметри екструзії (T_{billet} , T_{die} , v_{punch} , $F_{extrusion}$, σ_{1max} з таблиці `Extrusion_Parameters`), кількісні характеристики мікроструктури (`grain_size`, `boundary_density`, `porosity` з таблиці `Image_Features`). Багатошаровий перцептрон із архітектурою шарів $64 \rightarrow$

128 $\rightarrow$ 128 нейронів формує латентне представлення $Z_{\text{дата}} \in \mathbb{R}^{256}$. Кожен шар включає нормалізацію BatchNorm та функцію активації ReLU.

Для інтеграції латентних представлень застосовується механізм крос-модальної уваги на основі архітектури Transformer. Поєднання $Z_{\text{мет}}$ та $Z_{\text{дата}}$ використовується як ключі та значення, тоді як $Z_{\text{асм}}$ формує запити.

Багатоголова увага (Multi-head attention) з чотирма головами паралельно відстежує різні типи взаємозв'язків між модальностями. Вихідний вектор крос-модальної уваги розмірністю 512 подається безпосередньо на регресійні голови для прогнозування термоелектричних властивостей. Для узгодження латентних представлень різних модальностей одного зразка застосовується контрастивне навчання з функцією втрат InfoNCE. Позитивні пари формуються з векторів $Z_{\text{асм}}$ та $Z_{\text{мет}}$ одного зразка, щоб вони були близькими у латентному просторі, а негативні пари формуються з векторів різних зразків у міні-пакеті, щоб вони були віддаленими. Це підвищує стійкість моделі у випадках, коли одне з джерел даних відсутнє.

Для кожної прогнозованої властивості (коефіцієнт Зеєбека S , електропровідність σ , теплопровідність κ , фактор потужності PF, добротність ZT) використовується окрема регресійна голова зі структурою: 512 вхідних нейронів $\rightarrow$ 128 (ReLU, Dropout 0,3) $\rightarrow$ 64 (ReLU) $\rightarrow$ 1 вихідний нейрон. Усі п'ять властивостей прогнозуються паралельно, що дозволяє моделі вивчати специфічні для кожної властивості залежності від мікроструктури.

Для візуалізації областей зображення, що найбільше вплинули на прогноз, застосовується метод Grad-CAM (Gradient-weighted Class Activation Mapping) [168]. Метод обчислює градієнти виходу регресійної голови за активаціями останнього згорткового шару енкодера. Теплова карта накладається на вихідне зображення, виділяючи області з високим впливом (наприклад, межі зерен для κ , преципітати для S).

Аналіз теплових карт дозволяє валідувати відповідність модельних залежностей фізичним механізмам. Наприклад, якщо модель прогнозує зниження теплопровідності і Grad-CAM (Gradient-weighted Class Activation Mapping) виділяє області з високою густиною меж зерен, це узгоджується з теорією розсіювання фононів на границях. Такий аналіз інтерпретованості доповнює кількісну оцінку якості метриками MAPE (середня абсолютна відносна похибка) та MAE (середня абсолютна похибка).

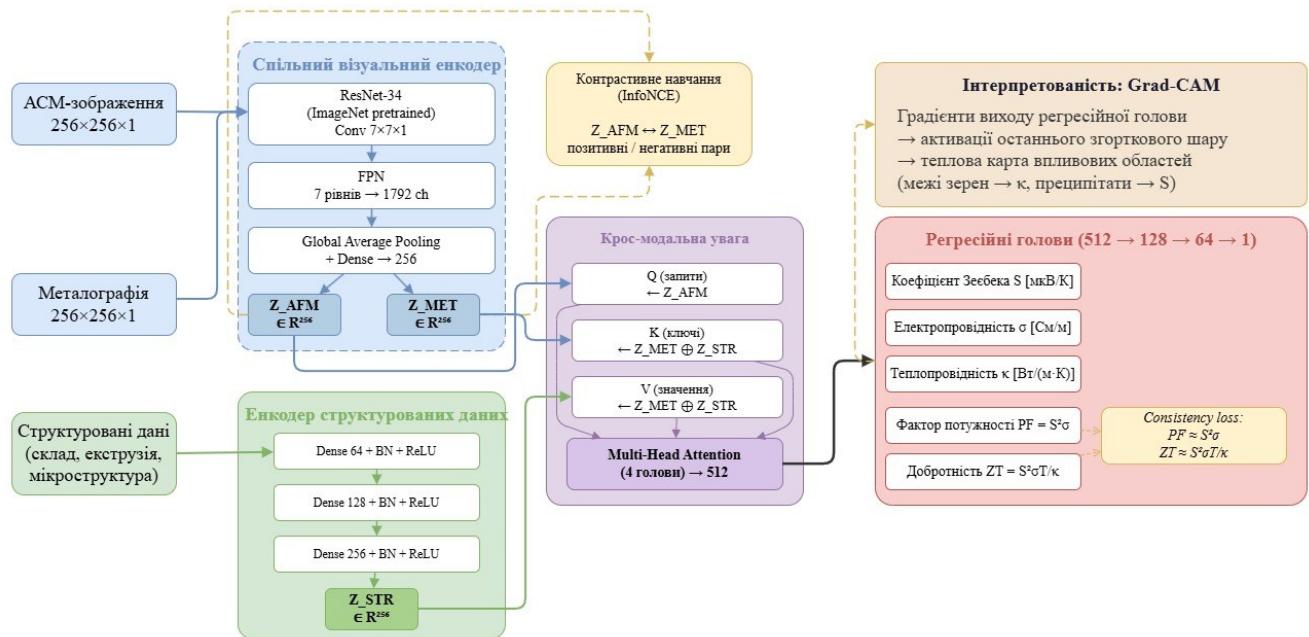


Рис. 3.9.1 – Архітектура мультимодальної моделі прогнозування термоелектричних властивостей

Аналіз теплових карт Grad-CAM (рис. 3.9.2, б, в) дозволяє оцінити внесок візуальної модальності у прогнозування кожної термоелектричної властивості. Для теплопровідності κ (рис. 3.9.2, б) спостерігається виражена активація в зонах підвищеної густини структурних дефектів (межі зерен, пори), що узгоджується з механізмами фононного розсіювання на структурних неоднорідностях. Діапазон

інтенсивності активації охоплює повну шкалу від 0 до 1, що свідчить про значний внесок мікроструктури у прогнозування теплопровідності.

Для коефіцієнта Зеебека S (рис. 3.9.2, в) загальна інтенсивність активації значно нижча (переважно в діапазоні 0–0,3) з незначними локальними максимумами вздовж меж зерен. Це свідчить про менший внесок візуальної модальності у прогнозування S порівняно з κ , що узгоджується з фізичними уявленнями: коефіцієнт Зеебека визначається переважно електронною структурою та хімічним складом, тоді як теплопровідність суттєво залежить від мікроструктурних дефектів, які безпосередньо спостерігаються на зображеннях.

Обмеження роздільної здатності теплових карт зумовлене низькою просторовою роздільністю останнього згорткового шару енкодера (8×8 пікселів для вхідного зображення 256×256), що призводить до розмитості активації. Для субпіксельної точності локалізації можуть бути застосовані методи Grad-CAM++ або Score-CAM, що є напрямом подальшого вдосконалення системи.

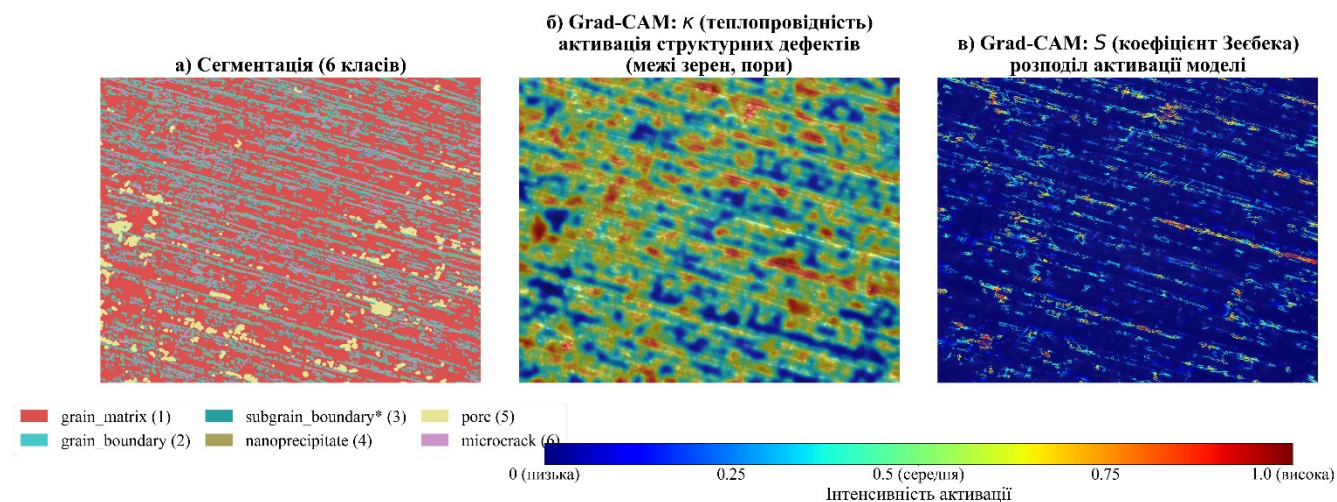


Рис. 3.9.2 – Семантична сегментація та аналіз інтерпретованості мультимодальної моделі для металографічного зображення темного поля зразка Ві–Те: а) маска сегментації з шістьма класами; б) теплова карта Grad-CAM для

прогнозування теплопровідності – активація в зонах структурних дефектів; в) теплова карта Grad-CAM для прогнозування коефіцієнта Зеебека – розподіл активації моделі з низькою загальною інтенсивністю, що свідчить про домінування структурованих даних над візуальною модальністю для цієї властивості. В результаті запропонованого та розробленого концепту системи було сформовано термоелектричну базу властивостей для подальших досліджень [169].

3.10. Експериментальна оцінка розробленої системи

Для навчання та оцінки розроблених моделей сформовано набір даних, що містить 40 зразків термоелектричних матеріалів (20 *p*-типу, 20 *n*-типу). Для кожного зразка отримано: два АСМ-зображення на зразок (усього 80 зображень), 30 металографічних знімків на один зразок (усього 1200 зображень), карти розподілу термоЕРС, електропровідності та теплопровідності, а також виміряні значення при 300 К. Ручне виправлення анотування було виконано для всіх зображень.

Модель семантичної сегментації оцінено на тестовій вибірці з 40 зображень, що не використовувалися під час навчання. Результати за класами представлено в табл. 3.10.1.

Таблиця 3.10.1

Результати сегментації дефектів за класами із допомогою розробленої моделі

Клас	IoU	F1
grain_matrix	0,84	0,91
grain_boundary	0,74	0,85
pore	0,76	0,86
nanoprecipitate	0,58	0,73

Класи *dislocation* та *microcrack* не включені до оцінки через недостатню кількість анотованих прикладів у тестовій вибірці. Середній $mIoU = 0,73$, що перевищує показник базової моделі U-Net з енкодером ResNet-34 без Attention Gates та FPN ($mIoU = 0,67$).

Аналіз помилок показує, що основні труднощі виникають під час сегментації тонких меж зерен на АСМ-зображеннях із підвищеним рівнем шуму. Для таких випадків рекомендовано збільшити роздільну здатність сканування або застосувати ансамбль моделей.

Мультимодальну модель прогнозування оцінено на тестовій вибірці з п'яти зразків, результати наведено у табл. 3.10.2.

Порівняння з моделями, що використовують лише окремі модальності: тільки зображення – $MAPE(ZT) = 9,1 \%$, тільки структуровані дані – $MAPE(ZT) = 7,4 \%$, мультимодальна модель – $MAPE(ZT) = 5,3 \%$. Це підтверджує синергетичний ефект об'єднання різнорідних джерел даних, що позитивно впливає на зменшення помилки прогнозування.

Основними обмеженнями поточної версії системи є:

1. Відносно невелика тестова вибірка (п'ять зразків для мультимодальної моделі), що зумовлює необхідність обережної інтерпретації результатів.
2. Низька точність сегментації класу *nanoprecipitate* ($IoU = 0,58$), що пов'язано з малим розміром об'єктів та обмеженою роздільною здатністю зображень.
3. Відсутність крос-валідації через обмежений загальний обсяг даних.
4. Навчання та тестування виконано лише для системи Ві–Те при 300 К, що не гарантує перенесення результатів на інші термоелектричні матеріали або температурні діапазони.
5. Класи *dislocation* та *microcrack* залишаються практично нерепрезентованими у навчальній вибірці, що унеможливорює оцінку якості їхньої сегментації.

6. Мультимодальна модель потребує одночасної наявності всіх трьох типів вхідних даних для оптимальної роботи.

Таблиця 3.10.2

Метрики якості розробленої системи на тестовій вибірці зразків

Термоелектричний параметр	MAE	MAPE
Коефіцієнт Зеєбека, мкВ/К	8,3	4,2%
Електропровідність С/см	48	5,1%
Теплопровідність, Вт/(м·К)	0,12	7,8%
ZT	0,05	5,3%

Висновки до розділу 3

1. Обґрунтовано доцільність застосування комп'ютерного зору та машинного навчання для встановлення кількісних зв'язків між мікроструктурою екструдованих матеріалів на основі Ві–Те та їхніми термоелектричними властивостями. Визначено об'єкти дослідження – екструдовані полікристалічні термоелектричні матеріали систем $\text{Bi}_2\text{Te}_3\text{--Sb}_2\text{Te}_3$ (p-тип) та $\text{Bi}_2\text{Te}_3\text{--Bi}_2\text{Se}_3$ (n-тип), виготовлені методом гарячої екструзії за оптимізованими режимами ($v \leq 0,48$ мм/хв, $T \geq 400$ °C), обґрунтованими в підрозділі 2.4.
2. Запропоновано розширення реляційної бази даних шістьма додатковими таблицями (Samples, Extrusion_Parameters, Images, Image_Features, Segmentation_Masks, Material_Property_Links) із механізмом зв'язування експериментальних зразків із літературними даними через нормалізовані хімічні формули (pyratgen). Реалізовано програмний інструмент мультимодального аналізу на базі Angular, що інтегрує модулі імпорту зображень, попередньої обробки (OpenCV, scikit-image) та анотування за

гібридною схемою з автоматичною попередньою розміткою та верифікацією в Label Studio.

3. Сформовано комплексну методику отримання мікроструктурних даних, що поєднує атомно-силову мікроскопію (АСМ NT 206, контактний режим, поле сканування 46×46 мкм², роздільна здатність 256×256 точок) для наномасштабної топографічної інформації та оптичну металографію темного поля для аналізу структури зерен. Алгоритми обробки включають корекцію нахилу площини, фільтрацію шуму та обчислення стандартизованих параметрів шорсткості.
4. Розроблено модель семантичної сегментації мікроструктури на основі модифікованої архітектури U-Net з енкодером ResNet-34, механізмами Attention Gates та модулем Feature Pyramid Network, що забезпечує виділення шести класів структурних компонентів. Модель досягає mIoU = 0,73 (F1 = 0,91 для grain_matrix, F1 = 0,85 для grain_boundary), що на 6 в.п. перевищує показники базової U-Net без Attention Gates та FPN.
5. Побудовано мультимодальну модель прогнозування термoeлектричних параметрів із візуальним енкодером (ResNet-34 із FPN) та багат шаровим перцептроном для числових даних, об'єднаними через крос-модальну увагу на основі Transformer із чотирма головами та контрастивне навчання (InfoNCE). Модель одночасно прогнозує п'ять властивостей (S, σ , κ , PF, ZT) із точністю MAPE = 5,3 % для ZT, що суттєво краще за одномодальні підходи (9,1 % для зображень, 7,4 % для табличних даних). Аналіз Grad-CAM засвідчив, що при прогнозуванні κ модель фокусується на структурних дефектах, тоді як для S внесок візуальної модальності є мінімальним, що узгоджується з фізичними механізмами.
6. Визначено ключові обмеження поточної реалізації: недостатній обсяг тестової вибірки для мультимодальної моделі (5 зразків), низька точність сегментації

класу nanoprecipitate ($\text{IoU} = 0,58$) та обмеженість тестування системою Vi-Te при 300 К. Пріоритетними напрямками подальшого розвитку є розширення експериментальних вибірок, підвищення роздільної здатності зображень та посилення процедур валідації.

РОЗДІЛ 4. ЗАСТОСУВАННЯ РОЗРОБЛЕНОЇ СИСТЕМИ ДЛЯ ОПТИМІЗАЦІЇ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИХ МАТЕРІАЛІВ

Розроблена мультимодальна система, що інтегрує базу даних термоелектричних властивостей, моделі машинного навчання та інструменти комп'ютерного зору, відкриває принципово нові можливості для оптимізації термоелектричних матеріалів. У цьому розділі наведено практичні застосування системи для розв'язання ключових задач термоелектричного матеріалознавства: цілеспрямований пошук оптимальних матеріалів для конкретних типів пристроїв, автоматизоване управління технологічним процесом екструзії, оптимізація хімічного складу та встановлення нових фізичних закономірностей.

4.1. Оптимізація матеріалів для різних типів термоелектричних пристроїв

Термоелектричні перетворювачі енергії поділяються на три основні категорії: генераторні модулі для перетворення теплової енергії в електричну, холодильні модулі на основі ефекту Пельтьє та термоелектричні сенсори для вимірювання температури й теплових потоків. Кожен тип пристрою висуває специфічні вимоги до властивостей матеріалу, що унеможливило використання універсального оптимального складу.

Генераторні модулі працюють в умовах значного перепаду температур 100–300 К і потребують матеріалів із максимальним середнім значенням ZT у широкому температурному діапазоні, а також механічної міцності та термічної стабільності при циклічних навантаженнях.

Холодильні модулі функціонують при малих перепадах температур 10–70 К поблизу кімнатної температури (273–350 К). Для них пріоритетним є максимальне ZT саме в цьому вузькому діапазоні та низька теплопровідність для мінімізації

паразитного теплового потоку.

Термоелектричні сенсори потребують матеріалів із максимальним коефіцієнтом Зеебека для забезпечення високої чутливості, при цьому вимоги до ZT є вторинними. Ключовими параметрами є лінійність залежності $S(T)$ та стабільність характеристик у часі. У табл. 4.1.1 систематизовано вимоги до матеріалів для кожного типу пристроїв.

Таблиця 4.1.1

Вимоги до термоелектричних матеріалів для різних типів пристроїв

Параметр	Генераторний режим	Холодильний режим	Термоелектричні сенсори
Температурний діапазон, К	300К–600К	273К–350К	200К–400К
Пріоритетний параметр	$\int_{t_0}^{t_1} ZT > 1$	$\max(ZT)$ при 300К	$S > 200$ мкВ/К
Теплопровідність, κ	$\kappa < 1,5$ Вт/м·К	$\kappa < 1,0$ Вт/м·К	не критично
Механічна міцність	критично	важливо	помірно
Стабільність	> 20 років	> 10 років	> 30 років

Розроблена система реалізує алгоритм багатокритеріальної оптимізації на основі методу пошуку множини Парето для вибору матеріалів, що найкраще відповідають вимогам конкретного застосування. Блок-схема алгоритму наведено на рис. 4.1.1. Користувач задає тип пристрою, робочий температурний діапазон та пріоритетність параметрів, після чого система виконує пошук у базі даних і ранжування матеріалів.

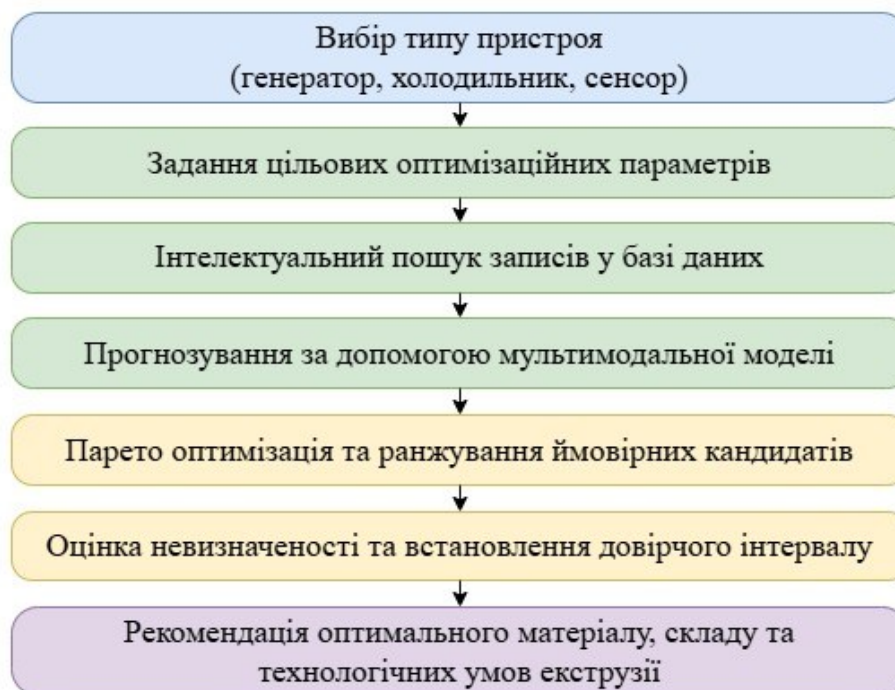


Рис. 4.1.1 – Блок-схема алгоритму багатокритеріальної оптимізації розробленої мультимодальної системи ZT-Optima

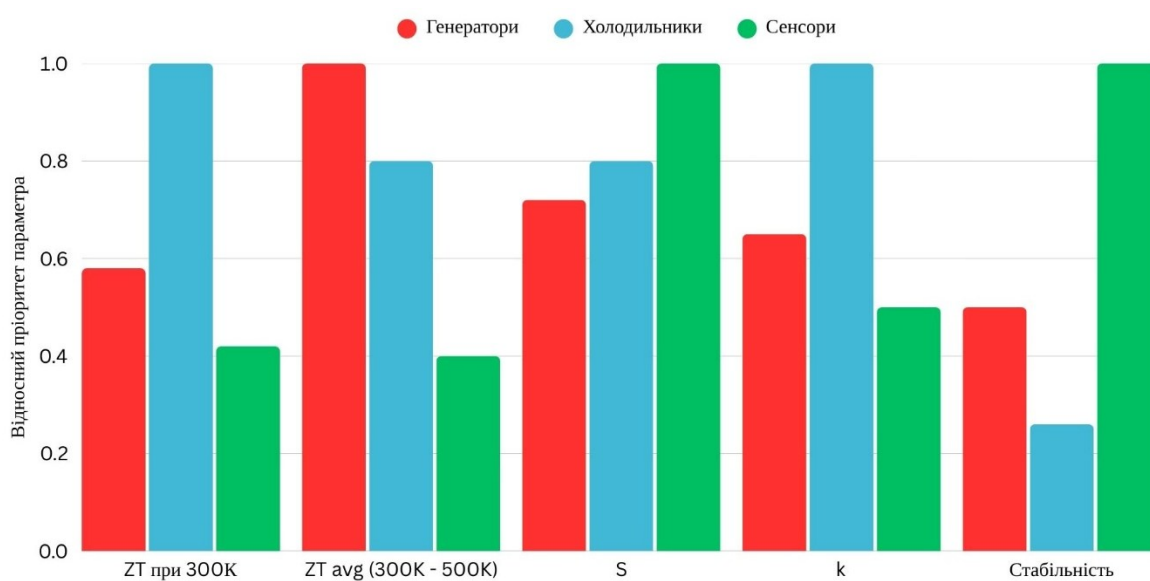


Рис. 4.1.2 – Порівняння пріоритетності параметрів для різних типів пристроїв

Мультимодальна модель прогнозування (описана в третьому розділі) дозволяє оцінити властивості матеріалів із новими комбінаціями складу та параметрів синтезу, розширюючи простір пошуку за межі експериментально досліджених зразків. Порівняння пріоритетності параметрів для різних типів пристроїв наведено на рис. 4.1.2.

4.2. Інтелектуальне управління технологічним процесом екструзії та оптимізація генераторних пристроїв методами машинного навчання

У рамках циклу досліджень [170-172] було систематично вивчено термоелектричні джерела живлення, що працюють на низькопотенціальному теплі. Досліджувались різні конфігурації генераторів, їхні енергетичні характеристики та умови експлуатації. На основі накопичених результатів було запропоновано підхід до оптимізації спіральних анізотропних термоелектричних сенсорів із застосуванням алгоритмів машинного навчання [173], що дозволило перейти від експериментального підбору параметрів до їх автоматизованого визначення. Отриманий досвід застосування методів машинного навчання для оптимізації термоелектричних пристроїв продемонстрував ефективність даних підходів і створив передумови для їх поширення на суміжні задачі – зокрема, на управління технологічними процесами виготовлення термоелектричних матеріалів.

Гаряча екструзія є ключовим методом синтезу термоелектричних матеріалів на основі Bi-Te , що забезпечує формування текстурованої мікроструктури з оптимальними властивостями для промислового застосування. Однак досягнення однорідності властивостей уздовж екстругованого стрижня залишається складним технічним завданням, оскільки локальні варіації температури, швидкості деформації та напруженого стану призводять до неоднорідності мікроструктури.

Для розв'язання цієї проблеми пропонується концепція інтелектуальної

системи управління процесом екструзії, що інтегрує розроблену Інститутом термоелектрики НАН України та МОН України автоматизовану апаратуру для проведення комплексних вимірювань із розробленою мультимодальною системою прогнозування ZT-Optima. Система базується на обладнанні серії «ALTEK», яке забезпечує прискорене у 10 разів вимірювання термоелектричних властивостей при збереженні точності, що перевищує світові аналоги у 3-5 разів. На рис. 4.2.1 представлено автоматизований вимірювальний комплекс «Алтек-1001», який дозволяє вимірювати електропровідність, теплопровідність та коефіцієнт Зеєбека в температурному діапазоні від 30 до 500 °С.



Рис. 4.2.1 – Автоматизована вимірювальна установка «Алтек-1001» [174]

На рис. 4.2.2 наведено установку для проведення вимірювання параметрів термоелектричних стрижнів. Геометричні параметри дозволяють проводити вимірювання стрижнів завдовжки від 50 до 400 мм і діаметром від 6 до 30 мм. Завдяки автоматизації процесу досягається позиціонування вимірювальних зондів із точністю в 0,1 мм вздовж осі стрижня та з осьовим кутом 1°. Автоматизоване

управління та збір даних відбувається на основі 8-канального 24-бітного ADC (Analog-to-Digital Converter), який здійснює синхронізацію даних з Raspberry PI 4. Ця установка дозволяє пришвидшити процес вимірювань у чотири рази порівняно з наявними аналогами.



Рис. 4.2.2 – Автоматизована вимірювальна установка «Алтек-1003» [174]

Архітектура системи охоплює чотири рівні: збір даних у реальному часі, аналітичну обробку, машинний аналіз та адаптивне управління (рис. 4.2.3). На першому рівні відбувається моніторинг параметрів процесу екструзії: пірометричний контроль температурного поля в зоні деформації з роздільною здатністю 0,5 мм; вимірювання сили екструзії датчиками тиску; контроль швидкості пресування енкодерами положення пуансона. Додатково проводиться пірометричне спостереження за зоною розплаву для фіксації температурних аномалій.

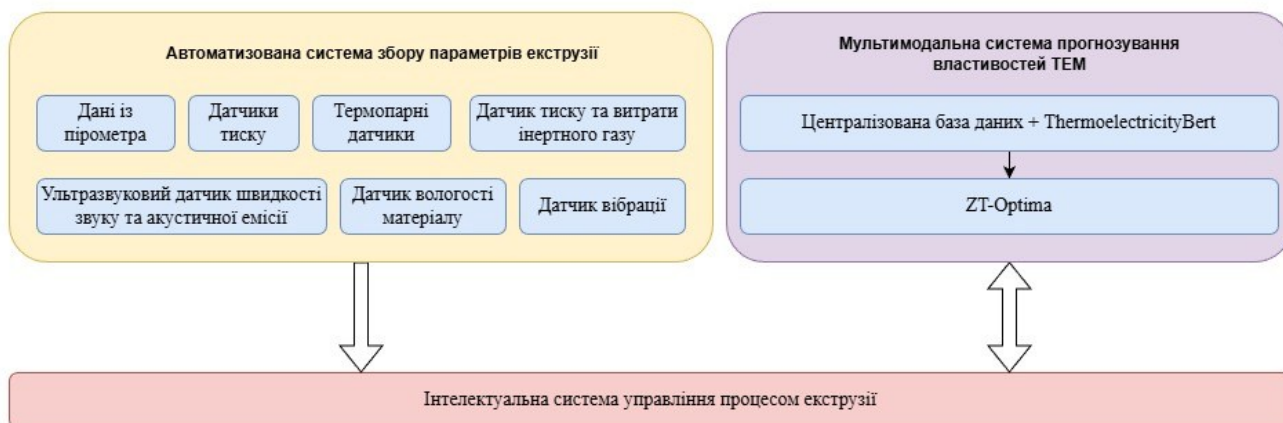


Рис. 4.2.3 – Архітектура інтелектуальної системи управління процесом екструзії

На аналітичному рівні дані з сенсорів автоматично передаються до системи управління для постійного моніторингу всього виробничого процесу. Зі свого боку система здійснює двонаправлений обмін даними з мультимодальною системою прогнозування ZT-Optima. Система ThermoelectricityBERT також обробляє технологічні записи операторів, автоматично збираючи параметри синтезу та записуючи їх до бази. Накопичення даних дозволяє моделям машинного навчання виявляти кореляції між параметрами процесу та властивостями отриманого матеріалу для подальших досліджень.

Таблиця 4.2.1

Параметри моніторингу процесу екструзії термоелектричних матеріалів

Параметр	Діапазон	Роздільна здатність
Температура матриці	350–500 °C	±0,5 °C
Температура зони деформації	380–480 °C	±1,0 °C

Параметр	Діапазон	Роздільна здатність
Температура деформованої маси	400–600 °C	±2,0 °C
Температурний градієнт уздовж зони екструзії	0–50 °C/см	±0,5 °C
Сила екструзії	0–100 кН	±0,1 кН
Тиск матеріалу перед матрицею	10–300 МПа	±1 %
Швидкість виходу екструзії	0,1–5,0 мм/хв	±0,01 мм/хв
Вміст кисню в атмосфері процесу	0–100 ppm	±1 %
Точка роси інертного газу	-80 – -20 °C	±1,0 °C
Витрата інертного газу	0–20 л/хв	±1 %
Вологість вихідного матеріалу	0–0,1 %	±0,005 %
Швидкість звуку / акустична емісія	1–10 МГц	±1 %
Вібрація екструзійного вузла	0–20 г	±0,01 г
Геометричні параметри виробу	0,5–20 мм	±0,01 мм

Рівень управління реалізує замкнений цикл: модель прогнозує очікувані властивості матеріалу на основі поточних параметрів процесу, порівнює їх з цільовими значеннями та коригує режим синтезу. На рис. 4.2.4 показано вплив режимів екструзії на температурну залежність добротності ZT :

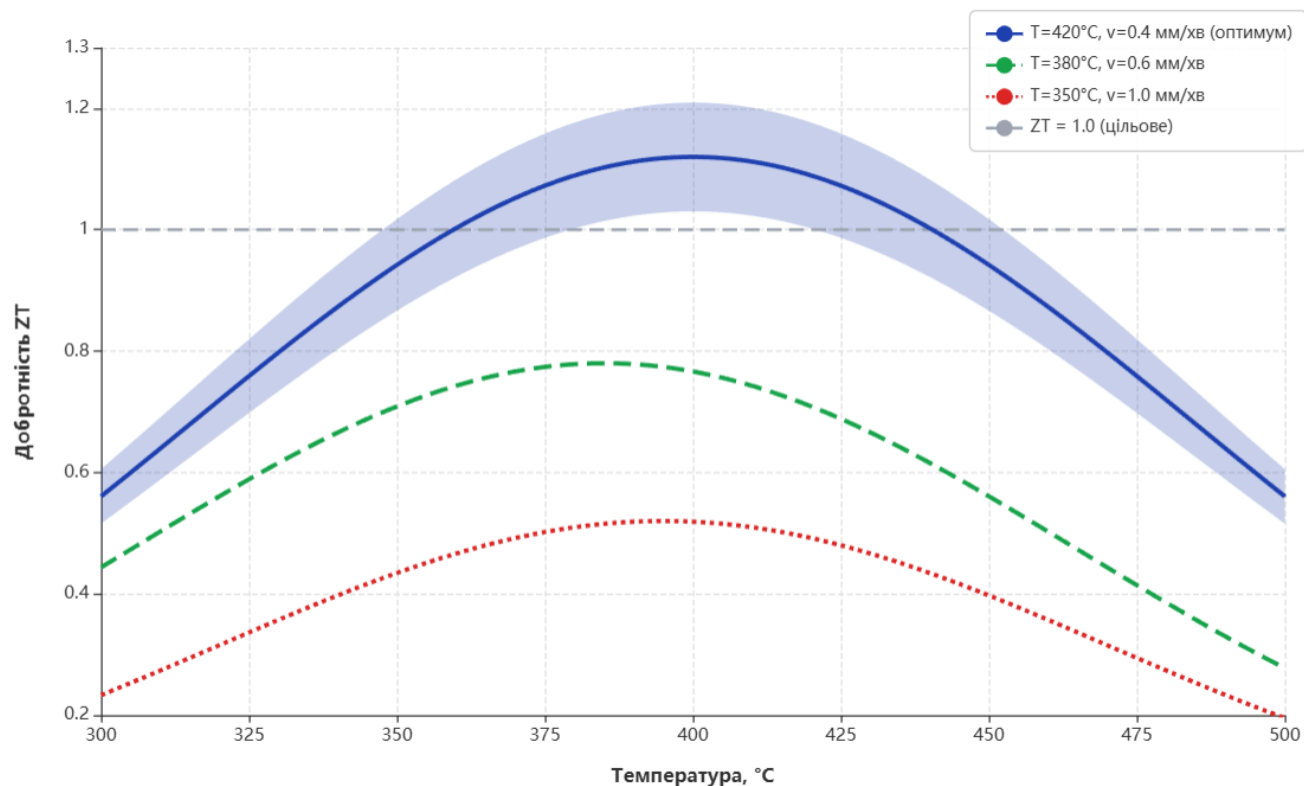


Рис. 4.2.4 – Вплив режимів екструзії на температурну залежність ZT

Таблиця 4.2.2

Приклад рекомендацій системи для корекції технологічних режимів

Виявлена проблема	Рекомендована корекція
Зниження σ на 15%	Збільшити T на 10°C , зменшити v на 20%
Підвищення k на 10%	Зменшити T на 5°C для подрібнення зерна
Неоднорідність S вздовж стержня	Стабілізувати $v \leq 0.48$ мм/хв при $T \geq 400^{\circ}\text{C}$
Тріщини на поверхні	Збільшити T на 15°C , перевірити вологість

4.3. Оптимізація хімічного складу та зворотне проєктування матеріалу під задані граничні умови

Оптимізація хімічного складу термоелектричних матеріалів на основі Bi–Te передбачає визначення оптимальних співвідношень основних компонентів (Bi:Sb:Te:Se) та концентрацій легувальних домішок для досягнення цільових властивостей. Традиційний підхід базується на систематичному варіюванні складу з кроком 1-5 ат. %, що потребує синтезу та аналізу сотень зразків. Розроблена система реалізує принципово інший підхід, а саме зворотне проєктування: користувач задає цільові властивості, а система прогнозує оптимальний склад та параметри синтезу. Алгоритм оптимізації (рис. 4.3.1) базується на градієнтному спуску в просторі латентних представлень мультимодальної моделі з обмеженнями на фізичне існування складу в реальних умовах.



Рис. 4.3.1 – Схема алгоритму зворотного проєктування матеріалів

Для матеріалів *p*-типу система досліджує простір складів $(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2(\text{Te}_{1-y}\text{Se}_y)_3$ із варіацією параметрів $x = 0,7-0,9$ та $y = 0-0,1$ (рис. 4.3.2), а також концентрацій домішок Cu, Ag, Pb у діапазоні 0,01-0,5 ат. %. Для матеріалів *n*-типу оптимізується

склад $\text{Bi}_2(\text{Te}_{1-z}\text{Se}_z)_3$ з $z = 0,05-0,15$ з використанням галогенних домішок I, Br, Cl.

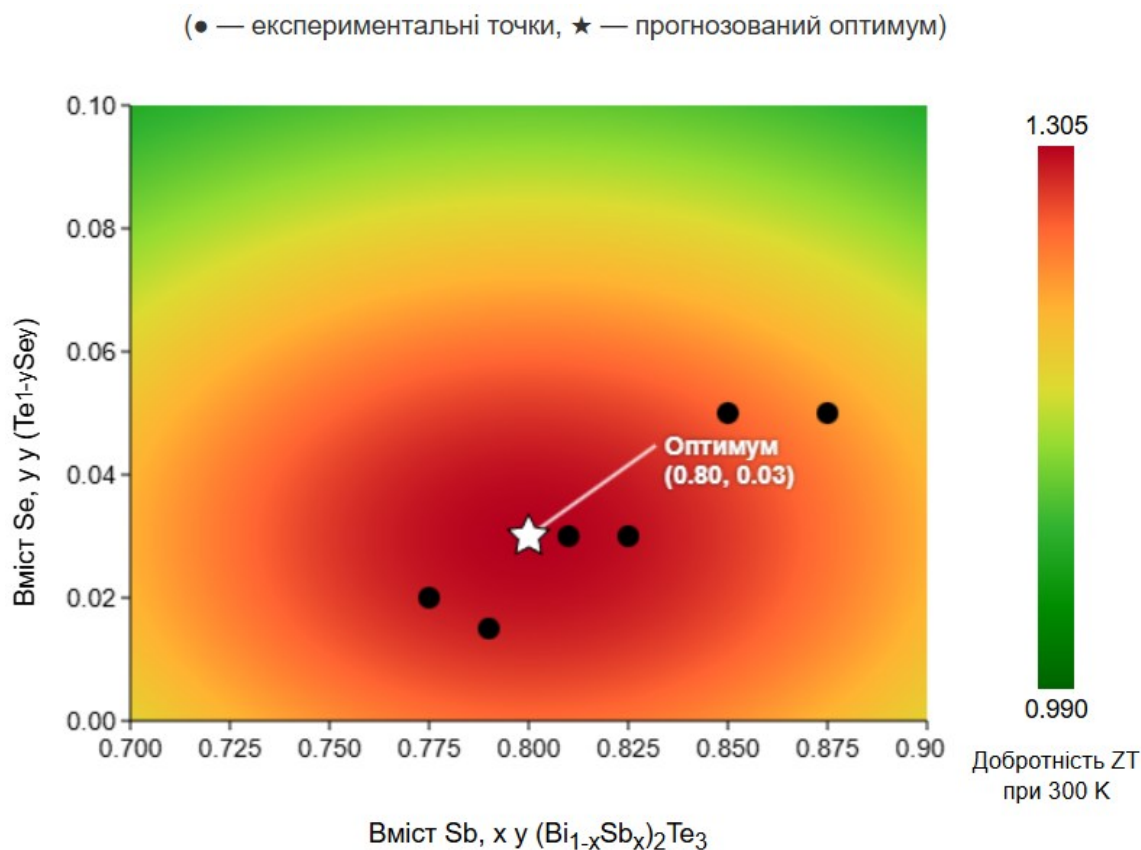


Рис. 4.3.2 – Простір оптимізації хімічного складу p -типу матеріалів

Важливою перевагою системи є можливість оцінки невизначеності прогнозу за допомогою ансамблю моделей. Для кожного запропонованого складу система надає довірчий інтервал, що дозволяє планувати експериментальну валідацію з оптимальним співвідношенням ризику та потенційного результату.

Висновки до розділу 4

1. Продемонстровано успішну апробацію розробленої мультимодальної системи

комп'ютерного зору та машинного навчання при розв'язанні ключових задач термоелектричного матеріалознавства. Це підтверджує ефективність запропонованого підходу до інтеграції мікроструктурного аналізу, числових даних та моделей прогнозування у межах єдиного інструментального комплексу.

2. Розроблено алгоритм багатокритеріальної оптимізації термоелектричних матеріалів, що враховує специфіку застосування трьох основних типів пристроїв: генераторних модулів (пріоритет середнього значення добротності ZT_{avg} у широкому температурному діапазоні), холодильних модулів (максимізація ZT при 300 К та одночасна мінімізація теплопровідності κ) і термоелектричних сенсорів (максимізація коефіцієнта Зеебека S). Систематизовано вимоги до матеріалів для кожного типу застосувань та реалізовано інтерфейс цільового пошуку у базі даних, що забезпечує автоматизований відбір перспективних складів матеріалів за заданими критеріями.
3. Запропоновано концепцію інтелектуальної системи управління процесом екструзії термоелектричних матеріалів, що інтегрує автоматизоване обладнання серії «ALTEK» із прогностичними моделями машинного навчання. Система забезпечує моніторинг ключових параметрів процесу у реальному часі (температура заготовки та матриці, сила екструзії, швидкість пресування), пірометричний контроль зон деформації та розплаву, а також автоматичну передачу даних до централізованої бази. Це дозволяє здійснювати оперативну автоматизовану корекцію технологічних режимів для забезпечення однорідності мікроструктури та стабільності властивостей екструдованого матеріалу.
4. Реалізовано алгоритм зворотного проєктування термоелектричних матеріалів, який за заданими цільовими значеннями термоелектричних властивостей

прогнозує оптимальний хімічний склад та технологічні параметри синтезу. Для матеріалів *p*-типу алгоритм оптимізує стехіометричне співвідношення Bi:Sb та Te:Se, для *n*-типу – концентрацію Se та галогенних легуючих домішок. Система забезпечує оцінку невизначеності прогнозу (uncertainty estimation) та формує рекомендації щодо пріоритетних експериментів, що суттєво скорочує цикл розробки нових термоелектричних матеріалів із заданими функціональними характеристиками.

ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі вирішено актуальну науково-технічну задачу розробки мультимодальної системи комп'ютерного зору та машинного навчання для автоматизації дослідження екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Bi–Te, що забезпечує інтеграцію автоматизованого вилучення даних з наукової літератури, аналізу мікроструктурних зображень, прогнозування термоелектричних властивостей та оптимізації хімічного складу і технологічних режимів синтезу у єдиний інструментальний комплекс. Основні результати роботи полягають у наступному:

1. На основі аналізу літературних джерел встановлено, що для матеріалів на основі Bi–Te, отриманих методом гарячої екструзії, залишається невирішеною задача комплексного врахування мікроструктури, хімічного складу та технологічних параметрів у межах єдиної прогностичної моделі. Показано, що фрагментарність та неструктурованість наявних даних є основними обмеженнями для широкого впровадження методів машинного навчання у термоелектричному матеріалознавстві.
2. Побудовано фізичну та комп'ютерну модель гарячої екструзії термоелектричного матеріалу на основі Bi–Te у середовищі COMSOL Multiphysics 6.2. На основі параметричного розрахунку (243 ітерації) встановлено домінантний вплив швидкості деформації на силу екструзії: при зростанні швидкості в 3,1 раза сила екструзії збільшується з 22,8 до 78,2 кН, тоді як зниження температури з 500 до 340 °C зумовлює зростання лише на 40–50 %. Обґрунтовано критерій якості поверхні екструдату: $v \leq 0,48$ мм/хв при $T \geq 400$ °C ($\sigma_1 < 400$ МПа). За результатами моделювання визначено структуру цільових ознак для формування системи збору даних.
3. Розроблено спеціалізовану систему автоматизованого вилучення

термоелектричних параметрів із наукових джерел літератури на основі додатково навченої мовної моделі MatSciBERT. Встановлено, що предметна адаптація є визначальним фактором для точності екстракції: MatSciBERT перевершує базову модель BERT-base на 9 в.п. за метрикою F1-score (NER). Збільшення обсягу навчальних даних у 5 разів (з 1200 до 6000 фрагментів) забезпечило приріст F1 (NER) на 10 в.п. (до 0,82) та F1 (RE) на 8 в.п. (до 0,84). Це дозволило сформувати структуровану базу даних властивостей матеріалів на основі Bi-Te для подальшого аналізу, прогнозування та оптимізації.

4. Вперше запропоновано методику та реалізовано мультимодальну систему комп'ютерного зору для кількісного аналізу мікроструктури екструдованих матеріалів на основі Bi-Te. Система поєднує дані атомно-силової мікроскопії (наномасштабна топографія) та оптичної металографії темного поля (аналіз структури зерен). Модель семантичної сегментації на основі модифікованої архітектури U-Net досягає середнього mIoU = 0,73 (F1 = 0,91 для класу grain_matrix, F1 = 0,85 для класу grain_boundary), що перевершує базову модель на 6 в.п. Це дозволяє автоматизувати розпізнавання шести класів структурних компонентів та встановити кількісні кореляції між мікроструктурними параметрами і термоелектричними властивостями.
5. Побудовано мультимодальну модель прогнозування п'яти ключових термоелектричних параметрів (S , σ , κ , PF , ZT), що інтегрує мікроструктурні зображення, структуровані числові дані та контрастивне навчання через механізм крос-модальної уваги. Модель досягає MAPE = 5,3 % для показника ZT , що суттєво перевершує результати одномодальних підходів (9,1 % та 7,4 %) і підтверджує синергетичний ефект обраної архітектури. Аналіз інтерпретованості за допомогою методу Grad-CAM засвідчив відповідність отриманих модельних залежностей фізичним механізмам: при прогнозуванні теплопровідності модель фокусується на структурних дефектах, тоді як для

коефіцієнта Зеєбека визначальним є внесок структурованих даних.

6. Реалізовано алгоритм зворотного проєктування (inverse design) для екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Bi-Te , який за заданими цільовими значеннями термоелектричних властивостей прогнозує оптимальний хімічний склад та параметри синтезу. Алгоритм забезпечує оцінку невизначеності прогнозу через ансамбль моделей, що дозволяє скоротити цикл розробки нових матеріалів із заданими функціональними характеристиками шляхом заміни систематичного перебору складів цілеспрямованим пошуком. Додатково розроблено алгоритм багатокритеріальної оптимізації для трьох типів термоелектричних пристроїв.
7. Створено цілісне програмне забезпечення, яке поєднує в межах єдиного інструментального середовища автоматизований збір даних із літератури, комп'ютерне моделювання процесів екструзії, мультимодальний аналіз мікроструктури, прогнозування термоелектричних властивостей та зворотне проєктування матеріалів. Ця розробка забезпечує автоматизацію повного циклу дослідження екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Bi-Te – від інтелектуального аналізу літературних джерел до оптимізації хімічного складу та технологічних режимів. Програмний комплекс не має аналогів за функціональними можливостями як у вітчизняній, так і в закордонній практиці.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Seebeck, T. J. (1826). Magnetische Polarisation der Metalle und Erze durch Temperatur-Differenz. *Abhandlungen der Deutschen Akademie der Wissenschaften zu Berlin*, 265–373.
2. Riffat, S. B., & Ma, X. (2003). Thermoelectrics: a review of present and potential applications. *Applied Thermal Engineering*, 23(8), 913–935. [https://doi.org/10.1016/s1359-4311\(03\)00012-7](https://doi.org/10.1016/s1359-4311(03)00012-7)
3. Snyder, G. J., & Toberer, E. S. (2008). Complex thermoelectric materials. *Nature Materials*, 7(2), 105–114. <https://doi.org/10.1038/nmat2090>
4. Sun, Y., Liu, Y., Li, R., Li, Y., & Bai, S. (2022). Strategies to improve the thermoelectric figure of merit in thermoelectric functional materials. *Frontiers in Chemistry*, 10. <https://doi.org/10.3389/fchem.2022.865281>
5. Chen, Y., Hou, X., Ma, C., Dou, Y., & Wu, W. (2018). Review of development status of Bi₂Te₃-based semiconductor thermoelectric power generation. *Advances in Materials Science and Engineering*, 2018(1). <https://doi.org/10.1155/2018/1210562>
6. Dharmaiah, P., Jung, S.-J., Kim, J.-S., Kim, S. K., & Baek, S.-H. (2024). Why is it challenging to improve the thermoelectric properties of n-type Bi₂Te₃ alloys? *Applied Physics Reviews*, 11(3). <https://doi.org/10.1063/5.0205096>
7. Kim, S. I., Lee, K. H., Mun, H. A., Kim, H. S., Hwang, S. W., Roh, J. W., Yang, D. J., Shin, W. H., Li, X. S., Lee, Y. H., Snyder, G. J., & Kim, S. W. (2015). Dense dislocation arrays embedded in grain boundaries for high-performance bulk thermoelectrics. *Science*, 348(6230), 109–114. <https://doi.org/10.1126/science.aaa4166>
8. West, D., Sun, Y. Y., Wang, H., Bang, J., & Zhang, S. B. (2012). Native defects in second-generation topological insulators: Effect of spin-orbit interaction on Bi₂Se₃.

- Physical Review B*, 86(12). <https://doi.org/10.1103/physrevb.86.121201>
9. Poudel, B., Hao, Q., Ma, Y., Lan, Y., Minnich, A., Yu, B., Yan, X., Wang, D., Muto, A., Vashaee, D., Chen, X., Liu, J., Dresselhaus, M. S., Chen, G., & Ren, Z. (2008). High-thermoelectric performance of nanostructured bismuth antimony telluride Bulk Alloys. *Science*, 320(5876), 634–638. <https://doi.org/10.1126/science.1156446>
 10. Zhuang, H.-L., Cai, B., Pan, Y., Su, B., Jiang, Y., Pei, J., Liu, F., Hu, H., Yu, J., Li, J.-W., Wang, Z., Han, Z., Li, H., Wang, C., & Li, J.-F. (2024). Strong and efficient bismuth telluride-based thermoelectrics for Peltier microcoolers. *National Science Review*, 11(10). <https://doi.org/10.1093/nsr/nwae329>
 11. Hufenbach, J., Giebeler, L., Hoffmann, M., Kohlar, S., Kühn, U., Gemming, T., Oswald, S., Eigenmann, B., & Eckert, J. (2012). Effect of short-term tempering on microstructure and mechanical properties of high-strength FeCrMoVC. *Acta Materialia*, 60(11), 4468–4476. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2012.04.041>
 12. Hu, L. P., Liu, X. H., Xie, H. H., Shen, J. J., Zhu, T. J., & Zhao, X. B. (2012). Improving thermoelectric properties of n-type bismuth–telluride-based alloys by deformation-induced lattice defects and texture enhancement. *Acta Materialia*, 60(11), 4431–4437. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2012.05.008>
 13. Hu, X., Chen, X., Shui, J., Zhou, P., Wang, Z., Li, Y., Barnett, M., He, Z., Li, G., & Fan, X. (2025). Dynamic-recrystallization-mediated suppression of donor-like effects in n-type $\text{Bi}_2(\text{Te,Se})_3$ thermoelectrics via extreme hot extrusion. *Materials Today Physics*, 59, 101911. <https://doi.org/10.1016/j.mtphys.2025.101911>
 14. Chen, Z.-C., Suzuki, K., Miura, S., Nishimura, K., & Ikeda, K. (2009). Microstructural features and deformation-induced lattice defects in hot-extruded Bi_2Te_3 thermoelectric compound. *Materials Science and Engineering: A*, 500(1–2), 70–78. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2008.09.030>
 15. Zhu, T., Liu, Y., Fu, C., Heremans, J. P., Snyder, J. G., & Zhao, X. (2017). Compromise and synergy in high-efficiency thermoelectric materials. *Advanced*

- Materials*, 29(14). <https://doi.org/10.1002/adma.201605884>
16. Bao, D., Chen, J., Yu, Y., Liu, W., Huang, L., Han, G., Tang, J., Zhou, D., Yang, L., & Chen, Z.-G. (2020). Texture-dependent thermoelectric properties of nano-structured Bi_2Te_3 . *Chemical Engineering Journal*, 388, 124295. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.124295>
 17. Lim, S.-S., Jung, S.-J., Kim, B. K., Kim, D.-I., Lee, B.-H., Won, S. O., Shin, J., Park, H.-H., Kim, S. K., Kim, J.-S., & Baek, S.-H. (2020). Combined hot extrusion and spark plasma sintering method for producing highly textured thermoelectric Bi_2Te_3 alloys. *Journal of the European Ceramic Society*, 40(8), 3042–3048. <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2020.03.008>
 18. Tang, X., Xie, W., Li, H., Zhao, W., Zhang, Q., & Niino, M. (2007). Preparation and thermoelectric transport properties of high-performance p-type Bi_2Te_3 with layered nanostructure. *Applied Physics Letters*, 90(1). <https://doi.org/10.1063/1.2425007>
 19. Callaway, J. (1959). Model for Lattice Thermal Conductivity at Low Temperatures. *Physical Review*, 113(4), 1046–1051. <https://doi.org/10.1103/physrev.113.1046>
 20. He, J., Kanatzidis, M. G., & Dravid, V. P. (2013). High performance bulk thermoelectrics via a panoscopic approach. *Materials Today*, 16(5), 166–176. <https://doi.org/10.1016/j.mattod.2013.05.004>
 21. Yang, L., Chen, Z., Dargusch, M. S., & Zou, J. (2017). High performance thermoelectric materials: progress and their applications. *Advanced Energy Materials*, 8(6). <https://doi.org/10.1002/aenm.201701797>
 22. Cao, Y., Sheng, Y., Li, X., Xi, L., & Yang, J. (2022). Application of materials genome methods in thermoelectrics. *Frontiers in Materials*, 9. <https://doi.org/10.3389/fmats.2022.861817>
 23. Tang, B., Lu, Y., Zhou, J., Chouhan, T., Wang, H., Golani, P., Xu, M., Xu, Q., Guan, C., & Liu, Z. (2020). Machine learning-guided synthesis of advanced inorganic materials. *Materials Today*, 41, 72–80. <https://doi.org/10.1016/j.mattod.2020.06.010>

24. Russell, S. J., & Norvig, P. (2021). Artificial intelligence: A modern approach (4th ed.). *Pearson*.
25. Bishop, C. M. (2006). Pattern recognition and machine learning. *Springer*.
26. Samuel, A. L. (1959). Some studies in machine learning using the game of checkers. *IBM Journal of Research and Development*, 3(3), 210-229. <https://doi.org/10.1147/rd.33.0210>.
27. National Science and Technology Council. (2011). Materials Genome Initiative for Global Competitiveness. *Office of Science and Technology Policy*. <https://www.mgi.gov>.
28. Hegde, V. I., Borg, C. K. H., del Rosario, Z., Kim, Y., Hutchinson, M., Antono, E., Ling, J., Saxe, P., Saal, J. E., & Meredig, B. (2023). Quantifying uncertainty in high-throughput density functional theory: A comparison of AFLOW, Materials Project, and OQMD. *Physical Review Materials*, 7(5). <https://doi.org/10.1103/physrevmaterials.7.053805>
29. Korop, M. M. (2023). Machine learning in thermoelectric materials science. *Journal of Thermoelectricity*, (1), 44–54. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2023-1-44-54>
30. Hey, T., Tansley, S., & Tolle, K. (Eds.). (2009). The fourth paradigm: data-intensive scientific discovery. *Microsoft Research*. <https://www.microsoft.com/en-us/research/publication/fourth-paradigm-data-intensive-scientific-discovery>.
31. Chen, W., Pöhls, J.-H., Hautier, G., Broberg, D., Bajaj, S., Aydemir, U., Gibbs, Z. M., Zhu, H., Asta, M., Snyder, G. J., Meredig, B., White, M. A., Persson, K., & Jain, A. (2016). Understanding thermoelectric properties from high-throughput calculations: trends, insights, and comparisons with experiment. *Journal of Materials Chemistry C*, 4(20), 4414–4426. <https://doi.org/10.1039/c5tc04339e>
32. Murphy, K. P. (2012). Machine learning: A probabilistic perspective. *MIT Press*.
33. Barua, N. K., Lee, S., Oliynyk, A. O., & Kleinke, H. (2024). Thermoelectric Material Performance (zT) Predictions with Machine Learning. *ACS Applied Materials*

- Interfaces, 17(1), 1662–1673. <https://doi.org/10.1021/acsami.4c19149>
34. Barua, N. K., Lee, S., Oliynyk, A. O., & Kleinke, H. (2025). Recent strides in artificial intelligence for predicting thermoelectric properties and materials discovery. *Journal of Physics: Energy*, 7(2), 021001. <https://doi.org/10.1088/2515-7655/adba87>
 35. Hastie, T., Tibshirani, R., & Friedman, J. (2009). The elements of statistical learning. *In Springer Series in Statistics*. Springer New York. <https://doi.org/10.1007/978-0-387-84858-7>
 36. Hoerl, A. E., & Kennard, R. W. (1970). Ridge regression: biased estimation for nonorthogonal problems. *Technometrics*, 12(1), 55–67. <https://doi.org/10.1080/00401706.1970.10488634>
 37. Tibshirani, R. (1996). Regression shrinkage and selection via the lasso. *Journal of the Royal Statistical Society Series B: Statistical Methodology*, 58(1), 267–288. <https://doi.org/10.1111/j.2517-6161.1996.tb02080.x>
 38. Zou, H., & Hastie, T. (2005). regularization and variable selection via the elastic net. *Journal of the Royal Statistical Society Series B: Statistical Methodology*, 67(2), 301–320. <https://doi.org/10.1111/j.1467-9868.2005.00503.x>
 39. Furmanchuk, A., Saal, J. E., Doak, J. W., Olson, G. B., Choudhary, A., & Agrawal, A. (2017). Prediction of seebeck coefficient for compounds without restriction to fixed stoichiometry: A machine learning approach. *Journal of Computational Chemistry*, 39(4), 191–202. <https://doi.org/10.1002/jcc.25067>
 40. Cortes, C., & Vapnik, V. (1995). Support-vector networks. *Machine Learning*, 20(3), 273–297. <https://doi.org/10.1007/bf00994018>
 41. Ma, S., Rao, Y., Huang, X., & Ju, S. (2024). High-throughput discovery of metal oxides with high thermoelectric performance via interpretable feature engineering on small data. *Materials Today Physics*, 45, 101457. <https://doi.org/10.1016/j.mtphys.2024.101457>

42. Breiman, L. (2001). Random forests. *Machine Learning*, 45(1), 5–32. <https://doi.org/10.1023/a:1010933404324>
43. Breiman, L., Friedman, J. H., Olshen, R. A., & Stone, C. J. (1984). Classification and regression trees. *Wadsworth*.
44. Efron, B. (1979). Bootstrap methods: another look at the jackknife. *The Annals of Statistics*, 7(1). <https://doi.org/10.1214/aos/1176344552>
45. Chen, T., & Guestrin, C. (2016). XGBoost. In Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (pp. 785–794). <https://doi.org/10.1145/2939672.2939785>
46. Friedman, J. H. (2001). Greedy function approximation: A gradient boosting machine. *The Annals of Statistics*, 29(5). <https://doi.org/10.1214/aos/1013203451>
47. K E, V., & Padhan, P. (2025). Thermoelectric properties in skutterudite materials: integrating experimental data, density functional theory, and machine learning. *ACS Applied Energy Materials*, 8(14), 10658–10670. <https://doi.org/10.1021/acsaem.5c00445>
48. Lundberg, S., & Lee, S.-I. (2017). A unified approach to interpreting model predictions (Version 2). *arXiv*. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.1705.07874>
49. Na, G. S. (2023). Artificial intelligence for learning material synthesis processes of thermoelectric materials. *Chemistry of Materials*, 35(19), 8272–8280. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.3c01834>
50. Jolliffe, I. T., & Cadima, J. (2016). Principal component analysis: a review and recent developments. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 374(2065), 20150202. <https://doi.org/10.1098/rsta.2015.0202>
51. Choudhary, K., & Tavazza, F. (2019). Convergence and machine learning predictions of Monkhorst-Pack k-points and plane-wave cut-off in high-throughput DFT calculations. *Computational Materials Science*, 161, 300–308.

<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.02.006>

52. Fang, Y., & Shao, H. (2024). Wenzhou TE: A first-principle-calculated thermoelectric materials database. *Materials*, 17(10), 2200. <https://doi.org/10.3390/ma17102200>
53. MacQueen, J. B. (1967). Some methods for classification and analysis of multivariate observations. In L. M. Le Cam & J. Neyman (Eds.), *Proceedings of the Fifth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability* (Vol. 1, pp. 281–297). University of California Press.
54. Ester, M., Kriegel, H. P., Sander, J., & Xu, X. (1996). A density-based algorithm for discovering clusters in large spatial databases with noise. In *Proceedings of the 2nd International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining* (pp. 226–231). AAAI Press.
55. van der Maaten, L., & Hinton, G. (2008). Visualizing data using t-SNE. *Journal of Machine Learning Research*, 9(86), 2579–2605.
56. Sutton, R. S., & Barto, A. G. (2018). *Reinforcement learning: an introduction* (2nd ed.). The MIT Press.
57. Chaudhari, C. N., Rtamanyu, N. J., Shreya Kunda, N. S., Pranave, K. C., Pandey, M., Sruthi, S., & Khanna, M. (2025). Optimizing thermoelectric energy harvesting using deep reinforcement learning for dynamic energy management and system efficiency. *Scientific Reports*, 15(1). <https://doi.org/10.1038/s41598-025-27210-7>
58. Cao, Z., & Wang, L. (2026). Reinforcement fine-tuning for materials design. *Physical Review B*, 113(2). <https://doi.org/10.1103/45zh-44bg>
59. Goodfellow, I., Bengio, Y., & Courville, A. (2016). *Deep learning*. MIT Press.
60. Hornik, K. (1991). Approximation capabilities of multilayer feedforward networks. *Neural Networks*, 4(2), 251–257. [https://doi.org/10.1016/0893-6080\(91\)90009-t](https://doi.org/10.1016/0893-6080(91)90009-t)
61. Pan, S. J., & Yang, Q. (2010). A survey on transfer learning. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 22(10), 1345–1359.

<https://doi.org/10.1109/tkde.2009.191>

62. Yosinski, J., Clune, J., Bengio, Y., & Lipson, H. (2014). How transferable are features in deep neural networks? *Advances in Neural Information Processing Systems*, 27, 3320–3328.
63. Shorten, C., & Khoshgoftaar, T. M. (2019). A survey on image data augmentation for deep learning. *Journal of Big Data*, 6(1). <https://doi.org/10.1186/s40537-019-0197-0>
64. Kim, Y., Kim, Y., Yang, C., Park, K., Gu, G. X., & Ryu, S. (2021). Deep learning framework for material design space exploration using active transfer learning and data augmentation. *Npj Computational Materials*, 7(1). <https://doi.org/10.1038/s41524-021-00609-2>
65. Murdoch, W. J., Singh, C., Kumbier, K., Abbasi-Asl, R., & Yu, B. (2019). Definitions, methods, and applications in interpretable machine learning. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 116(44), 22071–22080. <https://doi.org/10.1073/pnas.1900654116>
66. Xie, T., & Grossman, J. C. (2018). Crystal graph convolutional neural networks for an accurate and interpretable prediction of material properties. *Physical Review Letters*, 120(14). <https://doi.org/10.1103/physrevlett.120.145301>
67. Chen, C., Ye, W., Zuo, Y., Zheng, C., & Ong, S. P. (2019). Graph networks as a universal machine learning framework for molecules and crystals. *Chemistry of Materials*, 31(9), 3564–3572. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.9b01294>
68. Dunn, A., Wang, Q., Ganose, A., Dopp, D., & Jain, A. (2020). Benchmarking materials property prediction methods: the matbench test set and automatminer reference algorithm. *Npj Computational Materials*, 6(1). <https://doi.org/10.1038/s41524-020-00406-3>
69. Na, G. S., & Chang, H. (2022). A public database of thermoelectric materials and system-identified material representation for data-driven discovery. *Npj*

- Computational Materials*, 8(1). <https://doi.org/10.1038/s41524-022-00897-2>
70. Calderon, C. E., Plata, J. J., Toher, C., Oses, C., Levy, O., Fornari, M., Natan, A., Mehl, M. J., Hart, G., Buongiorno Nardelli, M., & Curtarolo, S. (2015). The AFLOW standard for high-throughput materials science calculations. *Computational Materials Science*, 108, 233–238. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2015.07.019>
 71. Gaultois, M. W., Sparks, T. D., Borg, C. K. H., Seshadri, R., Bonificio, W. D., & Clarke, D. R. (2013). Data-driven review of thermoelectric materials: performance and resource considerations. *Chemistry of Materials*, 25(15), 2911–2920. <https://doi.org/10.1021/cm400893e>
 72. Ward, L., Agrawal, A., Choudhary, A., & Wolverton, C. (2016). A general-purpose machine learning framework for predicting properties of inorganic materials. *Npj Computational Materials*, 2(1). <https://doi.org/10.1038/npjcompumats.2016.28>
 73. Choudhary, K., DeCost, B., Chen, C., Jain, A., Tavazza, F., Cohn, R., Park, C. W., Choudhary, A., Agrawal, A., Billinge, S. J. L., Holm, E., Ong, S. P., & Wolverton, C. (2022). Recent advances and applications of deep learning methods in materials science. *Npj Computational Materials*, 8(1). <https://doi.org/10.1038/s41524-022-00734-6>
 74. Yuan, H. M., Han, S. H., Hu, R., Jiao, W. Y., Li, M. K., Liu, H. J., & Fang, Y. (2022). Machine learning for accelerated prediction of the seebeck coefficient at arbitrary carrier concentration. *Materials Today Physics*, 25, 100706. <https://doi.org/10.1016/j.mtphys.2022.100706>
 75. Ricci, F., Chen, W., Aydemir, U., Snyder, G. J., Rignanese, G.-M., Jain, A., & Hautier, G. (2017). An ab initio electronic transport database for inorganic materials. *Scientific Data*, 4(1). <https://doi.org/10.1038/sdata.2017.85>
 76. Madsen, G. K. H., & Singh, D. J. (2006). BoltzTraP. A code for calculating band-structure dependent quantities. *Computer Physics Communications*, 175(1), 67–71. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2006.03.007>

77. Han, G., Sun, Y., Feng, Y., Lin, G., & Lu, N. (2021). Machine learning regression guided thermoelectric materials discovery – A Review. *ES Materials & Manufacturing*. <https://doi.org/10.30919/esmm5f451>
78. Wang, Z., Adachi, Y., & Chen, Z. (2019). Processing optimization and property predictions of hot-extruded Bi–Te–Se thermoelectric materials via Machine Learning. *Advanced Theory and Simulations*, 3(1). <https://doi.org/10.1002/adts.201900197>
79. Liu, W., Zhang, Q., Lan, Y., Chen, S., Yan, X., Zhang, Q., Wang, H., Wang, D., Chen, G., & Ren, Z. (2011). Thermoelectric property studies on Cu-doped n-type $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ nanocomposites. *Advanced Energy Materials*, 1(4), 577–587. <https://doi.org/10.1002/aenm.201100149>
80. Anatychuk, L. I., & Korop, M. M. (2023). Application of machine learning to predict the properties of Bi_2Te_3 -based thermoelectric materials. *Journal of Thermoelectricity*, (2), 59–71. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2023-2-59-71>
81. LeCun, Y., Bengio, Y., & Hinton, G. (2015). Deep learning. *Nature*, 521(7553), 436–444. <https://doi.org/10.1038/nature14539>
82. Holm, E. A., Cohn, R., Gao, N., Kitahara, A. R., Matson, T. P., Lei, B., & Yarasi, S. R. (2020). Overview: computer vision and machine learning for microstructural characterization and analysis. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 51(12), 5985–5999. <https://doi.org/10.1007/s11661-020-06008-4>
83. Hirabayashi, Y., Iga, H., Ogawa, H., Tokuta, S., Shimada, Y., & Yamamoto, A. (2024). Deep learning for three-dimensional segmentation of electron microscopy images of complex ceramic materials. *Npj Computational Materials*, 10(1). <https://doi.org/10.1038/s41524-024-01226-5>
84. Durmaz, A. R., Müller, M., Lei, B., Thomas, A., Britz, D., Holm, E. A., Eberl, C., Mücklich, F., & Gumbsch, P. (2021). A deep learning approach for complex microstructure inference. *Nature Communications*, 12(1).

<https://doi.org/10.1038/s41467-021-26565-5>

85. Roberts, G., Haile, S. Y., Sainju, R., Edwards, D. J., Hutchinson, B., & Zhu, Y. (2019). Deep learning for semantic segmentation of defects in advanced STEM images of steels. *Scientific Reports*, 9(1). <https://doi.org/10.1038/s41598-019-49105-0>
86. Wilkinson, A. J., & Britton, T. Ben. (2012). Strains, planes, and EBSD in materials science. *Materials Today*, 15(9), 366–376. [https://doi.org/10.1016/s1369-7021\(12\)70163-3](https://doi.org/10.1016/s1369-7021(12)70163-3)
87. ASTM International. (2021). ASTM E112-13: Standard test methods for determining average grain size. *ASTM International*. <https://www.astm.org/e0112-13r21.html>
88. Vincent, L., & Soille, P. (1991). Watersheds in digital spaces: an efficient algorithm based on immersion simulations. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 13(6), 583–598. <https://doi.org/10.1109/34.87344>
89. Otsu, N. (1979). A threshold selection method from gray-level histograms. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics*, 9(1), 62–66. <https://doi.org/10.1109/tsmc.1979.4310076>
90. Gupta, A. K., Gupta, S., Ghosh, S. K., & Ganguly, S. (2026). Computer vision of ferrite, pearlite, austenite, bainite, and martensite: A deep learning framework toward high-throughput analysis of steel microstructure. *Computational Materials Science*, 261, 114319. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2025.114319>
91. Torquato, S. (2002). Random heterogeneous materials. In interdisciplinary applied mathematics. *Springer New York*. <https://doi.org/10.1007/978-1-4757-6355-3>
92. Anantatamukala, A., Krishna, K. V. M., & Dahotre, N. B. (2023). Generative adversarial networks assisted machine learning based automated quantification of grain size from scanning electron microscope back scatter images. *Materials Characterization*, 206, 113396. <https://doi.org/10.1016/j.matchar.2023.113396>
93. Bordas, A., Zhang, J., & Nino, J. C. (2022). Application of deep learning workflow

- for autonomous grain size analysis. *Molecules*, 27(15), 4826. <https://doi.org/10.3390/molecules27154826>
94. Goodfellow, I. J., Pouget-Abadie, J., Mirza, M., Xu, B., Warde-Farley, D., Ozair, S., Courville, A., & Bengio, Y. (2014). *Generative adversarial nets*. In *Advances in Neural Information Processing Systems* (Vol. 27, pp. 2672–2680).
 95. Anantatamukala, A., Krishna, K. V. M., & Dahotre, N. B. (2023). Generative adversarial networks assisted machine learning based automated quantification of grain size from scanning electron microscope back scatter images. *Materials Characterization*, 206, 113396. <https://doi.org/10.1016/j.matchar.2023.113396>
 96. Li, X., Zhang, Y., Zhao, H., Burkhart, C., Brinson, L. C., & Chen, W. (2018). A transfer learning approach for microstructure reconstruction and structure-property predictions. *Scientific Reports*, 8(1). <https://doi.org/10.1038/s41598-018-31571-7>
 97. Shen, S., Lu, H., Sadoughi, M., Hu, C., Nemani, V., Thelen, A., Webster, K., Darr, M., Sidon, J., & Kenny, S. (2021). A physics-informed deep learning approach for bearing fault detection. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 103, 104295. <https://doi.org/10.1016/j.engappai.2021.104295>
 98. Deng, T., Qiu, P., Yin, T., Li, Z., Yang, J., Wei, T., & Shi, X. (2024). High-throughput strategies in the discovery of thermoelectric materials. *Advanced Materials*, 36(13). <https://doi.org/10.1002/adma.202311278>
 99. Karniadakis, G. E., Kevrekidis, I. G., Lu, L., Perdikaris, P., Wang, S., & Yang, L. (2021). Physics-informed machine learning. *Nature Reviews Physics*, 3(6), 422–440. <https://doi.org/10.1038/s42254-021-00314-5>
 100. Fan, T., & Oganov, A. R. (2025). Combining machine-learning models with first-principles high-throughput calculations to accelerate the search for promising thermoelectric materials. *Journal of Materials Chemistry C*, 13(3), 1439–1448. <https://doi.org/10.1039/d4tc03403a>
 101. Aspuru-Guzik, A., Lindh, R., & Reiher, M. (2018). The matter simulation

- (R)evolution. *ACS Central Science*, 4(2), 144–152. <https://doi.org/10.1021/acscentsci.7b00550>
102. Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378, 686–707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
 103. Chen, W.-H., Aishwarya, K., & Sardar, K. (2025). Statistical and artificial intelligence approaches towards the optimization of thermoelectric materials synthesis: a review. *Energy Materials*, 5(9). <https://doi.org/10.20517/energymater.2024.311>
 104. Chen, W.-H., Carrera Uribe, M., Kwon, E. E., Lin, K.-Y. A., Park, Y.-K., Ding, L., & Saw, L. H. (2022). A comprehensive review of thermoelectric generation optimization by statistical approach: Taguchi method, analysis of variance (ANOVA), and response surface methodology (RSM). *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 169, 112917. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2022.112917>
 105. Zhu, H., Deng, Z., Qu, Y., He, P., & Geng, H. (2025). Strong texture in nanostructured bulk $\text{Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_3$ leads to superior thermoelectric and mechanical performance. *Journal of Materials Science and Technology*, 232, 267–275. <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2024.12.086>
 106. Li, R., Lee, E., & Luo, T. (2021). Physics-informed neural networks for solving multiscale mode-resolved phonon Boltzmann transport equation. *Materials Today Physics*, 19, 100429. <https://doi.org/10.1016/j.mtphys.2021.100429>
 107. Settles, B. (2012). Active learning. in synthesis lectures on artificial intelligence and machine learning. *Springer International Publishing*. <https://doi.org/10.1007/978-3-031-01560-1>
 108. Hou, Z., Takagiwa, Y., Shinohara, Y., Xu, Y., & Tsuda, K. (2019). Machine-learning-assisted development and theoretical consideration for the $\text{Al}_2\text{Fe}_3\text{Si}_3$ thermoelectric

- material. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 11(12), 11545–11554. <https://doi.org/10.1021/acsami.9b02381>
109. Srinivas, Niranjana & Krause, Andreas & Kakade, Sham & Seeger, Matthias. (2010). Gaussian process optimization in the bandit setting: no regret and experimental design. *ICML 2010 - Proceedings, 27th International Conference on Machine Learning*. 1015-1022.
 110. Headley, C. V., Herrera del Valle, R. J., Ma, J., Balachandran, P., Ponnambalam, V., LeBlanc, S., Kirsch, D., & Martin, J. B. (2024). The development of an augmented machine learning approach for the additive manufacturing of thermoelectric materials. *Journal of Manufacturing Processes*, 116, 165–175. <https://doi.org/10.1016/j.jmapro.2024.02.045>
 111. Sanchez-Lengeling, B., & Aspuru-Guzik, A. (2018). Inverse molecular design using machine learning: Generative models for matter engineering. *Science*, 361(6400), 360–365. <https://doi.org/10.1126/science.aat2663>
 112. Zunger, A. (2018). Inverse design in search of materials with target functionalities. *Nature Reviews Chemistry*, 2(4). <https://doi.org/10.1038/s41570-018-0121>
 113. Tang, Jianan (2021). Deep learning-guided prediction of material's microstructures and applications to advanced manufacturing. *Dissertation, Clemson University*. [https://open.clemson.edu/all_dissertations/2936]
 114. Minhas, H., Jena, M. K., Sharma, R. K., & Pathak, B. (2024). Machine learning-driven inverse design and role of dopant for tuning thermoelectric efficiency. *ACS Applied Electronic Materials*. <https://doi.org/10.1021/acsaelm.4c00808>
 115. Korop, M. M., & Prybyla, A. V. (2025). Application of LLM to search and systematize the properties of thermoelectric materials in scientific literature. *Journal of Thermoelectricity*, (1), 16–25. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2025-1-16-25>
 116. Liu, S., Liu, W., Lyu, W., Gao, H., Golberg, D. V., & Chen, Z. (2025). Defect engineering in van der waals layer-structured Bi₂Te₃-based materials. *cMat*, 2(2).

<https://doi.org/10.1002/cmt2.70009>

117. Yu, Y., Wu, Z., Cojocaru-Mirédin, O., Zhu, B., Wang, X.-Y., Gao, N., Huang, Z.-Y., & Zu, F.-Q. (2017). Dependence of solidification for $\text{Bi}_2\text{Te}_{3-x}\text{Se}_x$ alloys on their liquid states. *Scientific Reports*, 7(1). <https://doi.org/10.1038/s41598-017-02507-4>
118. Hasanova, G. S., Aghazade, A. I., Imamaliyeva, S. Z., Yusibov, Y. A., & Babanly, M. B. (2021). Refinement of the phase diagram of the Bi-Te system and the thermodynamic properties of lower bismuth tellurides. *JOM*, 73(5), 1511–1521. <https://doi.org/10.1007/s11837-021-04621-1>
119. Guan, Z.-P., & Dunand, D. C. (2013). Compressive creep behavior of cast Bi_2Te_3 . *Materials Science and Engineering: A*, 565, 321–325. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2012.12.052>
120. Fleurial, J. P., Gailliard, L., Triboulet, R., Scherrer, H., & Scherrer, S. (1988). Thermal properties of high quality single crystals of bismuth telluride – Part I: Experimental characterization. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 49(10), 1237–1247. [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(88\)90182-5](https://doi.org/10.1016/0022-3697(88)90182-5)
121. Artifex. (2026). *pymupdf4llm* (Version 0.3.4) [Computer software]. Python Package Index. <https://pypi.org/project/pymupdf4llm/>
122. Singer-Vine, J. (2026). pdfplumber (Version 0.11.9) [Computer software]. Python Package Index. <https://pypi.org/project/pdfplumber/>
123. Smock, B., Pesala, R., & Abraham, R. (2022). PubTables-1M: Towards comprehensive table extraction from unstructured documents. In 2022 IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR) (pp. 4624–4632). IEEE. 2022 *IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*. <https://doi.org/10.1109/cvpr52688.2022.00459>
124. Carion, N., Massa, F., Synnaeve, G., Usunier, N., Kirillov, A., & Zagoruyko, S. (2020). End-to-end object detection with transformers (Version 3). *arXiv*. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.2005.12872>

125. Tesseract OCR. (2021). Tesseract open source OCR engine (Version 5.0.0) [Computer software]. *GitHub*. <https://github.com/tesseract-ocr/tesseract>
126. Gervais, P., Fadeeva, A., & Maksai, A. (2024). MathWriting: A dataset for handwritten mathematical expression recognition (Version 2). *arXiv*. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.2404.10690>
127. Carvalho, M., & Martins, B. (2025). Efficient architectures for high resolution vision-language models (Version 2). *arXiv*. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.2501.02584>
128. Li, M., Lv, T., Chen, J., Cui, L., Lu, Y., Florencio, D., Zhang, C., Li, Z., & Wei, F. (2021). TrOCR: Transformer-based optical character recognition with pre-trained models (Version 5). *arXiv*. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.2109.10282>
129. Bao, H., Dong, L., Piao, S., & Wei, F. (2021). BEiT: BERT Pre-training of image transformers (Version 2). *arXiv*. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.2106.08254>
130. Liu, Y., Ott, M., Goyal, N., Du, J., Joshi, M., Chen, D., Levy, O., Lewis, M., Zettlemoyer, L., & Stoyanov, V. (2019). RoBERTa: A robustly optimized BERT pretraining approach (Version 1). *arXiv*. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.1907.11692>
131. Marti, U.-V., & Bunke, H. (2002). The IAM-database: an english sentence database for offline handwriting recognition. *International Journal on Document Analysis and Recognition*, 5(1), 39–46. <https://doi.org/10.1007/s100320200071>
132. Goldsmid, H. J. (2010). **Introduction to thermoelectricity**. Springer.
133. Hong, M., Lyu, W., Wang, Y., Zou, J., & Chen, Z.-G. (2020). Establishing the golden range of seebeck coefficient for maximizing thermoelectric performance. *Journal of the American Chemical Society*, 142(5), 2672–2681. <https://doi.org/10.1021/jacs.9b13272>
134. Ashcroft, N. W., & Mermin, N. D. (1976). **Solid state physics**. Holt, Rinehart and Winston.

135. He, J., & Tritt, T. M. (2017). Advances in thermoelectric materials research: Looking back and moving forward. *Science*, 357(6358). <https://doi.org/10.1126/science.aak9997>
136. Thermal Conductivity. (2004). In T. M. Tritt (Ed.), *Physics of solids and liquids. Springer US*. <https://doi.org/10.1007/b136496>
137. Parker, W. J., Jenkins, R. J., Butler, C. P., & Abbott, G. L. (1961). Flash method of determining thermal diffusivity, heat capacity, and thermal conductivity. *Journal of Applied Physics*, 32(9), 1679–1684. <https://doi.org/10.1063/1.1728417>
138. Harman, T. C. (1958). Special techniques for measurement of thermoelectric properties. *Journal of Applied Physics*, 29(9), 1373–1374. <https://doi.org/10.1063/1.1723445>
139. Valdes, L. (1954). Resistivity measurements on germanium for transistors. *Proceedings of the IRE*, 42(2), 420–427. <https://doi.org/10.1109/jrproc.1954.274680>
140. Ong, S. P., Richards, W. D., Jain, A., Hautier, G., Kocher, M., Cholia, S., Gunter, D., Chevrier, V. L., Persson, K. A., & Ceder, G. (2013). Python materials genomics (pymatgen): A robust, open-source python library for materials analysis. *Computational Materials Science*, 68, 314–319. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2012.10.028>
141. Devlin, J., Chang, M.-W., Lee, K., & Toutanova, K. (2018). BERT: Pre-training of deep bidirectional transformers for language understanding (Version 2). *arXiv*. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.1810.04805>
142. Beltagy, I., Lo, K., & Cohan, A. (2019). SciBERT: A pretrained language model for scientific text. *arXiv*. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.1903.10676>
143. Keraghel, I., Morbieu, S., & Nadif, M. (2024). Recent advances in named entity recognition: a comprehensive survey and comparative study (Version 3). *arXiv*. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.2401.10825>
144. Peng, S., Yuan, K., Gao, L., & Tang, Z. (2021). MathBERT: A pre-trained model for

- mathematical formula understanding (Version 1). *arXiv*.
<https://doi.org/10.48550/ARXIV.2105.00377>
145. Gupta, T., Zaki, M., Krishnan, N. M. A., & Mausam. (2021). MatSciBERT: A materials domain language model for text mining and information extraction (Version 1). *arXiv*. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.2109.15290>
 146. Brown, T. B., Mann, B., Ryder, N., Subbiah, M., Kaplan, J., Dhariwal, P., Neelakantan, A., Shyam, P., Sastry, G., Askell, A., Agarwal, S., Herbert-Voss, A., Krueger, G., Henighan, T., Child, R., Ramesh, A., Ziegler, D. M., Wu, J., Winter, C., Amodei, D. (2020). Language models are few-shot learners (Version 4). *arXiv*.
<https://doi.org/10.48550/ARXIV.2005.14165>
 147. OpenAI, Achiam, J., Adler, S., Agarwal, S., Ahmad, L., Akkaya, I., Aleman, F. L., Almeida, D., Altenschmidt, J., Altman, S., Anadkat, S., Avila, R., Babuschkin, I., Balaji, S., Balcom, V., Baltescu, P., Bao, H., Bavarian, M., Belgum, J., Zoph, B. (2023). GPT-4 technical report (Version 6). *arXiv*.
<https://doi.org/10.48550/ARXIV.2303.08774>
 148. Singh, A., Fry, A., Perelman, A., Tart, A., Ganesh, A., El-Kishky, A., McLaughlin, A., Low, A., Ostrow, A., Ananthram, A., Nathan, A., Luo, A., Helyar, A., Madry, A., Efremov, A., Spyra, A., Baker-Whitcomb, A., Beutel, A., Karpenko, A., Wang, Z. (2026). OpenAI GPT-5 system card (Version 1). *arXiv*.
<https://doi.org/10.48550/ARXIV.2601.03267>
 149. Grattafiori, A., Dubey, A., Jauhri, A., Pandey, A., Kadian, A., Al-Dahle, A., Letman, A., Mathur, A., Schelten, A., Vaughan, A., Yang, A., Fan, A., Goyal, A., Hartshorn, A., Yang, A., Mitra, A., Sravankumar, A., Korenev, A., Hinsvark, A., Ma, Z. (2024). The Llama 3 herd of models (Version 3). *arXiv*.
<https://doi.org/10.48550/ARXIV.2407.21783>
 150. Jiang, A. Q., Sablayrolles, A., Mensch, A., Bamford, C., Chaplot, D. S., Casas, D. de las, Bressand, F., Lengyel, G., Lample, G., Saulnier, L., Lavaud, L. R., Lachaux, M.-

- A., Stock, P., Scao, T. L., Lavril, T., Wang, T., Lacroix, T., & Sayed, W. E. (2023). Mistral 7B (Version 1). *arXiv*. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.2310.06825>
151. Ghosh, S., & Tewari, A. (2025). Automated extraction of material properties using LLM-based AI agents (Version 1). *arXiv*. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.2510.01235>
 152. OpenAI. (2023). API Pricing. <https://openai.com/api/pricing/>
 153. Hu, E. J., Shen, Y., Wallis, P., Allen-Zhu, Z., Li, Y., Wang, S., Wang, L., & Chen, W. (2021). LoRA: Low-rank adaptation of large language models (Version 2). *arXiv*. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.2106.09685>
 154. Dettmers, T., Pagnoni, A., Holtzman, A., & Zettlemoyer, L. (2023). QLoRA: Efficient finetuning of quantized LLMs (Version 1). *arXiv*. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.2305.14314>
 155. Aitken, K., Ramasesh, V. V., Cao, Y., & Maheswaranathan, N. (2021). Understanding how encoder-decoder architectures attend (Version 1). *arXiv*. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.2110.15253>
 156. CoronaWhy. (2020). SciBart: Fine-tuning BART for abstractive summarization of scientific literature [Software]. GitHub. <https://github.com/CoronaWhy/scibart>
 157. Raffel, C., Shazeer, N., Roberts, A., Lee, K., Narang, S., Matena, M., Zhou, Y., Li, W., & Liu, P. J. (2019). Exploring the limits of transfer learning with a unified text-to-text transformer (Version 4). *arXiv*. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.1910.10683>
 158. HumanSignal, Inc. (2025). Label Studio: Data labeling software (Version 1.14) [Computer software]. <https://github.com/HumanSignal/label-studio>
 159. Jaber, Y., Dharmasena, P., Nassif, A., & Nassif, N. (2025). Hyperparameter optimization of neural networks using grid search for predicting HVAC heating coil performance. *Buildings*, 15(15), 2753. <https://doi.org/10.3390/buildings15152753>
 160. Holm, E. A., Cohn, R., Gao, N., Kitahara, A. R., Matson, T. P., Lei, B., & Yarasi, S. R. (2020). Overview: computer vision and machine learning for microstructural

- characterization and analysis. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 51(12), 5985–5999. <https://doi.org/10.1007/s11661-020-06008-4>
161. Alrfou, K., Kordijazi, A., & Zhao, T. (2022). Computer vision methods for the microstructural analysis of materials: The state-of-the-art and future perspectives (Version 1). *arXiv*. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.2208.04149>
 162. Yang, X., Shen, X., Long, J., & Chen, H. (2012). An improved median-based Otsu image thresholding algorithm. *AASRI Procedia*, 3, 468–473. <https://doi.org/10.1016/j.aasri.2012.11.074>
 163. Ronneberger, O., Fischer, P., & Brox, T. (2015). U-Net: Convolutional networks for biomedical image segmentation. In lecture notes in computer science (pp. 234–241). *Springer International Publishing*. https://doi.org/10.1007/978-3-319-24574-4_28
 164. Koonce, B. (2021). ResNet 34. In Convolutional neural networks with Swift for Tensorflow (pp. 51–61). *Apress*. https://doi.org/10.1007/978-1-4842-6168-2_5
 165. Deng, J., Dong, W., Socher, R., Li, L.-J., Kai Li, & Li Fei-Fei. (2009). ImageNet: A large-scale hierarchical image database. In 2009 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (pp. 248–255). IEEE. *2009 IEEE Computer Society Conference on Computer Vision and Pattern Recognition Workshops (CVPR Workshops)*. <https://doi.org/10.1109/cvpr.2009.5206848>
 166. Mitta, D., Chatterjee, S., Speck, O., & Nürnberger, A. (2021). Upgraded W-Net with attention Gates and its application in unsupervised 3D Liver degmentation. In Proceedings of the 10th International Conference on Pattern Recognition Applications and Methods (pp. 488–494). SCITEPRESS - Science and Technology Publications. 10th International Conference on Pattern Recognition Applications and Methods. <https://doi.org/10.5220/0010221504880494> (Original work published as Upgraded W-Net with Attention Gates and Its Application in Unsupervised 3D Liver Segmentation)
 167. Lin, T.-Y., Dollár, P., Girshick, R., He, K., Hariharan, B., & Belongie, S. (2016).

- Feature pyramid networks for object detection (Version 2). *arXiv*. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.1612.03144>
168. Selvaraju, R. R., Cogswell, M., Das, A., Vedantam, R., Parikh, D., & Batra, D. (2016). Grad-CAM: visual explanations from deep networks via gradient-based localization. *arXiv*. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.1610.02391>
 169. Короп, М. М., Прибила, А. В., Лисько, В. В., Пилипко, В. Г., & Халавка, Ю. Б. (2025). Комп'ютерний зір як інструмент кореляційного аналізу зображень мікроструктури термоелектричних матеріалів на основі Bi-Te. *Journal of Thermoelectricity*, (4), 64–75. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2025-4-64-75>
 170. Anatychuk, L. I., Prybyla, A. V., Korop, M. M., Kiziuk, Yu. I., & Konstantynovych, I. A. (2024). Thermoelectric power sources using low-grade heat. *Journal of Thermoelectricity*, (1–2), 90–96. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2024-1-2-90-96>
 171. Anatychuk, L. I., Prybyla, A. V., Korop, M. M., Kiziuk, Yu. V., & Konstantynovych, I. A. (2024). Thermoelectric power sources using low-grade heat. *Journal of Thermoelectricity*, (3), 36–43. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2024-3-36-43>
 172. Anatychuk, L. I., Prybyla, A. V., Korop, M. M., Kiziuk, Yu. I., & Konstantynovych, I. A. (2024). Thermoelectric power sources using low-grade heat. *Journal of Thermoelectricity*, (4), 61–68. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2024-4-61-68>
 173. Korop, M., Prybyla, A., & Lysko, V. (2025). Optimization of spiral anisotropic thermoelectric sensors using machine learning algorithms. In C. Y. Zenkova & O. V. Angelsky (Eds.), *Seventeenth International Conference on Correlation Optics* (p. 159). *SPIE. Correlation Optics (COR 2025)*. <https://doi.org/10.1117/12.3093323>
 174. Анатичук, Л. І., Лисько, П. С., & Горський, П. В. (2024). Методи та обладнання для вимірювання параметрів термоелектричних матеріалів. *Інститут термоелектрики*.

ДОДАТКИ

Додаток 1

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації:

Наукові праці у виданнях, проіндексованих у наукометричній базі даних Scopus:

1. Korop, M. (2023). Machine learning in thermoelectric materials science. *Journal of Thermoelectricity*, (1), 44–54. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2023-1-44-54> (Scopus).
2. Anatychuk, L., Korop, M. (2023). Application of machine learning to predict the properties of Bi₂Te₃ based thermoelectric materials. *Journal of Thermoelectricity*, (2), 59–71. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2023-2-59-71> (Scopus).

Внесок авторів: **Короп М.:** розробка методології застосування машинного навчання, збір та підготовка навчальних даних, навчання моделей, аналіз отриманих результатів, написання статті; внесок Анатичука Л.: наукове керівництво, формулювання концепції дослідження, обговорення результатів.

3. Anatychuk, L., Prybyla, A., Korop, M., Kiziuk, Y., Konstantynovych, I. (2024). Thermoelectric power sources using low-grade heat: Part 1. *Journal of Thermoelectricity*, (1-2), 90–96. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2024-1-2-90-96> (Scopus).

Внесок авторів: **Короп М.:** пошук та аналіз літературних джерел, участь у комп'ютерному моделюванні; внесок Анатичука Л.: ідея дослідження, наукове керівництво, обговорення результатів; внесок Прибили А.: проведення комп'ютерного проектування, постановка дослідження, аналіз результатів; внесок Кізюка Ю., Константиновича І.: проведення розрахунків та обговорення

результатів.

4. Anatychuk, L., Prybyla, A., Korop, M., Kiziuk, Y., Konstantynovych, I. (2024). Thermoelectric power sources using low-grade heat: Part 2. *Journal of Thermoelectricity*, (3), 36–43. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2024-3-36-43> (Scopus).

Внесок авторів: **Короп М.:** пошук та аналіз літературних джерел, участь у комп'ютерному моделюванні; внесок Анатичука Л.: ідея дослідження, наукове керівництво, обговорення результатів; внесок Прибили А.: проведення комп'ютерного проектування, постановка дослідження, аналіз результатів; внесок Кізюка Ю., Константиновича І.: проведення розрахунків та обговорення результатів.

5. Anatychuk, L., Prybyla, A., Korop, M., Kiziuk, Y., Konstantynovych, I. (2024). Thermoelectric power sources using low-grade heat: Part 3. *Journal of Thermoelectricity*, (4), 61–68. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2024-4-61-68> (Scopus).

Внесок авторів: **Короп М.:** пошук та аналіз літературних джерел, участь у комп'ютерному моделюванні; внесок Анатичука Л.: ідея дослідження, наукове керівництво, обговорення результатів; внесок Прибили А.: проведення комп'ютерного проектування, постановка дослідження, аналіз результатів; внесок Кізюка Ю., Константиновича І.: проведення розрахунків та обговорення результатів.

6. Korop, M., Prybyla, A. (2025). Application of LLM to Search and Systematize the Properties of Thermoelectric Materials in Scientific Literature. *Journal of Thermoelectricity*, (1), 16–25. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2025-1-16-25> (Scopus).

Внесок авторів: **Короп М.:** розробка методології застосування великих мовних моделей, реалізація алгоритмів пошуку та систематизації даних, аналіз

результатів, написання статті; внесок Прибили А.: наукове керівництво, обговорення результатів, участь у формулюванні висновків.

7. Korop, M., Prybyla, A., Lysko, V., Pylypko, V., & Khalavka, Y. (2025). Computer Vision as a Tool for Correlation Analysis of Images of the Microstructure of Bi-Te-based Thermoelectric Materials. *Journal of Thermoelectricity*, (4), 64–75. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2025-4-64-75> (Scopus).

Внесок авторів: **Короп М.:** розробка методології комп'ютерного зору, реалізація алгоритмів кореляційного аналізу мікроструктурних зображень, проведення обчислювальних експериментів, аналіз результатів, написання статті; внесок Прибили А.: наукове керівництво, обговорення результатів; внесок Лиська В.: обговорення результатів; внесок Пилипко В.: керівництво вимірюванням характеристик, обговорення результатів; внесок Халавки Ю.: співнаукове керівництво, керівництво вимірюванням характеристик, обговорення результатів.

8. Korop M., Prybyla A., and Lysko V. Optimization of spiral anisotropic thermoelectric sensors using machine learning algorithms. Proceedings of SPIE the International Society for Optical Engineering. 13813, *Seventeenth International Conference on Correlation Optics*, 138133A (10 November 2025) <https://doi.org/10.1117/12.3093323> (Scopus).

Внесок авторів: **Короп М.:** розробка методології оптимізації, реалізація алгоритмів машинного навчання для оптимізації спіральних анізотропних сенсорів, аналіз результатів, написання статті; внесок Прибили А.: наукове керівництво, обговорення результатів; внесок Лиська В.: обговорення результатів.

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

9. Korop M., Prybyla A., Lysko V., Methods, and equipment for optimization of Bi-Te based thermoelectric materials using artificial intelligence. Proceedings of the 41st International and 7th Asian Conference on Thermoelectrics (*ICT2025*), Sendai,

Japan, 2025. P. 64. URL:
https://ict2025.jp/item/ICT2025_Poster_abstract_protected.pdf.

Внесок авторів: **Короп М.:** розробка методології із застосуванням штучного інтелекту для оптимізації термоелектричних матеріалів на основі Bi-Te, проведення досліджень, написання тез; внесок Прибили А.: наукове керівництво, обговорення результатів; внесок Лиська В.: обговорення результатів.

10. Korop M., Prybyla A., Lysko V., Optimization of spiral anisotropic thermoelectric sensors using machine learning algorithms. *The 17th International Conference "Correlation Optics 2025"*, 8-12 September, Chernivtsi, Ukraine. https://zoom.us/jb/doc/_1Iq9kKFROCFhBOx6QCEPg/p/238129514086400.

Внесок авторів: **Короп М.:** розробка методології оптимізації спіральних анізотропних термоелектричних сенсорів із застосуванням алгоритмів машинного навчання, написання тез; внесок Прибили А.: наукове керівництво, обговорення результатів; внесок Лиська В.: обговорення результатів.

11. Korop M., Korop A., Vakulenko T., Khalavka Y., An extension of MNPBEM toolbox for the simulation of decahedral silver nanoparticles' electromagnetic properties. *The 17th International Conference "Correlation Optics 2025"*, 8-12 September, Chernivtsi, Ukraine. <https://zoom.us/jb/doc/jO1XWGTCT7Gcz7YDP-lghw/p/238328434720768>.

Внесок авторів: **Короп М.:** розробка програмного розширення пакету MNPBEM для моделювання електромагнітних властивостей декаедричних наночастинок срібла; внесок Короп А.: експериментальний синтез наночастинок, написання тез, обговорення результатів; внесок Вакуленко Т.: математичний розрахунок форми наночастинок, співавторство тез; внесок Халавки Ю.: наукове керівництво, співавторство тез, обговорення результатів.

12. Korop M., Prybyla A., Lysko V., AI-Based methodology for predicting

thermoelectric material performance from literature data. *XX International Freik Conference on Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems*, 6-10 October, Ivano-Frankivsk, Ukraine. С. 126.
https://conference.pnu.edu.ua/icpttfn/wp-content/uploads/sites/10/2025/10/Abstract-book_-ICPTTFN-XX_2025.pdf.

Внесок авторів: **Короп М.:** розробка AI-методології для прогнозування характеристик термоелектричних матеріалів на основі літературних даних, проведення досліджень, написання тез; внесок Прибили А.: наукове керівництво, обговорення результатів; внесок Лиська В.: обговорення результатів.

Додаток 2**Відомості про апробацію результатів дисертації**

1. International and 7th Asian Conference on Thermoelectrics (ICT2025) (м. Сендай, Японія, 12-16 червня 2025), форма участі – очна з публікацією тез.
2. The 17th International Conference “Correlation Optics 2025” (м. Чернівці, 8-12 вересня 2025), форма участі – очна з публікацією тез.
3. XX International Freik Conference on Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems (м. Івано-Франківськ, 6-10 жовтня 2025), форма участі – дистанційна з публікацією тез.

Додаток 3

Відомості про використання результатів дисертаційного дослідження



НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ ТА МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

ІНСТИТУТ ТЕРМОЕЛЕКТРИКИвул. Науки, 1, м. Чернівці, 58029, тел.: +380 (372) 550202
e-mail: anatyeh@gmail.com, http://ite.cv.ua
Код ЄДРПОУ 0209609127.02.2026 № 01/58

На № _____ від _____

А К Т**використання результатів дисертаційної роботи**

здобувача наукового ступеня доктора філософії

КОРОПА Миколи Миколайовича**на тему «ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДІВ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ ТА
МАШИННОГО НАВЧАННЯ ДЛЯ АВТОМАТИЗАЦІЇ ДОСЛІДЖЕНЬ
ЕКСТРУДОВАНИХ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИХ МАТЕРІАЛІВ НА
ОСНОВІ Bi-Te»**

Даним актом підтверджується, що результати дисертаційної роботи КОРОПА М.М., представленої на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 105 – Прикладна фізика та наноматеріали, використано в Інституті термоелектрики НАН України та МОН України.

Використані результати являють собою:

1) комп'ютерну програму для автоматизованого збору, систематизації та зберігання термоелектричних параметрів матеріалів на основі Bi-Te із наукової літератури з використанням великих мовних моделей;

2) програмний інструмент мультимодального аналізу мікроструктури екструдованих термоелектричних матеріалів на основі комп'ютерного зору.

Наведені результати використовуються при виконанні 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). Вони дозволяють скоротити час пошуку та систематизації інформації про властивості, склад і способи отримання термоелектричних матеріалів; підвищити об'єктивність аналізу мікроструктури матеріалу та сприятимуть прискоренню розроблення та оптимізації термоелектричних матеріалів із заданими функціональними характеристиками.

В. о. директора



Валентин ЛИСЬКО