

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ**  
**ТЕРНОПІЛЬСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**  
**ІМЕНІ ІВАНА ПУЛЮЯ**

Кваліфікаційна наукова  
праця на правах рукопису

**ТИМОЩУК ДМИТРО ІВАНОВИЧ**

УДК 004.8: 539.3:539.4

**ДИСЕРТАЦІЯ**

*МЕТОДИ ТА МОДЕЛІ МАШИННОГО НАВЧАННЯ ДЛЯ ПРОГНОЗУВАННЯ  
ГІСТЕРЕЗИСНОЇ ПОВЕДІНКИ СПЛАВІВ З ПАМ'ЯТТЮ ФОРМИ*

122 – Комп'ютерні науки

12 – Інформаційні технології

Подається на здобуття ступеня доктора філософії

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

\_\_\_\_\_ /Д. І. Тимощук/

Науковий керівник Ясній Олег Петрович, доктор технічних наук, професор

Тернопіль - 2026

## АНОТАЦІЯ

*Тимощук Д.І.* Методи та моделі машинного навчання для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису. Дисертація на здобуття ступеня доктора філософії за спеціальністю 122 “Комп’ютерні науки”. – Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, Тернопіль, 2026.

Підготовка здійснювалася на кафедрі систем штучного інтелекту та аналізу даних Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя Міністерства освіти і науки України.

Дисертація стосується розв’язання науково-практичної задачі побудови, оцінювання та порівняльного аналізу моделей машинного навчання для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми за умов циклічного навантаження та інтерпретації отриманих прогнозів засобами пояснюваного штучного інтелекту.

Актуальність дослідження зумовлена широким застосуванням сплавів з пам'яттю форми в сучасних технічних системах, де важливими є висока точність прогнозування їхньої деформації, оцінювання впливу функціональної втоми, скорочення обсягу дорогих і тривалих експериментальних досліджень, а також забезпечення фізично обґрунтованої інтерпретації результатів моделювання. Особливу складність становить прогнозування еволюції гістерезисних петель на циклах навантаження, що виходять за межі навчального діапазону, оскільки залежність між напруженням і деформацією в таких матеріалах має нелінійний характер, залежить від історії навантаження, частоти та накопичення втомних ефектів

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

У першому розділі виконано аналіз предметної області. Розглянуто фізичні основи гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми, природу ефекту пам'яті форми та надпружності, а також особливості формування гістерезисних петель у координатах “напруження–деформація”. Проаналізовано вплив частоти навантаження, кількості циклів і фазових перетворень на гістерезисну поведінку сплавів з пам'яттю форми. Здійснено аналіз сучасних досліджень у галузі застосування методів машинного навчання для прогнозування властивостей SMA та використання методів пояснюваного штучного інтелекту для інтерпретації результатів. На основі аналізу літератури обґрунтовано доцільність застосування методів машинного навчання для побудови моделей, орієнтованих на екстраполяційне прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми.

У другому розділі наведено опис експериментального набору даних, отриманого під час випробувань NiTi-дроту з пам'яттю форми на малоциклову втому за різних частот циклічного навантаження. Запропоновано математичну модель прогнозування деформації SMA з урахуванням номера циклу як незалежної вхідної змінної, що дало змогу відокремити прогнозування в межах діапазону навчальних даних і екстраполяційний режим прогнозування. Вхідними змінними моделі визначено напруження, номер циклу навантаження-розвантаження та індикатор фази циклу, який відображає етап навантаження або розвантаження. Вихідною змінною є прогнозоване значення деформації матеріалу. Розглянуто ансамблеві регресійні моделі VotingRegressor і StackingRegressor, рекурентні нейронні мережі SimpleRNN, LSTM, GRU та темпоральну згорткову мережу TCN. Запропоновано стратегію групового розбиття та валідації даних за номером циклу навантаження, а також описано загальну структуру програмної системи дослідження, що охоплює модулі EDA, Dataset, ML Models, Predict, Explain і Report.

У третьому розділі виконано попередню обробку експериментального набору даних, проведено статистичний аналіз вхідних ознак і цільової змінної, а також здійснено виявлення аномальних значень у даних. Наведено результати

навчання та оцінювання моделей машинного навчання в межах навчального діапазону циклів 100–250. Для ансамблевих моделей здійснено налаштування гіперпараметрів методом GridSearchCV, а для нейромережових архітектур – методом Hyperband. Проведено порівняльний аналіз точності моделей за метриками MSE, MAE, MAPE та  $R^2$ . Встановлено, що всі побудовані моделі забезпечують високу точність прогнозування в межах діапазону навчальних даних. Показано, що ансамблеві та нейромережові підходи здатні з високою точністю відтворювати залежність “напруження–деформація” та форму гістерезисних петель у межах навчального інтервалу. Проведено порівняльне оцінювання точності побудованих моделей на тестових даних.

У четвертому розділі представлено результати екстраполяційного прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам’яттю форми на віддалених циклах навантаження. Досліджено узагальнювальну здатність моделей на циклах 251, 260, 300, 350, 400, 450 та 500. Встановлено, що найкращі результати у задачі довгострокового прогнозування забезпечує модель LSTM. Для інтерпретації прогнозів застосовано методи SHAP та Integrated Gradients. Показано, що в моделях машинного навчання домінуючий вплив на прогнозоване значення деформації має параметр напруження (ознака Stress), тоді як внесок ознаки номера циклу (Cycle) зростає зі збільшенням тривалості циклічного навантаження, що узгоджується з накопиченням ефектів функціональної втоми матеріалу. Отримані результати свідчать про фізичну узгодженість побудованих моделей і підтверджують їх практичну придатність для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам’яттю форми.

**Ключові слова:** набір даних, моделювання, алгоритм, сплави з пам’яттю форми, нітинол, гістерезисна поведінка, машинне навчання, ансамблеві моделі, рекурентні нейронні мережі, темпоральна згортова мережа, прогнозування, деформації, регресія, пояснюваний штучний інтелект, метрики.

## ABSTRACT

*Dmytro Tymoshchuk*. Methods and models of machine learning for predicting the hysteresis behavior of shape memory alloys. – Qualifying scientific work as a manuscript. Dissertation for obtaining the degree of Doctor of Philosophy in specialty 122 "Computer Sciences". – Ternopil Ivan Puluj National Technical University, Ternopil, 2026.

The dissertation research was carried out at the Department of Artificial Intelligence Systems and Data Analysis of Ternopil Ivan Puluj National Technical University of the Ministry of Education and Science of Ukraine.

The dissertation addresses the scientific and practical problem of developing, evaluating, and comparatively analyzing machine learning models for predicting the hysteresis behavior of shape memory alloys under cyclic loading, as well as interpreting the resulting predictions using explainable artificial intelligence methods.

The relevance of this study is driven by the widespread use of shape memory alloys in modern engineering systems, where high predictive accuracy of their strain behavior, assessment of the effects of functional fatigue, reduction in the scope of costly and time-consuming experimental investigations, and physically grounded interpretation of modeling results are all of major importance. A particular challenge lies in predicting the evolution of hysteresis loops for loading cycles beyond the training range, since the relationship between stress and strain in such materials is nonlinear and depends on loading history, frequency, and the accumulation of fatigue effects.

The introduction substantiates the relevance of the dissertation topic, defines its connection to the broader research directions in the field, formulates the aim and objectives of the study, and outlines the object, subject, and research methods. It also presents the scientific novelty and practical significance of the results obtained, along with information on their approbation, practical application, and dissemination in scientific publications.

The first chapter provides an analysis of the subject area. It examines the physical foundations of the hysteresis behavior of shape memory alloys, the nature of the shape memory effect and superelasticity, as well as the specific features of hysteresis loop formation in the “stress–strain” domain. The influence of loading frequency, number of cycles, and phase transformations on the hysteresis behavior of shape memory alloys is analyzed. In addition, current research on the application of machine learning methods for predicting SMA properties and the use of explainable artificial intelligence methods for interpreting the results is reviewed. Based on the literature analysis, the feasibility of applying machine learning methods to develop models aimed at the extrapolative prediction of the hysteresis behavior of shape memory alloys is substantiated.

The second chapter describes the experimental dataset obtained during low-cycle fatigue testing of NiTi shape memory wire under different frequencies of cyclic loading. A mathematical model for predicting SMA strain is proposed, in which the cycle number is treated as an independent input variable, making it possible to distinguish between prediction within the training data range and the extrapolative prediction regime. The input variables of the model are defined as stress, the loading–unloading cycle number, and a cycle-phase indicator reflecting whether the material is in the loading or unloading stage. The output variable is the predicted value of material strain. The chapter considers the ensemble regression models VotingRegressor and StackingRegressor, the recurrent neural networks SimpleRNN, LSTM, and GRU, as well as the temporal convolutional network TCN. A strategy for group-based data splitting and validation by loading cycle number is proposed, and the overall structure of the research software system is described, covering the EDA, Dataset, ML Models, Predict, Explain, and Report modules.

The third chapter presents the preprocessing of the experimental dataset, the statistical analysis of the input features and target variable, and the detection of outliers in the data. It reports the results of training and evaluating the machine learning models within the training cycle range of 100–250. For the ensemble models, hyperparameter tuning was performed using GridSearchCV, whereas the neural network architectures

were optimized using the Hyperband method. A comparative analysis of model accuracy was carried out using the MSE, MAE, MAPE, and  $R^2$  metrics. It was established that all developed models provide high prediction accuracy within the training data range. The results show that both ensemble and neural network approaches are capable of reproducing the “stress–strain” relationship and the shape of hysteresis loops within the training interval with high accuracy. A comparative evaluation of the accuracy of the developed models on the test data was also performed.

The fourth chapter presents the results of extrapolative prediction of the hysteresis behavior of shape memory alloys for distant loading cycles. The generalization ability of the models was investigated for cycles 251, 260, 300, 350, 400, 450, and 500. It was established that the LSTM model provides the best performance in the long-term prediction task. The SHAP and Integrated Gradients methods were applied to interpret the predictions. The results show that, within the machine learning models, the stress parameter has the dominant influence on the predicted strain value, whereas the contribution of the cycle number feature increases with the duration of cyclic loading, which is consistent with the accumulation of functional fatigue effects in the material. The obtained results indicate the physical consistency of the developed models and confirm their practical applicability for predicting the hysteresis behavior of shape memory alloys.

**Key words:** dataset, modelling, algorithm, shape memory alloys, nitinol, hysteresis behavior, machine learning, ensemble models, recurrent neural networks, temporal convolutional network, prediction, strain, regression, explainable artificial intelligence, metrics.

## ПЕРЕЛІК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

*Праці, в яких опубліковано основні наукові результати дисертації*

*Публікації у фахових виданнях України:*

1. **Tymoshchuk, D<sup>1.</sup>, & Yasniy, O<sup>2.</sup>**. (2025). Modelling of hysteresis behaviour of nickel-titanium shape memory alloy using artificial neural network. *Measuring and Computing Devices in Technological Processes*, (2), 285–289. <https://doi.org/10.31891/2219-9365-2025-82-40>. (Особистий внесок: 1-формування концепції дослідження, розроблення його методологічних засад, створення програмного забезпечення, проведення валідації отриманих результатів, виконання дослідницької роботи, підготовка та впорядкування даних, написання початкового варіанта рукопису, участь у його доопрацюванні та редагуванні, а також підготовка візуалізацій результатів дослідження. 2 - планував і керував дослідженням.).
2. **Tymoshchuk, D<sup>1.</sup>, & Yasniy, O<sup>2.</sup>**. (2025). Information technology for predicting the hysteresis behavior of shape memory alloys based on a stacking ensemble machine learning model. *Scientific Journal of the Ternopil National Technical University*, 119(3), 134–146. [https://doi.org/10.33108/visnyk\\_tntu2025.03.134](https://doi.org/10.33108/visnyk_tntu2025.03.134). (Особистий внесок: 1 - формування концепції дослідження, розроблення його методологічних засад, створення програмного забезпечення, проведення валідації отриманих результатів, виконання дослідницької роботи, підготовка та впорядкування даних, написання початкового варіанта рукопису, участь у його доопрацюванні та редагуванні, а також підготовка візуалізацій результатів дослідження. 2 - планував і керував дослідженням.).

*Публікації у виданнях, які індексуються у міжнародній наукометричній базі Scopus:*

1. **Tymoshchuk, D.**, Yasniy, O., Didych, I., Maruschak, P., & Lutsyk, N. (2025). Recurrent neural networks with integrated gradients explanation for predicting the hysteresis behavior of shape memory alloys. *Sensors*, 26(1), 110. <https://doi.org/10.3390/s26010110>.
2. Yasniy, O., **Tymoshchuk, D.**, Didych, I., Iasnii, V., & Pasternak, I. (2025). Modelling the properties of shape memory alloys using machine learning methods. *Procedia Structural Integrity*, 68, 132–138. <https://doi.org/10.1016/j.prostr.2025.06.033>.
3. Yasniy, O., **Tymoshchuk, D.**, Didych, I., Zoloty, R., & Tymoshchuk, V. (2025). Modeling of shape memory alloys hysteresis behavior considering the loading cycle frequency. *Procedia Structural Integrity*, 72, 188–194. <https://doi.org/10.1016/j.prostr.2025.08.091>.
4. **Tymoshchuk, D.**, Yasniy, O., Didych, I., Stanko, A., & Medvid, V. (2026). Prediction of SMA hysteresis behavior by ensemble stacking machine learning model with SHAP-based explanation. *Progress in Engineering Science*, 100237. <https://doi.org/10.1016/j.pes.2026.100237>.
5. **Tymoshchuk, D.**, Yasniy, O., Didych, I., Maruschak, P., Lapusta, Y. (2026). Prediction of SMA Hysteresis Behavior: A Deep Learning Approach with Explainable AI. *Computers, Materials & Continua*, 87(3), 24. <https://doi.org/10.32604/cmc.2026.077062>.
6. **Tymoshchuk, D.**, Yasniy, O., Lapusta, Y., Didych, I., Pasternak, I., & Iasnii, V. (2026). Modeling the hysteresis behavior of SMA by an ensemble voting machine learning model. *Procedia Structural Integrity*, 81, 35–40. <https://doi.org/10.1016/j.prostr.2026.03.007>.

*Праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:*

1. Yasniy, O., **Tymoshchuk, D.**, Didych, I., Iasnii, V., & Pasternak, I. (2024, August 26–30). Modeling of hysteresis in shape memory alloys using artificial neural network. European Conference on Fracture 2024 Structural Integrity and Durability (ECF24), Zagreb, Croatia.
2. Yasniy, O., **Tymoshchuk, D.**, Didych, I., Iasnii, V., & Tymoshchuk, V. (2024, November 17–19). Modelling of shape memory alloys hysteretic behaviour considering the loading cycle frequency. 12th Annual Conference of Society of Structural Integrity and Life (DIVK12), Belgrade, Serbia.
3. **Tymoshchuk, D.**, Yasniy, O., Didych, I., Medvid, V., & Stanko, A. (2025, November 25–28). Prediction of SMA hysteresis behaviour by ensemble stacking machine learning. 1st Biennial ESIS-CSIC Conference on Structural Integrity (BECCSI 2025), Belgrade, Serbia.
4. **Tymoshchuk, D.**, Yasniy, O., Didych, I., Pasternak, I., & Nykytyuk, V. (2025, October 15–17). Modeling the hysteresis behavior of SMA by an ensemble voting machine learning model. VIII International Conference “In-service Damage of Materials: Diagnostics and Prediction” (DMDP 2025), Ternopil, Ukraine.

## ЗМІСТ

ВСТУП.....	17
РОЗДІЛ 1. СУЧАСНИЙ СТАН ДОСЛІДЖЕНЬ У ГАЛУЗІ ПРОГНОЗУВАННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ СПЛАВІВ З ПАМ'ЯТТЮ ФОРМИ .....	25
1.1. Фізичні основи формування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми.....	25
1.2. Машинне навчання в задачах прогнозування властивостей сплавів з пам'яттю форми.....	30
1.3. Пояснюваний штучний інтелект у задачах прогнозування властивостей сплавів з пам'яттю форми .....	36
1.4. Висновки до розділу 1 .....	44
РОЗДІЛ 2. МЕТОДИКА ПОБУДОВИ ТА ІНТЕРПРЕТАЦІЇ МОДЕЛЕЙ МАШИННОГО НАВЧАННЯ .....	46
2.1. Експериментальна база та формування набору даних .....	47
2.2. Попередня обробка та контроль якості експериментальних даних.....	50
2.2.1. Виявлення аномалій за правилом $\pm 3\sigma$ .....	50
2.2.2. Виявлення аномалій за критерієм IQR.....	51
2.2.3. Виявлення локальних аномалій за ковзним z-показником.....	52
2.3. Стратегія розбиття даних і валідації моделей.....	54
2.4. Математична модель прогнозування .....	55
2.5. Моделі машинного навчання .....	57
2.5.1. Ансамблева регресійна модель зваженого голосування (VotingRegressor) .....	57
2.5.2. Ансамблева регресійна модель стекінгу (StackingRegressor).....	59
2.5.3. Рекурентні нейронні мережі (SimpleRNN, LSTM, GRU).....	60
2.5.4. Темпоральна згорткова мережа (TCN) .....	61

	12
2.6. Оцінювання якості прогнозування .....	62
2.7. Інтерпретація результатів прогнозування методами ХАІ.....	64
2.8. Програмна система побудови, оцінювання та інтерпретації моделей .....	71
2.8.1. Загальна структура програмної системи .....	71
2.8.2. Використане програмне та апаратне забезпечення .....	80
2.9. Висновки до розділу 2 .....	83
<b>РОЗДІЛ 3. ПОБУДОВА ТА ОЦІНЮВАННЯ ТОЧНОСТІ МОДЕЛЕЙ</b>	
<b>МАШИННОГО НАВЧАННЯ .....</b>	<b>86</b>
3.1. Аналіз результатів попередньої обробки даних .....	86
3.2. Результати дослідження ансамблевої моделі VotingRegressor.....	96
3.2.1. Налаштування гіперпараметрів базових моделей .....	96
3.2.2. Аналіз вагових коефіцієнтів базових моделей.....	98
3.2.3. Оцінювання точності моделі VotingRegressor .....	101
3.3. Результати дослідження ансамблевої моделі StackingRegressor.....	103
3.3.1. Налаштування гіперпараметрів базових моделей та мета-моделі ...	103
3.3.2. Аналіз ваг мета-моделі ElasticNet.....	106
3.3.3. Оцінювання точності моделі StackingRegressor.....	108
3.4. Результати дослідження рекурентних нейронних мереж .....	111
3.4.1. Архітектура та налаштування гіперпараметрів моделей .....	111
3.4.2. Оцінювання точності рекурентних нейронних мереж.....	117
3.5. Результати дослідження темпоральної згорткової мережі .....	121
3.5.1. Архітектура та налаштування гіперпараметрів .....	121
3.5.2. Оцінювання точності TCN-моделі .....	125
3.6. Порівняльний аналіз точності моделей .....	129
3.7. Висновки до розділу 3 .....	132

## РОЗДІЛ 4. ПРОГНОЗУВАННЯ ТА ПОЯСНЕННЯ РОБОТИ МОДЕЛЕЙ

МАШИННОГО НАВЧАННЯ .....	135
4.1. Результати застосування моделі VotingRegressor .....	136
4.1.1. Аналіз узагальнювальної та екстраполяційної здатності моделі .....	136
4.1.2. Прогнозування гістерезисної поведінки .....	139
4.1.3. Локальна та глобальна інтерпретація результатів методом SHAP ..	142
4.2. Результати застосування моделі StackingRegressor .....	146
4.2.1. Аналіз узагальнювальної та екстраполяційної здатності моделі .....	146
4.2.2. Прогнозування гістерезисної поведінки .....	149
4.2.3. Локальна та глобальна інтерпретація результатів методом SHAP ..	151
4.3. Результати застосування рекурентних нейронних мереж .....	155
4.3.1. Аналіз узагальнювальної та екстраполяційної здатності моделей ..	155
4.3.2. Прогнозування гістерезисної поведінки .....	159
4.3.3. Локальна та глобальна інтерпретація результатів методом Integrated Gradients .....	162
4.4. Результати застосування темпоральної згорткової мережі .....	169
4.4.1. Аналіз узагальнювальної та екстраполяційної здатності моделі .....	169
4.4.2. Прогнозування гістерезисної поведінки .....	172
4.4.3. Локальна та глобальна інтерпретація результатів методом SHAP ..	174
4.5. Порівняльний аналіз екстраполяційної здатності моделей .....	180
4.6. Висновки до розділу 4 .....	190
ВИСНОВКИ.....	193
ПЕРЕЛІК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ .....	197
ДОДАТКИ.....	206

ДОДАТОК А. Список публікацій здобувача за темою дисертації та відомості про апробацію результатів дисертаційної роботи .....	206
ДОДАТОК Б. Довідки та акти впровадження результатів дисертаційного дослідження .....	209
ДОДАТОК В. Архітектура програмної системи дослідження.....	213
ДОДАТОК Г. Метрики точності Voting-моделей.....	214
ДОДАТОК Д. Метрики точності Stacking-моделей .....	217
ДОДАТОК Е. Метрики точності SimpleRNN, LSTM та GRU моделей .....	220
ДОДАТОК Ж. Метрики точності TCN-моделей .....	225

## ПЕРЕЛІК СКОРОЧЕНЬ І ТЕРМІНІВ

- SMA (англ. shape memory alloy) – сплави з пам'яттю форми
- SME (англ. shape memory effect) – ефект пам'яті форми
- SE (англ. superelasticity) – надпружність
- XAI (англ. explainable artificial intelligence) – пояснюваний штучний інтелект
- SHAP (англ. SHapley Additive exPlanations) – адитивні пояснення на основі значень Шеплі
- SimpleRNN (англ. simple recurrent neural network) – проста рекурентна нейронна мережа
- LSTM (англ. long short-term memory) – мережа довгої короткочасної пам'яті
- GRU (англ. gated recurrent unit) – керований рекурентний блок
- TCN (англ. temporal convolutional network) – темпоральна згорткова мережа
- FEM (англ. finite element method) – метод скінченних елементів
- ML (англ. machine learning) – машинне навчання
- ANN (англ. artificial neural network) – штучна нейронна мережа
- RMSE (англ. root mean square error) – корінь із середньоквадратичної похибки
- MLP (англ. multilayer perceptron) – багатошаровий перцептрон
- HEA (англ. high-entropy alloy) – високоентропійний сплав
- HESMA (англ. high-entropy shape memory alloy) – високоентропійний сплав з пам'яттю форми
- XGBoost (англ. Extreme Gradient Boosting) – екстремальний градієнтний бустинг
- HTSMA (англ. high-temperature shape memory alloy) – високотемпературний сплав з пам'яттю форми
- SVR (англ. support vector regression) – регресія опорних векторів

LIME (англ. local interpretable model-agnostic explanations) – локальні інтерпретовані модельно-незалежні пояснення

IQR (англ. interquartile range) – міжквартильний розмах

OOOF (англ. out-of-fold) – прогноз на валідаційній підвибірці

SVM (англ. support vector machine) – метод опорних векторів

kNN (англ. k-nearest neighbors) – метод k найближчих сусідів

MAE (англ. mean absolute error) – середня абсолютна похибка

MSE (англ. mean squared error) – середньоквадратична похибка

$R^2$  (англ. coefficient of determination) – коефіцієнт детермінації

MAPE (англ. mean absolute percentage error) – середня абсолютна відсоткова похибка

IG (англ. Integrated Gradients) – інтегровані градієнти

EDA (англ. Exploratory Data Analysis) – модуль аналізу даних

GPU (англ. graphics processing unit) – графічний процесор

RF (англ. random forest) – випадковий ліс

GBR (англ. gradient boosting regressor) – регресійна модель градієнтного бустингу

ET (англ. extra trees) – метод надзвичайно рандомізованих дерев

## ВСТУП

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

Серед сучасних матеріалів особливий науковий і практичний інтерес становлять інтелектуальні матеріали, здатні адаптивно реагувати на зміну зовнішніх умов. Серед них особливе місце займають сплави з пам'яттю форми. Вони характеризуються двома унікальними властивостями – ефектом пам'яті форми та надпружністю. Ці властивості зумовлені оборотними мартенситно-аустенітними фазовими перетвореннями, які відбуваються на мікроструктурному рівні під дією температури або механічного навантаження. Завдяки цьому матеріал здатний не лише відновлювати початкову форму після деформування, а й витримувати значні механічні навантаження без залишкових змін геометрії. Поєднання високої пружності, довговічності та здатності до самовідновлення зумовлює широкий спектр застосувань SMA у медицині, авіакосмічній техніці, робототехніці, автоматизації, автомобілебудуванні та інших галузях. Разом із тим, практичне застосування SMA значною мірою залежить від можливості точно прогнозувати їхню поведінку за різних умов навантаження.

Однією з особливостей сплавів з пам'яттю форми є виражена гістерезисна поведінка на діаграмі “напруження–деформація”, яка відображає складну нелінійну залежність між прикладеним навантаженням, фазовими перетвореннями, історією навантаження та накопиченням функціональної втоми. Форма гістерезисної петлі, її ширина та площа змінюються залежно від

частоти навантаження, номера циклу та термомеханічних умов. Це значно ускладнює побудову універсальних математичних моделей, здатних точно відтворювати поведінку SMA в широкому діапазоні експлуатаційних режимів.

Традиційні підходи чисельного моделювання забезпечують фізично обґрунтований опис поведінки матеріалу, проте характеризуються складністю параметризації, чутливістю до вибору параметрів і значними обчислювальними витратами, особливо у задачах циклічного навантаження та прогнозування еволюції гістерезисних петель. У зв'язку з цим зростає актуальність застосування методів машинного навчання, які дають змогу будувати моделі на основі даних, здатні виявляти складні нелінійні закономірності та забезпечувати швидке прогнозування після завершення навчання.

Особливого значення набуває задача екстраполяційного прогнозування гістерезисної поведінки SMA на циклах навантаження, що виходять за межі навчального діапазону. Саме така задача є важливою для оцінювання довговічності, залишкової деформації, розсіюваної енергії та зміни функціональних властивостей матеріалу в умовах циклічної втоми. У межах такого підходу доцільним є застосування різних класів моделей машинного навчання, зокрема ансамблевих методів, рекурентних нейронних мереж і темпоральних згорткових мереж. Ансамблеві моделі, такі як `VotingRegressor` і `StackingRegressor`, дають змогу ефективно апроксимувати нелінійні залежності між напруженням, номером циклу, фазою навантаження та деформацією. Їхньою перевагою є здатність поєднувати результати декількох базових алгоритмів, що підвищує надійність прогнозування. Рекурентні нейронні мережі `SimpleRNN`, `LSTM`, `GRU` та темпоральні згорткові мережі `TCN` дають змогу враховувати послідовний характер експериментальних даних та залежність прогнозованої деформації від попередніх значень напруження, номера циклу та фази навантаження або розвантаження. Це є особливо важливим для прогнозування гістерезисної поведінки SMA, оскільки прогнозоване значення деформації залежить не лише від поточного рівня напруження, а й від попередньої історії навантаження та фази циклу навантаження–розвантаження.

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

Отже, актуальність теми дисертаційного дослідження зумовлена необхідністю побудови, оцінювання та порівняльного аналізу моделей машинного навчання для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми, здатних забезпечити високу точність, екстраполяційне прогнозування та фізично обґрунтовану інтерпретацію отриманих результатів.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.** Дисертаційне дослідження пов'язане з виконанням науково-дослідної теми ВК 76-24 “Розв'язування задач науки методами штучного інтелекту”, № держреєстрації 0125U000584.

**Об'єктом дослідження** є процес прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми за умов циклічного навантаження методами і засобами машинного навчання.

**Предметом дослідження** є методи й моделі машинного навчання, а також підходи до їх побудови, оцінювання та інтерпретації для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми за умов циклічного навантаження, які забезпечать належну екстраполяційну точність та фізичну узгодженість отриманих результатів.

**Мета і завдання роботи.** Метою роботи є побудова та оцінювання моделей машинного навчання для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми в умовах циклічного навантаження, які дадуть змогу точно прогнозувати нелінійну залежність “напруження–деформація”.

Для досягнення поставленої мети необхідно виконати наступні завдання:

1. Проаналізувати фізичні основи гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми, що необхідно для обґрунтованого вибору вхідних параметрів моделей та фізично коректної інтерпретації результатів прогнозування.

2. Провести аналіз сучасного стану досліджень у галузі моделювання властивостей SMA методами машинного навчання та пояснюваного штучного інтелекту, що дасть змогу обґрунтувати вибір методів та виявити обмеження наявних підходів.

3. Здійснити попередню обробку, статистичний аналіз і контроль якості експериментальних даних, отриманих під час випробувань NiTi-дроту з пам'яттю форми на малоциклову втому за різних частот циклічного навантаження, що необхідно для підвищення точності побудованих моделей.

4. Здійснити формалізацію задачі прогнозування деформації SMA з урахуванням номера циклу навантаження як незалежної вхідної змінної, що дасть змогу врахувати в моделі вплив циклічного навантаження та функціональної втоми матеріалу на прогнозовану деформацію.

5. Розробити коректну стратегію розбиття даних для навчання, валідації та тестування моделей з урахуванням циклічної структури даних, що необхідно для уникнення витоків даних і забезпечення об'єктивного оцінювання узагальнювальної здатності моделей.

6. Розробити та оцінити ансамблеві моделі типу VotingRegressor і StackingRegressor та моделі глибокого навчання, зокрема SimpleRNN, LSTM, GRU та TCN для прогнозування гістерезисної поведінки SMA, що дасть змогу визначити найбільш ефективні підходи.

7. Розробити програмну систему побудови, оцінювання та інтерпретації моделей прогнозування гістерезисної поведінки SMA, що дасть можливість досягти автоматизації обчислювальних експериментів, відтворюваності результатів і практичного використання запропонованого підходу.

8. Виконати порівняльний аналіз точності моделей під час прогнозування в межах діапазону навчальних даних та в екстраполяційному

режимі, що дасть змогу оцінити здатність моделей не лише забезпечувати точне прогнозування в межах навчального діапазону циклів, а й прогнозувати гістерезисну поведінку SMA на віддалених циклах навантаження.

9. Провести глобальну та локальну інтерпретацію прогнозів побудованих моделей із використанням методів SHAP та Integrated Gradients, що необхідно для визначення впливу вхідних ознак на прогноз, перевірки фізичної узгодженості моделей і підвищення довіри до отриманих результатів.

**Методи дослідження:** теоретичного аналізу, узагальнення та систематизації наукових джерел для дослідження сучасного стану проблеми та обґрунтування напрямку роботи; методи математичної статистики для попередньої обробки експериментальних даних, виявлення аномальних значень, і аналізу статистичних характеристик; методи машинного навчання для побудови моделей прогнозування гістерезисної поведінки SMA; методи пояснюваного штучного інтелекту SHAP та Integrated Gradients для глобальної й локальної інтерпретації прогнозів моделей; методи і засоби комп'ютерних наук для створення програмного забезпечення, проведення обчислювальних експериментів і порівняльного аналізу побудованих моделей.

**Наукова новизна одержаних результатів. В результаті проведення досліджень одержано такі нові результати:**

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

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

функціональної втоми матеріалу, що дало змогу оцінити відповідність виявлених моделями залежностей фізичним закономірностям деформування матеріалу в умовах циклічного навантаження.

– Удосконалено метод оцінювання моделей прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми шляхом застосування групового розбиття даних за номером циклу навантаження-розвантаження, що унеможливило потрапляння вимірювань одного й того самого циклу до навчальної, валідаційної та тестової вибірок і забезпечує об'єктивніше оцінювання узагальнювальної та екстраполяційної здатності моделей.

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

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

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

Отримані результати можуть бути використані для:

- прогнозування деформації та форми гістерезисних петель SMA;
- оцінювання впливу циклічної втоми на функціональні властивості матеріалу;

- аналізу розсіяваної енергії та демпфувальної здатності SMA-елементів;
- підтримки прийняття рішень під час проєктування актуаторів, демпферів, сенсорних і конструкційних елементів на основі SMA;
- використання в наукових дослідженнях і навчальному процесі в галузях матеріалознавства, машинного навчання та пояснюваного штучного інтелекту.

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

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

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

### **Апробація результатів дисертації.**

Наукові та практичні результати дисертаційного дослідження доповідалися та обговорювалися на міжнародних конференціях, зокрема на:

1. European Conference on Fracture 2024 Structural Integrity and Durability (ECF24) August 26 - 30, 2024, Zagreb, Croatia
2. 12th Annual Conference of Society of Structural Integrity and Life (DIVK12) November 17-19, 2024, Belgrade, Serbia
3. 1st Biennial ESIS-CSIC Conference on Structural Integrity (BECCSI 2025) November 25-28, 2025, Belgrade, Serbia.
4. VIII International Conference “In-service Damage of Materials: Diagnostics and Prediction“ (DMDP 2025) October 15-17, 2025, Ternopil, Ukraine

**Структура та обсяг дисертації.** Дисертаційна робота викладена на 227 сторінках та складається з анотації, змісту, переліку скорочень, вступу, чотирьох основних розділів, в яких міститься 86 рисунків та 12 таблиць, списку використаних джерел з 86 найменувань, а також 7 додатків. Основна частина роботи викладена на 180 сторінках. За структурою, мовою та стилем викладення дисертація відповідає вимогам МОН України. Робота написана українською мовою з використанням сучасної наукової термінології, а стиль викладення матеріалу є послідовним та логічним.

## **РОЗДІЛ 1. СУЧАСНИЙ СТАН ДОСЛІДЖЕНЬ У ГАЛУЗІ ПРОГНОЗУВАННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ СПЛАВІВ З ПАМ'ЯТТЮ ФОРМИ**

Розвиток сучасних підходів до прогнозування властивостей сплавів з пам'яттю форми зумовлений необхідністю підвищення точності відтворення їхніх складних нелінійних характеристик, що визначаються фазовими перетвореннями, гістерезисом, залежністю від історії навантаження та впливом експлуатаційних чинників. Традиційні методи моделювання не завжди забезпечують достатню ефективність у задачах прогнозування властивостей таких матеріалів, що зумовлює зростання інтересу до методів машинного навчання та пояснюваного штучного інтелекту. У цьому розділі висвітлено фізичні основи формування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми, проаналізовано сучасний стан досліджень щодо прогнозування їхніх властивостей із застосуванням методів машинного навчання, а також розглянуто методи пояснюваного штучного інтелекту, які використовуються для інтерпретації результатів прогнозування та перевірки їхньої фізичної узгодженості.

### **1.1. Фізичні основи формування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми**

Інтелектуальні матеріали, які здатні адаптивно реагувати на зміну зовнішніх умов, становлять основу розвитку сучасних конструкцій із керованими властивостями. Серед них особливе місце займають сплави з пам'яттю форми. За останні десятиліття SMA трансформувалися з об'єкта суто фундаментальних досліджень у невід'ємний функціональний компонент сучасних високотехнологічних інженерних систем. Сплави із пам'яттю форми широко застосовуються в медицині [1,2], авіаційній [3,4] та космічній [5,6]

галузях, робототехніці [7,8], автоматизації [9,10], автомобільній промисловості [11,12] та будівництві [13,14].

Серед численних сплавів з пам'яттю форми найбільшого промислового поширення набули сплави на основі NiTi, що історично сформували еталонний клас SMA завдяки поєднанню помірних температур фазового перетворення, високої корозійної стійкості й біосумісності. SMA характеризуються здатністю переходити між двома основними кристалічними станами - аустенітом і мартенситом. Аустенітна фаза має об'ємноцентровану кубічну решітку типу B2 (Ni розташовані в вершинах комірки, Ti - у центрі), що забезпечує високу жорсткість і межу текучості (рис. 1.1а). Мартенситна фаза представлена моноклінною ґраткою B19', у якій площини зсунуті відносно вихідного кубу, що надає сплаву пластичності (рис. 1.1б).

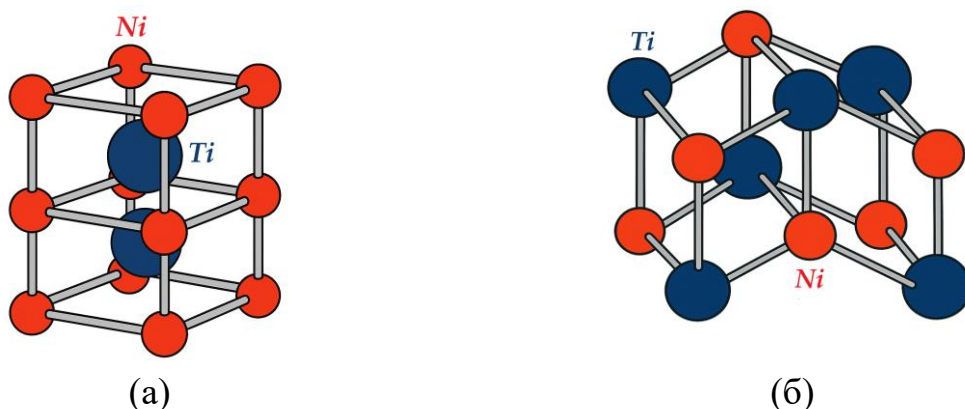


Рис. 1.1. Кристалічна структура NiTi: (а) аустенітна фаза B2 та (б) мартенситна фаза B19'

У SMA є дві унікальні властивості: ефект пам'яті форми та надпружність [15]. Ефект пам'яті форми проявляється при зміні температури, під час якої в кристалічній ґратці сплаву відбуваються послідовні фазові перетворення. При охолодженні аустеніт перетворюється в двійниковий мартенсит, а потім трансформується в бездвійниковий мартенсит. При нагріванні матеріал повертається до аустенітного стану. Цей цикл повторюється щоразу під час зниження та підвищення температури сплаву. Надпружність проявляється в ізотермічних умовах, коли температура матеріалу дорівнює або перевищує

значення температури завершення аустенітного перетворення. За таких умов сплав перебуває в стабільному аустенітному стані й під дією механічного навантаження здійснює трансформацію в бездвійниковий мартенсит. У момент зняття навантаження структура повертається в аустеніт, відновлюючи початкову форму.

Завдяки здатності до зворотних фазових переходів SMA можуть відновлювати початкову форму при зміні температури або прикладеного навантаження. Цей унікальний механізм пов'язаний із мікроструктурними перебудовами та взаємодією механічних і функціональних властивостей матеріалу.

Діаграма деформування SMA має виражений гістерезисний характер. Під час циклу навантаження-розвантаження на діаграмі “напруження–деформація” ( $\sigma$ - $\epsilon$ ) формується замкнена петля, що відображає оборотні мартенситно-аустенітні перетворення в матеріалі (рис. 1.2).

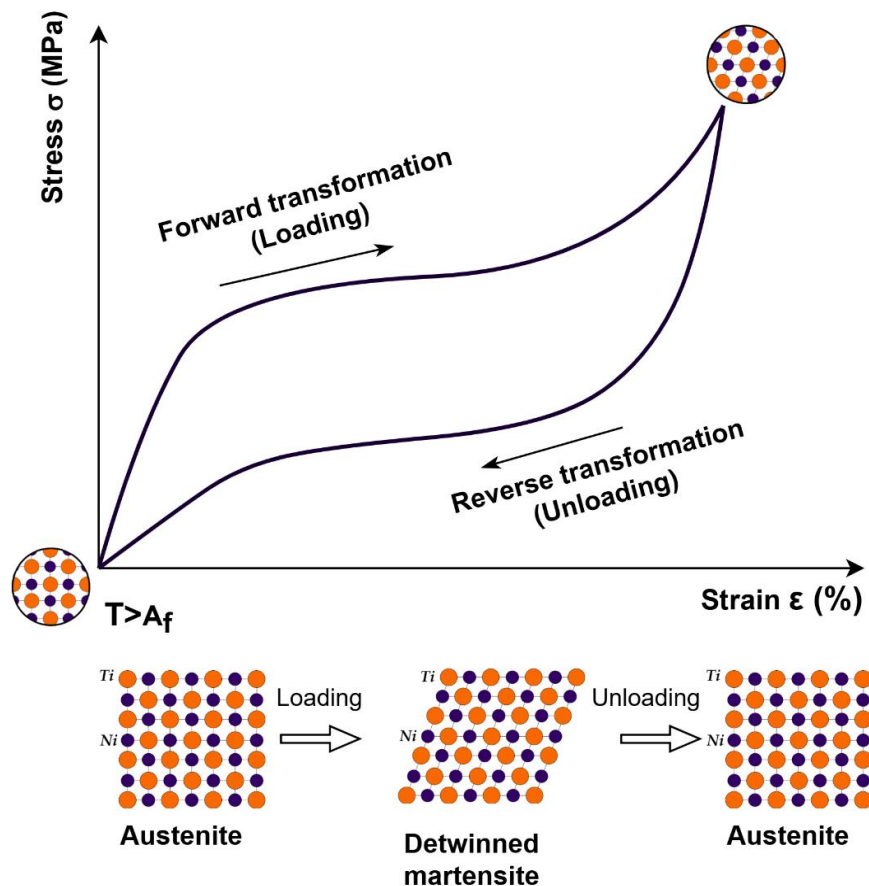


Рис. 1.2. Гістерезисна петля одного циклу навантаження та розвантаження SMA

Площа цієї петлі кількісно відповідає енергії, розсіяній за цикл  $E_{diss}$  та обчислюється за формулою:

$$E_{diss} = \int_{\varepsilon_{min}}^{\varepsilon_{max}} (\sigma_1(\varepsilon) - \sigma_2(\varepsilon)) d\varepsilon, \quad (1.1)$$

де  $\sigma$  - напруження (МПа),  $\varepsilon$  - деформація (безрозмірна),  $\sigma_1(\varepsilon)$  та  $\sigma_2(\varepsilon)$  - етапи навантаження та розвантаження у цьому ж циклі.

Геометрія петлі та величина розсіяної енергії визначаються термодинамічними параметрами, такими як температура початку мартенситного перетворення (martensite start) ( $M_s$ ), температура завершення мартенситного перетворення (martensite finish) ( $M_f$ ), температура початку аустенітного перетворення (austenite start) ( $A_s$ ), температура завершення аустенітного перетворення (austenite finish) ( $A_f$ ), частотою  $f$  (Гц), а також історією навантаження (кількістю циклів навантаження-розвантаження  $N$ ). Характер гістерезисної петлі змінюється із зростанням кількості циклів навантаження-розвантаження  $N$ .

Наявність розсіювання енергії показує здатності сплаву під час аустенітно-мартенситного перетворення трансформувати частину механічної енергії в теплову. Це характеризує здатність матеріалу до демпфування та надпружної поведінки. Завдяки цим властивостям сплави із пам'яттю форми ефективно застосовувати для гасіння вібрацій та експлуатації за динамічних навантажень, а також як функціональні матеріали для створення актуаторів.

Частота прикладання зовнішнього навантаження є одним із чинників, що визначають функціональні властивості SMA [16-18]. Вона має особливе значення у випадках експлуатації матеріалу в умовах повторюваних циклічних навантажень, коли відбувається періодична активація мартенситно-аустенітних перетворень. Частота навантаження безпосередньо впливає на теплові процеси

всередині матеріалу. За високих частот можливе самонагрівання зразка, що призводить до локального підвищення температури, зміщення температурних меж фазових переходів і, як наслідок, часткової втрати функціональності. Крім того, частота є визначальним фактором, який формує гістерезисну поведінку SMA. Зі зростанням частоти змінюється геометрія петлі на діаграмі напруження-деформація, що безпосередньо впливає на її площу, а отже, і на величину енергії, розсіяної за цикл. Високі частоти призводять до звуження петлі та зменшення енергоємності через неповне завершення фазових перетворень, тоді як низькі частоти сприяють більш повному розвитку мартенситних і аустенітних фаз. Точне відтворення нелінійної гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми за різних частот навантаження є необхідною передумовою для проєктування довговічних і надійних елементів у авіаційних, біомедичних та робототехнічних системах. Традиційні методи числового аналізу поведінки сплавів з пам'яттю форми залишаються складними й обчислювально затратними. Побудова універсальної моделі, здатної адекватно відтворювати нелінійну гістерезисну поведінку SMA у широкому діапазоні умов, залишається складним завданням. Методи числового моделювання, зокрема метод скінченних елементів, характеризуються високою обчислювальною складністю під час моделювання нелінійної та гістерезисної поведінки матеріалів. Для коректного відтворення різких градієнтів напружень, локалізованих зон фазових перетворень і залежностей від історії навантаження необхідне застосування дрібної просторової дискретизації та малих кроків навантаження. Це призводить до значного зростання обчислювальних витрат [19]. Хоча FEM забезпечує фізично обґрунтований опис поведінки матеріалу, його висока обчислювальна складність і чутливість до параметрів моделі [20] обмежують ефективність прогнозування еволюції гістерезисних петель за великої кількості циклів. На відміну від методів машинного навчання, метод скінченних елементів не навчається на експериментальних даних, а ґрунтується на наперед заданому математичному описі поведінки матеріалу. Тому його можливості прогнозування визначаються тим, наскільки адекватно конститутивна модель відображає реальні фізичні

процеси, а також точністю вибору її параметрів і граничних умов. У зв'язку з цим застосування методів машинного навчання є доцільним і перспективним для прогнозування властивостей та поведінки SMA.

## **1.2. Машинне навчання в задачах прогнозування властивостей сплавів з пам'яттю форми**

Методи машинного навчання відкривають нові можливості для моделювання та прогнозування складної нелінійної поведінки SMA, яка зумовлена фазовими перетвореннями, гістерезисом та залежністю механічної відповіді від історії навантаження. На відміну від конститутивних моделей і числових методів, зокрема FEM, ML-алгоритми дають змогу виявляти приховані нелінійні закономірності у великих експериментальних наборах даних без необхідності явного формулювання системи рівнянь або складних конститутивних співвідношень.

Застосування методів машинного навчання дає змогу будувати моделі, на основі даних, що здатні ефективно апроксимувати складні залежності між напруженням, деформацією, частотою навантаження, кількістю циклів, температурними умовами та іншими експлуатаційними параметрами. Такі підходи дають змогу враховувати ефекти накопичення функціональної втоми, зміну форми гістерезисних петель та еволюцію механічних властивостей матеріалу під час циклічного навантаження. Завдяки цьому ML-моделі можуть не лише відтворювати експериментальні дані з високою точністю, а й забезпечувати прогнозування поведінки SMA для подальших циклів навантаження, що характеризуються еволюцією форми гістерезисної петлі.

Окрім високої точності, важливою перевагою методів машинного навчання є їхня обчислювальна ефективність. Після етапу навчання ML-моделі забезпечують швидке отримання прогнозів без необхідності виконання багатоетапних чисельних розрахунків, характерних для методу скінченних елементів. Тому, ML-підходи особливо підходять для розв'язування задач

прогнозування довготривалої гістерезисної поведінки SMA за великої кількості циклів навантаження.

З огляду на зазначені переваги, упродовж останніх років спостерігається активне зростання кількості наукових робіт, котрі стосуються застосування методів машинного навчання для моделювання та прогнозування властивостей сплавів з пам'яттю форми (рис. 1.3).

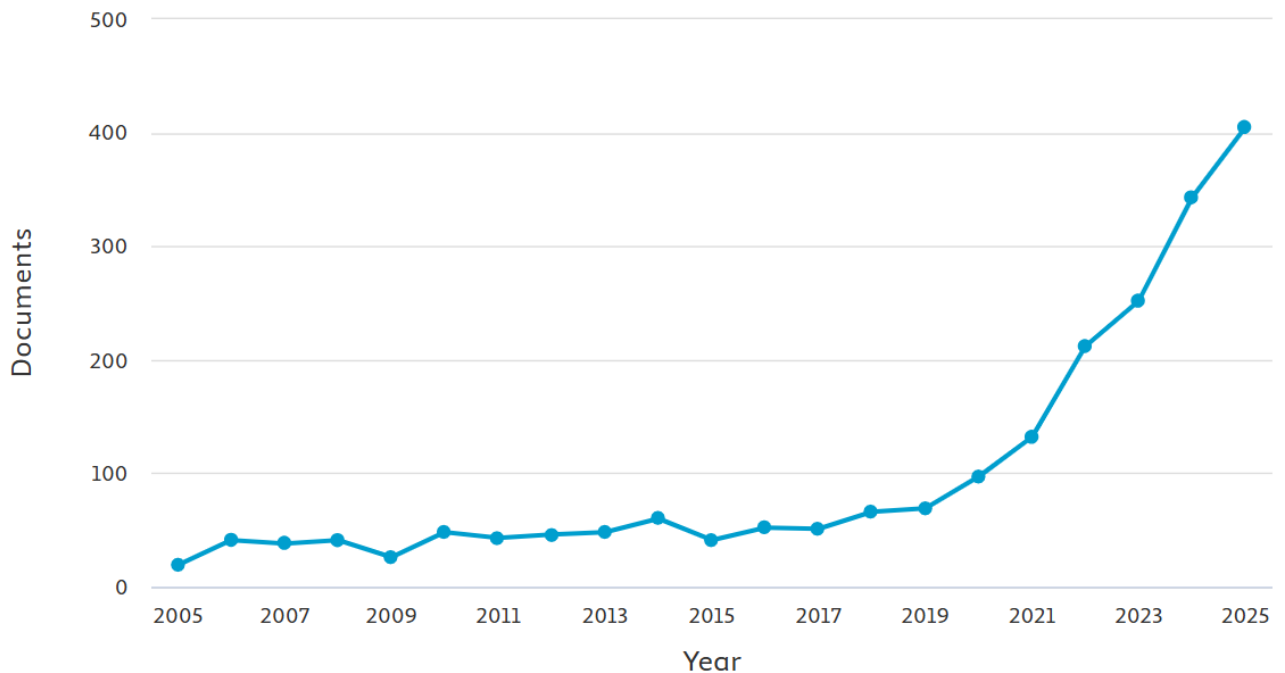


Рис. 1.3. Динаміка публікацій у наукометричній базі Scopus за період 2005-2025 років у галузі машинного навчання для дослідження SMA

Подальший огляд зосереджено на аналізі існуючих підходів до моделювання та прогнозування властивостей SMA.

У роботі [21] досліджено гістерезисну поведінку демпферів, оснащених сплавами з пам'яттю форми, як додаткових елементів для сейсмічної ізоляції з ефектом самовідновлення та відсутністю залишкових переміщень. Робота стосується точного відтворення та узагальнення гістерезисної поведінки у межах дослідженого простору параметрів, а не на екстраполяційному прогнозуванні. На основі 630 чисельних моделей, побудованих у SeismoStruct для різних довжин, кількостей і перерізів SMA-стрижнів, проаналізовано гістерезисні криві.

Показано, що наявні аналітичні залежності не забезпечують коректного опису гістерезису, тому запропоновано моделі машинного навчання ANN. Досягнуто значення коефіцієнта детермінації  $R^2$  на рівні 0,99–0,995. Отримані показники свідчать про високу здатність ANN моделей надійно відтворювати лінійні та нелінійні особливості гістерезисної поведінки SMA.

У роботі [22] розглянуто прогнозування гістерезисної поведінки актуатора з дроту, виготовленого із SMA на основі рекурентних нейронних мереж. Автори наголошують, що класичні нейронні мережі не здатні коректно описувати гістерезис з урахуванням історії навантаження. Для подолання цих обмежень застосовано LSTM-мережу, яка враховує поточні та два попередні значення напруги й кута повороту шківів. Модель забезпечує високу точність прогнозування гістерезису як в онлайн-режимі з RMSE близько  $0,1^\circ$ , так і в офлайн-режимі з RMSE близько  $0,3^\circ$ , перевершуючи модель Прендтля–Ішлінського приблизно на 70%. У розглянутій роботі прогнозування з використанням LSTM слід інтерпретувати як короткострокову часову екстраполяцію стану системи, коли на основі поточних і попередніх значень напруги та кута повороту відтворюється наступний часовий крок гістерезисної поведінки. Такий підхід дає можливість з високою точністю прогнозувати локальну динаміку та форму гістерезисної петлі у межах одного режиму навантаження. Водночас він не передбачає екстраполяції циклічної поведінки або прогнозування довготривалої еволюції гістерезису, пов'язаної з накопиченням втоми на віддалених циклах навантаження–розвантаження.

У роботі [23] запропоновано багатофункціональний захват MssGripper на основі дроту зі сплаву з пам'яттю форми, у якому одна SMA-нитка одночасно виконує роль приводу та сенсора. Показано, що електричний опір SMA надійно відображає фазові перетворення та може бути використаний для оцінювання переміщення, сили та жорсткості об'єктів, що захоплюються. Для побудови самосенсорних моделей застосовано MLP і LSTM, причому метод LSTM показав вищу точність. Середні значення RMSE становлять близько 0,063 мм для переміщення та 0,236 Н для сили, а похибка прогнозування жорсткості не

перевищує 9,4%, точність класифікації сягає 97,2%. Моделі працюють у межах експериментальних даних і забезпечують прогнозування в межах діапазону навчальних даних у реальному часі.

У роботі [24] застосовано методи машинного навчання для прогнозування температури фазових переходів NiTi-сплавів, виготовлених методом лазерного порошкового наплавлення. Автори зосереджуються на встановленні зв'язку між параметрами процесу наплавлення, хімічним складом і характеристиками мартенситного перетворення, які визначають функціональні властивості сплавів з пам'яттю форми. Побудовані ML-моделі дають можливість з високою точністю передбачати температури фазових перетворень і, відповідно, керувати проявами ефекту пам'яті форми та надпружності. Найвищу точність показала модель нейронної мережі з коефіцієнтом детермінації  $R^2 = 0,97$  і малою похибкою прогнозу. Такий підхід значно зменшує кількість експериментів. Моделі застосовують для прогнозування у межах діапазону навчальних даних температур фазових переходів у просторі параметрів процесу та складу.

У роботі [25] методами машинного навчання спрогнозовано термічний гістерезис та температури фазових перетворень сплавів з пам'яттю форми. Автори поєднали фізично обґрунтовану інженерію ознак із ML-моделями, інтегрувавши хімічні дескриптори з новими параметрами термообробки, отриманими шляхом нелінійних перетворень, що відображають термодинаміку й кінетику фазових перетворень. Такий підхід суттєво підвищив точність моделей, які раніше показували незадовільні результати. Показано, що методи ML здатні відтворювати складні залежності між характеристиками процесу термічної обробки та величиною гістерезису в SMA зі складною мікроструктурою. У роботі присутня обмежена екстраполяція в просторі складу сплаву і характеристиками процесу термічної обробки, що підтверджується прогнозами нових сплавів.

У роботі [26] застосовано орієнтований на дані підхід машинного навчання для проектування трикомпонентних сплавів NiTiHf з пам'яттю форми з температурою завершення аустенітного перетворення  $A_f$  понад 400 °C та

відносно вузьким термічним гістерезисом. Автори сформували базу експериментальних даних для системи NiTiHf і застосували нейронну мережу типу MLP для встановлення зв'язку між хімічним складом і трансформаційними характеристиками. Навчена модель дала змогу спрогнозувати нові композиції, зокрема  $Ni_{49.7}Ti_{26.6}Hf_{23.7}$  і  $Ni_{50}Ti_{27}Hf_{23}$ , які були виготовлені та експериментально перевірені. У роботі присутня екстраполяція у просторі хімічного складу, оскільки модель застосовують для передбачення нових композицій, які раніше не досліджувалися експериментально.

У роботі [27] запропоновано фізично-інформований підхід машинного навчання для прогнозування температури мартенситного перетворення  $M_s$  з метою проектування NiTi високентропійних сплавів з пам'яттю форми. Автори розширили наявну базу даних, охопивши бінарні, тернарні та багатокомпонентні сплави з типовими легувальними елементами для HEA-дизайну. Для регресійного прогнозу  $M_s$  застосовано алгоритм Extremely Randomized Trees і порівняно дві стратегії задання вхідних даних, з яких найвищу точність забезпечили фізично обґрунтовані дескриптори матеріалу. Досягнуто середньої абсолютної похибки менше ніж  $30\text{ }^\circ\text{C}$  для сплавів до чотирьох компонентів, що підтверджено експериментально на шести нових зразках. Запропонований інструмент дає можливість віртуально проектувати нові HESMA з цільовою  $M_s$  понад  $400\text{ }^\circ\text{C}$ . У роботі наявна екстраполяція в просторі складу сплаву, спрямована на дизайн нових композицій.

У роботі [28] запропоновано орієнтований на дані підхід машинного навчання для ідентифікації термодинамічних параметрів надпружних дротів зі сплавів з пам'яттю форми, які широко застосовуються для гасіння вібрацій у будівельних конструкціях завдяки значному розсіюванню енергії, зумовленому гістерезисом. Автори підкреслюють, що поведінка SMA є сильно чутливою до швидкості деформації, а класична параметрична ідентифікація потребує складних експериментів і значного досвіду. Для подолання цих обмежень розроблено нейронну мережу типу MLP, навчену на синтетичних даних, згенерованих макроскопічною конститутивною моделлю SMA з урахуванням

швидкісних ефектів. Побудована модель здатна визначати шукані параметри матеріалу безпосередньо з циклічних діаграм напруження-деформації, що підтверджено експериментально. У роботі не виконується прогнозування наступних часових кроків або циклічної еволюції гістерезису. Модель застосовується для прогнозування в межах діапазону навчальних даних та ідентифікації параметрів у межах заданих режимів навантаження без екстраполяції довготривалої поведінки.

У роботі [29] досліджено функціональну втому сплаву з пам'яттю форми на базі NiTi під дією термічних циклів при сталому механічному напруженні. На основі експериментальних даних автори побудували штучну нейронну мережу, яка розв'язує задачу регресії та одночасно прогнозує чотири неперервні параметри: відновлену деформацію, залишкову деформацію, максимальну температуру циклу та накопичення залишкової деформації. Вхідними змінними є електричний струм і номер циклу. Для навчання використано 154 репрезентативні експериментальні точки. Екстраполяція у строгому сенсі в роботі відсутня. Номер циклу входить до моделі як числова ознака, а прогнозування здійснюється в межах параметричного простору, представленого у навчальних даних. Модель виконує прогнозування в межах діапазону навчальних даних та відтворення деградаційних трендів, а не прогноз майбутніх циклів поза навчальним діапазоном.

Побудова моделей, здатних адекватно відтворювати поведінку SMA за умов багаторазового циклічного навантаження-розвантаження, вимагає використання експериментальних даних, що охоплюють широкий діапазон кількості циклів і відображають поступову еволюцію структурного стану матеріалу з кожним наступним циклом. Це є особливо критичним для коректного опису форми та параметрів гістерезисних петель за циклічного навантаження і різних частот. Аналіз наукових публікацій, котрі стосуються застосування методів машинного навчання для прогнозування властивостей SMA, свідчить про недостатню кількість досліджень, орієнтованих на прогнозування довготривалої еволюції гістерезисної поведінки, зумовленої накопиченням

функціональної втоми на віддалених циклах навантаження-розвантаження. Більшість наявних підходів зосереджується на прогнозуванні в межах діапазону навчальних даних в межах обмеженого діапазону циклів або параметрів і не враховує зміну деформації матеріалу внаслідок накопичення функціональної втоми. Водночас прогнозування деформації за таких умов має важливе практичне значення, оскільки дає змогу кількісно оцінювати енергію, що розсіюється під час фазових перетворень між мартенситною та аустенітною фазами, яка безпосередньо пов'язана із демпфувальними властивостями, довговічністю та експлуатаційною надійністю SMA-елементів у практичних інженерних системах та конструкціях.

### **1.3. Пояснюваний штучний інтелект у задачах прогнозування властивостей сплавів з пам'яттю форми**

Впровадження методів машинного навчання в задачах матеріалознавства супроводжується застосуванням складних нелінійних моделей машинного навчання, що призводить до втрати прозорості процесу ухвалення рішень. У цьому контексті пояснюваний штучний інтелект набуває особливого значення, оскільки забезпечує інтерпретованість прогнозів і дає можливість пов'язати результати прогнозування з фізичною природою досліджуваних явищ. Для сплавів з пам'яттю форми така інтерпретація є важливою, оскільки прогнозування нелінійної гістерезисної поведінки та ефектів накопичення втоми має узгоджуватися з відомими фізичними механізмами фазових перетворень і пов'язаної з ними деформації.

Методи ХАІ дають змогу кількісно оцінювати внесок окремих вхідних параметрів у формуванні прогнозу моделі як на глобальному, так і на локальному рівнях. Глобальні пояснення дають можливість визначити найбільш впливові фізичні фактори в середньому по всьому набору даних або циклу навантаження, тоді як локальні пояснення підтверджують конкретність прогнозу для окремого вимірювання. У задачах прогнозування гістерезису це дає можливість

аналізувати роль напруження, кількості циклів, стадії навантаження-розвантаження та інших параметрів у відтворенні форми петель гістерезису, а також відстежувати зміну їхнього впливу при переході до пізніших циклів.

Інтеграція методів ХАІ в моделі машинного навчання підвищує довіру до отриманих результатів і розширює їхню прикладну цінність. Пояснювані моделі не лише забезпечують високу точність прогнозування, а й дають змогу оцінити відповідність виявлених залежностей фізичним уявленням про деформування, гістерезисну поведінку та накопичення функціональної втоми, встановити вплив особливостей експериментальних даних на результати прогнозування та визначити межі узагальнення моделей.

Актуальність застосування пояснюваного штучного інтелекту в матеріалознавстві підтверджується зростаючою науковою увагою до цієї тематики (рис. 1.4).

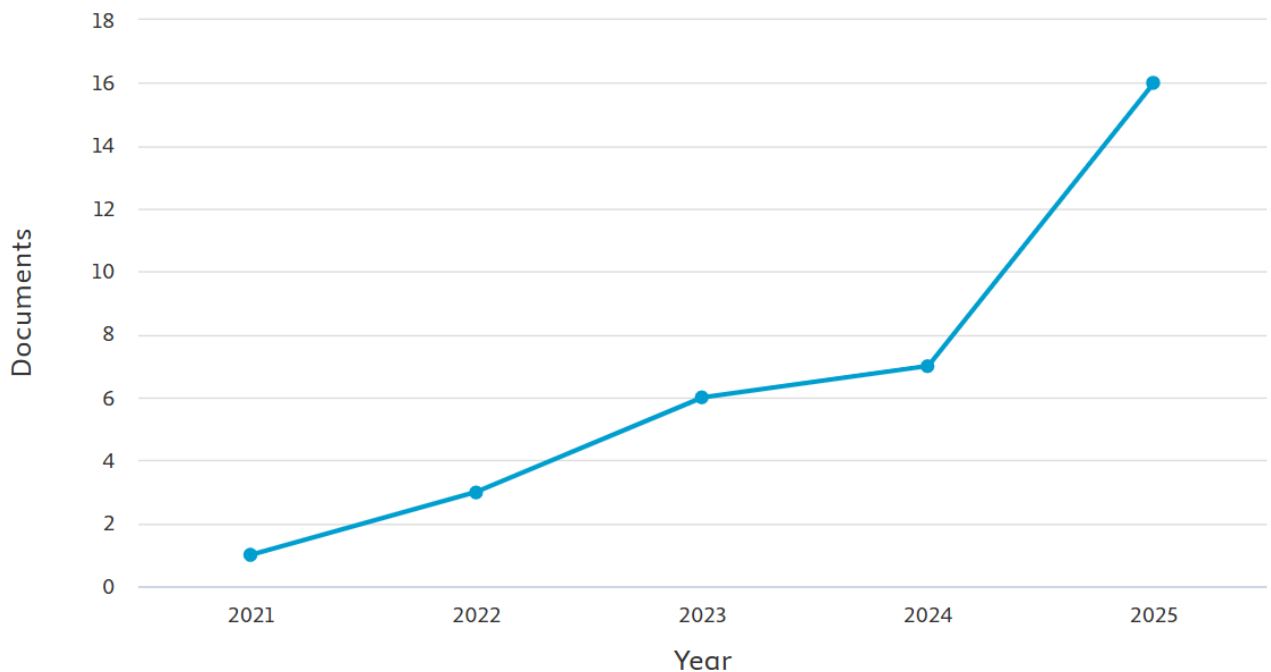


Рис. 1.4. Динаміка публікацій у наукометричній базі Scopus за період 2005–2025 років у галузі машинного навчання та пояснюваного штучного інтелекту для дослідження SMA

Аналіз динаміки публікацій у наукометричній базі Scopus за період 2021–2025 років свідчить про стійке зростання кількості робіт, присвячених використанню методів машинного навчання та ХАІ для аналізу властивостей матеріалів. Особливо помітне зростання спостерігається після 2024 року. Порівняно невелика кількість публікацій, за наявності стійкої позитивної динаміки їх зростання, свідчить про актуальність напряму та доцільність подальших досліджень у цій галузі. Методи ХАІ виступають інструментом поєднання експериментальних даних, моделей машинного навчання та фізичних уявлень про досліджувані процеси, сприяючи формуванню надійних, інтерпретованих і фізично узгоджених моделей у сучасному матеріалознавстві. У зв'язку з цим у даному підрозділі наведено аналіз сучасних наукових публікацій, присвячених застосуванню методів ХАІ для інтерпретації моделей машинного навчання, що використовуються для прогнозування властивостей сплавів з пам'яттю форми.

У роботі [30] досліджено термічний гістерезис високотемпературних сплавів NiTiHf, який виникає внаслідок зворотного мартенситного перетворення під час багаторазових термічних циклів. Автори сформуvalи узагальнений набір даних з літературних джерел і на його основі розробили п'ять моделей машинного навчання для прогнозування ширини термічного гістерезису. Для моделювання відібрано 24 фізично обґрунтовані ознаки, що відображають хімічний склад і кристалографічні характеристики сплавів. Найкращі результати продемонструвала модель на основі дерев рішень із градієнтним бустингом, яка забезпечила найвище значення  $R^2$  та мінімальну стандартну похибку. SHAP-аналіз показав, що ентропія змішування, параметри кристалічної ґратки та електронегативність є ключовими фізичними чинниками, які визначають величину термічного гістерезису фазового перетворення у сплавах NiTiHf. Моделі прогнозують гістерезис у межах діапазону навчальних даних в просторі хімічних складів, а не екстраполяцію часової чи циклічної еволюції.

У роботі [31] досліджено можливість прогнозування вузького термічного гістерезису у високотемпературних сплавах з пам'яттю форми на основі NiTi, що

є критично важливим для створення актуаторів нового покоління, призначених для роботи в екстремальних умовах. Автори сформували невеликий набір експериментальних даних і розробили понад дванадцять моделей машинного навчання, включно з нейронними мережами та ансамблевими методами. Найкращі результати показала модель XGBoost, яка досягла коефіцієнта детермінації  $R^2 = 0,893$  та  $RMSE = 5,4$  °C при прогнозуванні ширини термічного гістерезису. Для інтерпретації результатів застосовано методи ALE та SHAP, що дало змогу встановити зв'язок між хімічним складом і величиною гістерезису. Модель прогнозує у межах діапазону навчальних даних у просторі складу матеріалу.

У роботі [32] досліджено застосування методів машинного навчання для проектування NiTi сплавів з широким термічним гістерезисом, що є перспективними для інженерних застосувань. Автори використовують чотири ML-моделі для встановлення зв'язку між хімічним складом і шириною термічного гістерезису. Найкращу точність і здатність до узагальнення показала модель Random Forest Regression з показниками  $R^2 = 0,916$  і  $RMSE = 5,47$  К. SHAP-аналіз показав, що співвідношення Ni/Ti має домінуючий позитивний вплив на гістерезис, а легування Nb, Hf, Zr і Ta сприяє його розширенню. На основі моделі спрогнозовано новий клас сплавів NiTiZrTa, зокрема склад  $Ni_{38}Ti_{50}Zr_{10}Ta_2$  з гістерезисом 73,13 К, що підтверджено експериментально. У роботі присутня обмежена екстраполяція в просторі хімічного складу, оскільки модель застосовують для прогнозування нових композицій.

У роботі [33] представлено інтерпретований підхід машинного навчання для прогнозування найбільшої температури мартенситного перетворення  $T_r$  у високентропійних сплавах з пам'яттю форми типу TiZrHfNiCoCu. Автори побудували повний алгоритм, що охоплює формування набору даних, відбір інформативних ознак, побудову та валідацію моделей і їх фізично обґрунтовану інтерпретацію. Ключові комбінації ознак, пов'язані з  $T_r$ , визначено за допомогою кореляційного аналізу, відбору та покрокового виключення ознак. Побудована ML-модель показала високу точність, передбачивши  $T_r$  для трьох

нових синтезованих сплавів із похибкою менше ніж 3%. SHAP-аналіз виявив домінуючий вплив електронегативності та показав оптимальні діапазони вмісту Co і Cu. Модель дозволяє прогнозувати властивості в межах діапазону навчальних даних у просторі складу матеріалу із обмеженою екстраполяцією на нові композиції.

У статті [34] досліджено застосування ансамблевих методів машинного навчання (ensemble voting) для прогнозування зумовлених температурою властивостей високотемпературних сплавів з пам'яттю форми на основі Ti, легованих Hf, Zr, Pt і Pd. Автори зосереджуються на прогнозуванні середніх температур мартенситного та аустенітного перетворень, а також термічного гістерезису, що є ключовими параметрами для проєктування HTSMA. Розроблено три ансамблеві моделі з різними типами вхідних ознак, зокрема з використанням безпосереднього хімічного складу та фізично обґрунтованих параметрів матеріалу. Показано, що композиційна модель краще відтворює вплив легування, тоді як дескрипторні підходи сприяють глибшому розумінню механізмів фазових перетворень. Аналіз важливості ознак підтвердив визначальний вплив термодинамічних, структурних і параметрів, пов'язаних з електронною будовою елементів сплаву, на формування гістерезису. У роботі відсутнє прогнозування наступних часових кроків або міжциклової еволюції гістерезису. Моделі прогнозують у межах діапазону навчальних даних у просторі складу матеріалу із обмеженою екстраполяцією на нові композиції.

У статті [35] досліджено можливості машинного навчання для прогнозування температур фазових перетворень у високотемпературних сплавах з пам'яттю форми на основі Ti. Зокрема, спрогнозовано температуру завершення аустенітного перетворення  $A_f$ , температуру початку мартенситного перетворення  $M_s$  та похідний від них термічний гістерезис. Автори порівняли три алгоритми машинного навчання: нейронну мережу типу MLP, метод опорних векторів для регресії та метод випадкового лісу, з метою встановлення зв'язку між хімічним складом і зумовленою температурою гістерезисну поведінку HTSMA. Показано, що модель MLP найкраще відтворює температуру  $A_f$ , тоді як SVR забезпечує

найвищу точність прогнозування  $M_s$ , а модель випадкового лісу найбільш точно відтворює петлі термічного гістерезису, обчислені з прогнозованих температур. Аналіз важливості ознак виявив визначальну роль Pt і Ni у формуванні характеристик фазового перетворення. У роботі відсутнє прогнозування наступних часових кроків або міжциклової еволюції, оскільки моделі застосовуються для прогнозування в межах діапазону навчальних даних у просторі складу сплаву з обмеженою екстраполяцією на нові композиції.

У статті [36] запропоновано інтерпретований, орієнтований на оптимізацію підхід машинного навчання для класифікації сплавів з пам'яттю форми та несправжніх SMA. Автори поєднали адаптивний гібридний оптимізатор з байєсівським підбором гіперпараметрів і сучасними класифікаторами, що дало можливість підвищити узгодженість і стабільність прогнозів за складних взаємозв'язків між складом, обробкою та властивостями матеріалу. Для зменшення дисбалансу класів застосовано ресемплінг, а також сформовано додаткові композиційні й технологічні ознаки. Найкращі результати показала модель XGBoost з високими значеннями F1 та точності. SHAP-аналіз виявив ключову роль вмісту Ni, параметра різниці атомних мас легувальних елементів та тривалості фінального старіння у формуванні функціональної здатності сплаву проявляти властивості SMA та у класифікації складів як SMA. У роботі застосовано прогнозування в межах діапазону навчальних даних та класифікацію у просторі складу і параметрів з можливістю обмеженої екстраполяції на нові композиції сплавів.

У роботі [37] представлено орієнтований на дані підхід машинного навчання для прогнозування температур фазових перетворень у широкому класі сплавів з пам'яттю форми. Автори показали, що поєднання коректної інженерії ознак із вибором алгоритму, адекватного наявному датасету, дає змогу побудувати модель для прогнозування температур початку та завершення мартенситного й аустенітного перетворень. Запропоновано сурогатну модель на основі градієнтного бустингу, яка досягає середньої точності понад 95% і враховує можливі зміни розподілів даних при переході між різними системами

сплавів. До вхідних параметрів включено характеристики термообробки, прокатки, екструзії та категоріальні ознаки системи сплаву. Для інтерпретації результатів застосовано SHAP-аналіз, що дав змогу ідентифікувати фізично значущі параметри, які визначають температури мартенситного перетворення. У роботі не виконується прогнозування наступних часових кроків або циклічної еволюції. Модель використовується для прогнозування температур у межах діапазону навчальних даних у просторі складу сплаву і технологічних параметрів з обмеженою екстраполяцією на нові системи сплавів.

У роботі [38] застосовано ML для проєктування нових високоентропійних сплавів з пам'яттю форми з орієнтацією на прогноз температури початку мартенситного перетворення  $M_s$ . Для підвищення репрезентативності даних скористалися двоетапним методом балансування SMOTE (синтетичне надсемплювання міноритарного класу), після чого було навчено та порівняно декілька моделей машинного навчання. Найкращу узгодженість із експериментальними даними показала модифікована нейронна мережа, яка досягла значення  $R^2 \approx 0,89$  на тестовій вибірці та з високою точністю відтворила температури перетворення для нових композицій HESMA. Інтерпретація результатів за допомогою SHAP і LIME показали, що концентрація валентних електронів VEC має позитивний вплив на прогноз  $M_s$ . Експериментальні DSC (диференціальна сканувальна калориметрія) і механічні випробування підтвердили типовий характер фазових перетворень і детвінінгу. У роботі наявна екстраполяція в просторі складу матеріалу, оскільки моделі застосовують для відбору нових композицій, що не входили до початкового набору даних.

У роботі [39] застосовано машинне навчання для прогнозування температури початку мартенситного перетворення  $M_s$  у сплавах з пам'яттю форми на основі NiTi, що є критичним параметром для їх функціональних властивостей. Для побудови моделі скористалися градієнтним бустингом над деревами рішень, який забезпечив найвищу точність прогнозування з коефіцієнтом детермінації  $R^2 \approx 0,92$  та середньою абсолютною похибкою близько 23 °C. Ключові вхідні параметри відібрано за допомогою кореляційного

аналізу та рекурсивного виключення ознак, а інтерпретацію результатів виконано методом SHAP, що дала можливість кількісно оцінити внесок кожної фізико-хімічної характеристики. На основі побудованої моделі запропоновано дизайн високоентропійного сплаву з пам'яттю форми, для якого досягнуто підвищення  $M_s$  понад 400 °C. У роботі присутня екстраполяція у просторі складу матеріалу, оскільки модель застосовують для відбору нових композицій, що не входили до початкового набору даних.

У роботі [40] запропоновано підхід до проектування високоентропійних сплавів з пам'яттю форми, ключовими характеристиками яких є найбільша температура мартенситного перетворення  $M_p$  та термічний гістерезис  $T_{hy}$ . Автори сформувавши робочий процес, що поєднує відбір фізично змістовних ознак за допомогою кореляційного аналізу з SHAP, після чого побудували регресійні моделі на основі eXtreme Gradient Boosting Regression, оптимізовані байєсівським алгоритмом. Запропоновані моделі показали високу узгодженість між експериментальними та прогнозованими значеннями як для  $M_p$ , так і для  $T_{hy}$ , що дало змогу ефективно відбирати перспективні композиції з різними цільовими характеристиками. Інтерпретація результатів за допомогою SHAP забезпечила прозоре розуміння впливу окремих фізико-хімічних параметрів на обидві властивості. У роботі не здійснювали прогнозування наступних часових кроків або еволюції поведінки. Натомість реалізовано екстраполяцію в просторі складу матеріалу, спрямовану на пошук нових композицій у великому багатовимірному просторі для цільового дизайну HESMA.

Проведений аналіз наукових публікацій свідчить, що методи пояснюваного штучного інтелекту набули широкого застосування в задачах проектування та прогнозування властивостей сплавів з пам'яттю форми, насамперед у просторі хімічного складу та технологічних параметрів. У більшості розглянутих робіт ХАІ застосовують для інтерпретації моделей, які здійснюють прогнозування в межах діапазону навчальних даних, що дає можливість ідентифікувати фізично значущі ознаки, перевірити узгодженість прогнозів із відомими механізмами фазових перетворень та підвищити довіру до

результатів машинного навчання. Водночас аналіз показує, що наявні підходи переважно зосереджені на статичному прогнозуванні властивостей і не охоплюють задачі часової або міжциклової еволюції гістерезисної поведінки. Це підкреслює доцільність і актуальність застосування методів ХАІ у поєднанні з моделями, здатними до узагальнення за межами навчального інтервалу циклів, оскільки такий підхід дає змогу оцінити відповідність виявлених моделями залежностей фізичним уявленням про деформування, гістерезисну поведінку та накопичення функціональної втоми SMA.

#### **1.4. Висновки до розділу 1**

В першому розділі здійснено аналіз предметної області. Проаналізовано сучасні підходи до моделювання властивостей SMA та прогнозування їхньої гістерезисної поведінки із застосуванням методів машинного навчання і пояснюваного штучного інтелекту. На підставі одержаних результатів можна сформулювати такі висновки:

- Показано, що сплави з пам'яттю форми, завдяки ефектам пам'яті форми й надпружності, зумовленими оборотними фазовими перетвореннями між аустенітом і мартенситом, широко застосовують у медицині, авіакосмічній техніці, робототехніці, автоматизації та інших галузях.

- Встановлено, що для сплавів з пам'яттю форми характерний виражений гістерезис у координатах “напруження–деформація”, а площа гістерезисної петлі відповідає енергії, розсіяній за цикл, що безпосередньо пов'язано з демпфувальними властивостями цих матеріалів.

- Показано, що на форму гістерезисної петлі та величину розсіювання енергії істотно впливають частота навантаження, температурні межі фазових перетворень і історія навантаження (кількість циклів).

- Показано обмеження традиційних підходів до прогнозування властивостей SMA. Обґрунтовано доцільність застосування методів машинного навчання як перспективної альтернативи, оскільки вони дають змогу будувати

моделі, керовані даними, які ефективно апроксимують нелінійні залежності між параметрами навантаження та деформацією матеріалу і після навчання забезпечують швидке прогнозування без багатоетапних чисельних розрахунків.

– На основі аналізу літератури встановлено, що значна частина наявних робіт з ML у SMA переважно орієнтована на прогнозування у межах діапазону навчальних даних (у межах досліджених режимів або простору складу чи параметрів) та на задачі прогнозування температур трансформації або статичних характеристик. Водночас наявні дослідження не охоплюють задачі прогнозування еволюції гістерезису, пов'язаної з накопиченням функціональної втоми на віддалених циклах.

– Показано, що інтеграція методів пояснюваного штучного інтелекту є необхідною складовою сучасних технологій прогнозування властивостей і гістерезисної поведінки SMA, оскільки ХАІ дає змогу кількісно оцінювати внесок окремих ознак, зокрема напруження, номера циклу навантаження-розвантаження, стадії навантаження або розвантаження та частоти, у формування прогнозу моделі, оцінювати фізичну узгодженість результатів прогнозування та визначати межі узагальнення побудованих моделей.

Отже, найбільш перспективним напрямом подальших досліджень є розроблення моделей, які одночасно забезпечують високу точність відтворення гістерезисних петель, здатність до узагальнення за межами навчального інтервалу циклів, зокрема прогнозування еволюції гістерезисної поведінки на подальших циклах навантаження-розвантаження, а також інтерпретованість результатів засобами ХАІ для оцінювання відповідності виявлених моделлю залежностей відомим фізичним механізмам фазових перетворень, гістерезисної поведінки та накопичення функціональної втоми.

Таким чином, результати аналізу, проведеного в першому розділі, обґрунтовують актуальність побудови та оцінювання моделей машинного навчання для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми з використанням методів пояснюваного штучного інтелекту.

## РОЗДІЛ 2. МЕТОДИКА ПОБУДОВИ ТА ІНТЕРПРЕТАЦІЇ МОДЕЛЕЙ МАШИННОГО НАВЧАННЯ

Прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми в умовах циклічного навантаження потребує не лише вибору ефективних моделей машинного навчання, а й формування цілісної методики підготовки експериментальних даних, їх валідації, оцінювання якості прогнозів та інтерпретації отриманих результатів. Це зумовлено складною нелінійною природою процесів, що відбуваються у таких матеріалах, залежністю деформації від історії навантаження, номера циклу та фази навантаження–розвантаження, а також необхідністю перевірки узагальнювальної здатності моделей за межами навчального діапазону даних.

У цьому розділі представлено експериментальну базу дослідження та описано формування набору даних для прогнозування деформації NiTi-сплаву з пам'яттю форми. Розглянуто процедури попередньої обробки й контролю якості експериментальних даних, зокрема методи виявлення потенційних аномальних значень. Обґрунтовано стратегію групового розбиття даних і валідації моделей з урахуванням циклічної структури вимірювань. Представлено математичну модель прогнозування, у якій номер циклу навантаження розглядається як незалежна вхідна змінна, що дає змогу виконати прогнозування як у межах навчального діапазону даних, так і в режимі екстраполяції. Обґрунтовано вибір моделей машинного навчання для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми, зокрема ансамблевих регресійних моделей VotingRegressor і StackingRegressor, рекурентних нейронних мереж SimpleRNN, LSTM, GRU та темпоральної згорткової мережі TCN. Також представлено метрики для оцінювання якості прогнозування, засоби візуального аналізу результатів, методи пояснюваного штучного інтелекту SHAP та Integrated Gradients, а також загальну структуру програмної системи дослідження.

## 2.1. Експериментальна база та формування набору даних

Експериментальні дані отримано під час випробувань NiTi-дроту з пам'яттю форми діаметром 1,5 мм і довжиною 210 мм на малоциклову втому [41]. Дріт поставлено компанією Wuxi Xin Xin Glai Steel Trade Co., Ltd. Хімічний склад матеріалу становив 55,78 % Ni та 44,12 % Ti при сумарному вмісті домішок приблизно 0,1 % (таблиця 2.1).

Таблиця 2.1.

Хімічний склад домішок у сплаві NiTi (мас. %)

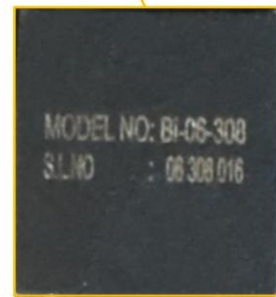
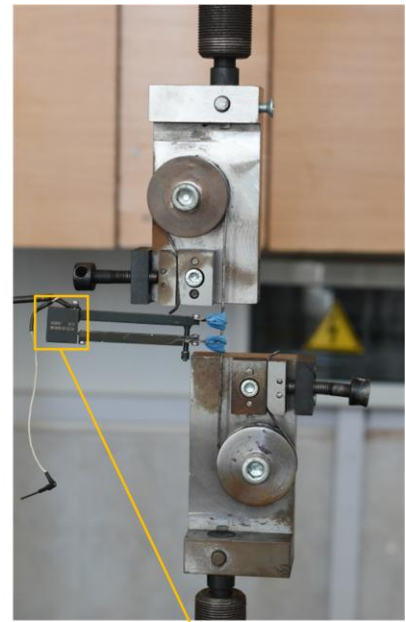
Елемент	Co	Cu	Cr	Fe	Nb	C	H	O	N
Вміст, мас.%	0,005	0,005	0,005	0,012	0,005	0,032	0,001	0,040	0,001

Модуль пружності нітинолу в аустенітному стані складав  $E_A = 52,7$  ГПа [42]. Початок прямого перетворення аустеніту в мартенсит відбувався при напруженні  $\sigma_{AM} = 338$  МПа. Випробування здійснювали на повітрі за температури  $24 \pm 1$  °C на сервогідравлічній машині STM-100 (рис. 2.1а) у режимі контрольованого напруження (stress controlled mode) відповідно до стандарту ASTM F2516-14 [43]. Випробування одновісним розтягом проводили за синусоїдальним циклічним навантаженням з коефіцієнтом асиметрії 0,1. Під час випробування фіксували зусилля, переміщення штока та видовження дротів. Випробування проводили за різних частот  $f$  (0,1; 0,3; 0,5; 1; 3; 5 та 10 Гц). Видовження фіксували екстензометром моделі Vi-06-308 (рис. 2.1б) виробництва Bangalore Integrated System Solutions (BISS). Переміщення вимірювали індуктивним датчиком Vi-02-313 (рис. 2.1в).

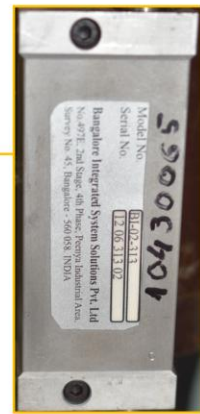
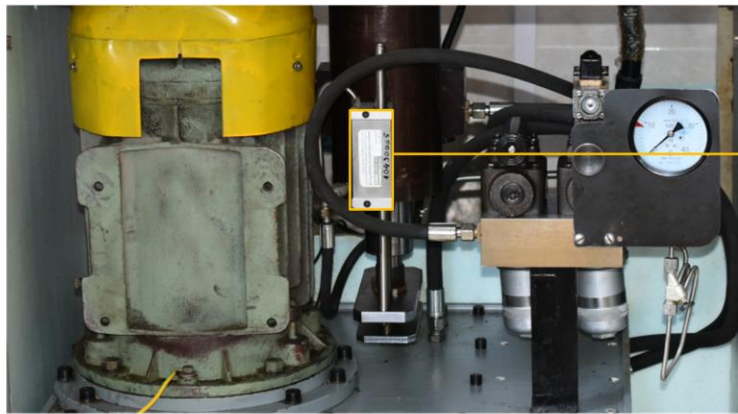
Відносна похибка приладів згідно з сертифікатами не перевищувала 0,1 %. Напруження  $\sigma$  (МПа) та деформацію  $\varepsilon$  (%) визначали на основі записаних залежностей “сила–видовження”, отриманих за допомогою програмного забезпечення Test Builder версії 5.3.



(a)



(б)



(в)

Рис. 2.1. Установка для проведения эксперимента: (а) общий вид машины STM-100; (б) образец, закрепленный у захватах, та датчик Vi-06-308; (с) датчик Vi-02-313.

Петлі гістерезису зберігали для кожного циклу, що дало змогу розраховувати миттєві значення напруження, деформації та розсіяної енергії  $E_{diss}$  як площу, окреслену петлею навантаження-розвантаження.

На основі експериментальних даних було сформовано набір даних, який містив напруження (ознака Stress)  $\sigma$  (МПа), номера циклу навантаження  $N$  (ознака Cycle), деформацію матеріалу (ознака Strain)  $\varepsilon$  (%), інформацію про етап навантаження або розвантаження  $u$  (ознака UpDown) та частоту навантаження  $f$  (Гц). Для навчання моделей ML скористалися експериментально отриманими даними 100–250 циклів навантаження-розвантаження матеріалу SMA. Вибір інтервалу циклів 100–250 як навчального діапазону обґрунтовано тим, що після початкового етапу циклічного навантаження гістерезисна поведінка сплавів з пам'яттю форми набуває стабілізованого характеру. Крім того, використання циклів 100–250 забезпечує достатній обсяг експериментальних даних для навчання моделей машинного навчання, водночас залишаючи віддалені цикли поза навчальною вибіркою для незалежної перевірки їх екстраполяційної здатності.

Кількість елементів у наборі даних для кожної з семи частот наведено у таблиці 2.2.

*Таблиця 2.2.*

Розподіл кількості елементів (замірів) у наборі даних за частотами циклічного навантаження

Частота, Гц	0,1	0,3	0,5	1	3	5	10
<b>Кількість замірів</b>	15251	16912	3051	16006	18573	14949	5587

Як видно з таблиці 2.2, обсяг експериментальних даних є нерівномірним для різних частот циклічного навантаження. Хоча строгих нормативних вимог до мінімального обсягу вибірки для навчання моделей не встановлено, у задачах прогнозування на основі табличних числових даних вибірки обсягом у декілька тисяч вимірювань зазвичай вважають достатніми за умови їх репрезентативності

та належної якості. У межах цього дослідження сформований набір даних відповідає зазначеним умовам, тому є придатним для побудови, навчання та оцінювання моделей ML у задачі прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми.

## 2.2. Попередня обробка та контроль якості експериментальних даних

Під час попередньої обробки експериментальних даних перевірено наявність аномальних значень напруження  $\sigma$  та деформації  $\varepsilon$ , які можуть спотворювати статистичні характеристики вибірки та негативно впливати на процес навчання моделей ML [44].

### 2.2.1. Виявлення аномалій за правилом $\pm 3\sigma$

З цією метою на першому етапі застосовано правило  $\pm 3\sigma$  (*k-sigma*-тест), що є класичним статистичним критерієм виявлення аномальних значень [45].

Для всієї вибірки обчислювали глобальне середнє значення напруження або деформації  $\mu_y$  за формулою:

$$\mu_y = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i, \quad (2.1)$$

де  $y_i$  - експериментально виміряне значення напруження або деформації для  $i$ -го вимірювання (МПа),  $n$  - загальна кількість вимірювань,  $i$  - індекс вимірювання ( $i=1,2,\dots,n$ ).

Далі обчислювали відповідне стандартне відхилення *sigma* за формулою:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \mu_y)^2}. \quad (2.2)$$

На основі отриманих статистичних оцінок формувався допустимий інтервал значень напруження або деформації  $[\mu_y - 3 \cdot \sigma, \mu_y + 3 \cdot \sigma]$ . Будь-яке вимірювання  $y_i$ , для якого виконується умова  $|y_i - \mu_y| > 3 \cdot \sigma$  розглядалося як потенційне аномальне значення.

Застосування правила  $\pm 3\sigma$  є доцільним за умови наближеності розподілу експериментальних даних до нормального. Для нормального розподілу відомо, що приблизно 99,7 % спостережень лежать у межах трьох стандартних відхилень від середнього значення. Таким чином, вихід за межі  $\mu_y \pm 3 \cdot \sigma$  свідчить про статистично нетипове значення вимірюваної величини та може вказувати на помилки реєстрації сигналу або рідкісні екстремальні стани матеріалу.

### 2.2.2. Виявлення аномалій за критерієм IQR

Правило IQR є статистичним критерієм виявлення аномальних значень, який базується на кватильній структурі розподілу, а не на середньому значенні та стандартному відхиленні [46]. На відміну від правила  $\pm 3\sigma$ , цей підхід не потребує припущення нормального розподілу.

Метод широко застосовується в аналізі експериментальних даних, де розподіл може бути асиметричним або мультимодальним, що є характерним для даних гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми.

Міжкватильний розмах IQR визначали за формулою:

$$IQR = Q_3 - Q_1, \quad (2.3)$$

де  $Q_1$  - нижній кuartиль (25-й процентиль) розподілу значень напруження або деформації, що відокремлює нижні 25 % вимірювань,  $Q_3$  - верхній кuartиль (75-й процентиль) розподілу значень напруження або деформації, який відокремлює верхні 25 % вимірювань.

Величина IQR характеризує ширину центральної частини емпіричного розподілу напруження, у межах якої зосереджено 50 % усіх експериментальних даних. На відміну від стандартного відхилення, міжкuartильний розмах не залежить від поодиноких екстремальних значень і є стійким до асиметрії та “важких хвостів” розподілу. У контексті аналізу гістерезисної поведінки сплавів з пам’яттю форми величина IQR відображає типовий діапазон коливань напруження або деформації в центральній зоні розподілу та слугує базою для побудови кuartильних меж під час виявлення статистично нетипових значень.

На основі міжкuartильного розмаху IQR визначались нижня та верхня межі статистично допустимих значень напруження або деформації  $[Q_1 - m \cdot IQR, Q_3 + m \cdot IQR]$ , де емпіричний коефіцієнт чутливості  $m = 1,5$ . Далі визначено внутрішні межі за формулами:

$$Q_1 - 1.5 \cdot IQR, \quad (2.4)$$

$$Q_3 + 1.5 \cdot IQR. \quad (2.5)$$

Вимірювання, що виходять за ці межі, розглядали як потенційні аномалії.

### **2.2.3. Виявлення локальних аномалій за ковзним z-показником**

Глобальні критерії  $\pm 3\sigma$  та IQR оцінюють значення напруження або деформації відносно статистики всієї вибірки. Однак у часових даних гістерезису можливі короткотривалі сплески, локальний збій реєстрації сигналу або миттєві нестабільності, які можуть не порушувати глобальні межі, але є нетиповими в локальному контексті. З цієї причини застосовано локальне правило ковзного z-

показника (rolling z-score) [47], яке порівнює кожен точку не з усім набором даних, а з її найближчим оточенням у межах ковзного вікна з розміром  $w=20$  вимірювань, центроване відносно поточного значення.

Для кожного значення досліджуваної механічної величини  $y_i$  формували центроване ковзне вікно  $W_i$ , як множину значень  $y_j$ , що належать центрованому ковзному вікну, симетрично розміщеному відносно поточного вимірювання  $y_i$ .

$$W_i = \left\{ y_j : j \in \left[ i - \left\lfloor \frac{w}{2} \right\rfloor, i + \left\lfloor \frac{w}{2} \right\rfloor \right] \right\}, \quad (2.6)$$

де  $i$  - індекс поточного спостереження у впорядкованій послідовності даних,  $j$  - індекс сусідніх спостережень, що входять до складу вікна  $W_i$ .

У межах вікна  $W_i$  обчислювали локальне середнє  $\mu_{local}(i)$  та локальну міру розкиду  $\sigma_{local}(i)$  за формулами:

$$\mu_{local}(i) = \frac{1}{|W_i|} \sum_{y_j \in W_i} y_j, \quad (2.7)$$

$$\sigma_{local}(i) = \sqrt{\frac{1}{|W_i| - 1} \sum_{y_j \in W_i} (y_j - \mu_{local}(i))^2}, \quad (2.8)$$

де  $|W_i|$  - фактична кількість елементів у вікні.

На основі цих величин визначали локально стандартизоване відхилення  $z_{local}(i)$  (локальний z-score) за формулою:

$$z_{local}(i) = \frac{y_i - \mu_{local}(i)}{\sigma_{local}(i)}. \quad (2.9)$$

Вимірювання  $y_i$  класифікують як локально нетипове, якщо виконується умова:

$$|z_{local}(i)| > k_{roll}, \quad (2.10)$$

де  $k_{roll}$  – порогове значення чутливості локального критерію ( $k_{roll} = 3$ ).

Таким чином, значення, що відхилялися більш ніж на три локальні стандартні відхилення від середнього у своєму безпосередньому оточенні, розглядали як короткотривалі локальні аномалії.

### 2.3. Стратегія розбиття даних і валідації моделей

Для забезпечення коректної оцінки моделі та уникнення витоку інформації між вибірками розбиття даних здійснювали за груповим принципом із застосуванням параметра `Cycle` як групової ознаки. На першому етапі скористалися алгоритмом `GroupShuffleSplit` [48], який вибирав дані таким чином, що 20 % унікальних циклів належало до тестової вибірки, тоді як решта 80 % циклів входили до тренувального набору даних. Це дало змогу отримати незалежні тестові дані, які модель не бачила під час навчання і які застосовували виключно для фінальної оцінки узагальнювальної здатності моделі.

Таким чином, структуру фінального розбиття можна подати як:

- дані для навчання - 80 % усіх циклів;
- дані для тестування - 20 % усіх циклів.

Групове розбиття за параметром `Cycle` забезпечує те, що всі дані одного циклу потрапляють лише в одну вибірку - тренувальну, валідаційну або тестову. Це унеможливорює змішування даних з одного й того ж циклу між вибірками та запобігає витоку інформації. Такий підхід дає можливість більш об'єктивно оцінити здатність моделі узагальнювати дані, оскільки вона тестується на повністю нових циклах, яких не бачила під час навчання або валідації.

Для внутрішньої перевірки моделей та налаштування їх гіперпараметрів у роботі застосовано алгоритм `GroupKFold`, який реалізує групову крос-валідацію з попередньо визначеною кількістю валідаційних груп (фолдів) і гарантує, що всі вимірювання, які належать до одного циклу навантаження, не потрапляють

одночасно до навчальної та валідаційної вибірок [49]. У межах цієї процедури для отримання коректної та неупередженої оцінки узагальнювальної здатності моделей машинного навчання в роботі застосовано підхід out-of-fold прогнозування (OOF) [50, 51]. Його сутність полягає в тому, що прогноз для кожного вимірювання формується моделлю, навченою без використання цього вимірювання, а у випадку групової крос-валідації - без використання всіх вимірювань відповідного циклу навантаження-розвантаження. Для кожної валідаційної групи циклів модель навчається на даних усіх інших циклів, а її якість оцінюється на відкладених циклах, які не використовувалися під час навчання. У результаті кожне вимірювання має власний OOF-прогноз, отриманий без витoku інформації з тренувальної вибірки. Застосування OOF-оцінки дає змогу отримати стабільні та статистично обґрунтовані оцінки похибок моделей. Такий підхід є принципово важливим для задач прогнозування гістерезисної поведінки SMA, оскільки дає можливість уникнути витoku інформації між підвибірками та забезпечує коректну оцінку узагальнювальної здатності моделей.

Для оцінювання здатності розроблених моделей ML узагальнювати закономірності деформації за межами тренувального та тестового діапазону виконано незалежне тестування на циклах навантаження, які не входили до навчальної та тестової вибірки – 251, 260, 300, 350, 400, 450 та 500 цикли. Така перевірка стосувалася екстраполяційної спроможності моделей, тобто їх здатності прогнозувати гістерезисну поведінку сплаву при подальшому накопиченні втомних ефектів.

#### **2.4. Математична модель прогнозування**

Прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми за умов циклічного навантаження є складною задачею через зміну властивостей матеріалу у процесі циклічної втоми. Більшість традиційних підходів машинного навчання орієнтовано на прогнозування у межах діапазону навчальних даних та

не забезпечує коректної роботи поза діапазоном наявних даних. Зокрема, прогнозування деформації для номерів циклів, що не входили до навчальної множини, потребує спеціального формального підходу, який дає можливість відокремити екстраполяцію від прогнозування у межах діапазону навчальних даних на рівні математичної постановки задачі [52-54].

У даній роботі запропоновано математичну модель, у якій номер циклу навантаження розглядають як незалежну вхідну змінну функції прогнозування. Такий підхід дає змогу формально описати та реалізувати екстраполяційне прогнозування деформації незалежно від конкретного класу застосованої моделі машинного навчання.

Гістерезисну поведінку матеріалу загалом описують функціональною залежністю між напруженням, фазою навантаження–розвантаження та номером циклу. У загальному вигляді прогнозоване значення деформації визначає функція:

$$\hat{\varepsilon}_i = F_{\theta}(\sigma_i, u_i, N_i), \quad (2.11)$$

де  $\sigma_i$  – значення напруження для  $i$ -го вимірювання,  $N_i$  – номер циклу навантаження-розвантаження для  $i$ -го вимірювання, що відповідає ознаці Cycle,  $u_i \in \{1,2\}$  – індикатор фази навантаження або розвантаження для  $i$ -го вимірювання, що відповідає ознаці UpDown,  $\hat{\varepsilon}_i$  – прогнозоване значення деформації для  $i$ -го вимірювання,  $F_{\theta}$  – детермінована модель машинного навчання з параметрами  $\theta$ ,  $i=1, \dots, n$  - індекс вимірювання в експериментальному наборі даних, де  $n$  - загальна кількість вимірювань.

Параметри  $\theta$  визначають внутрішню структуру та налаштування моделі  $F_{\theta}$ , отримані в процесі навчання. Для ансамблевих моделей вони можуть охоплювати гіперпараметри базових алгоритмів, ваги окремих моделей або коефіцієнти метамоделі, тоді як для моделей глибокого навчання – вагові коефіцієнти та параметри шарів нейронної мережі.

Після завершення процедури навчання параметри моделі  $\theta$  фіксують, і прогноз деформації для заданого набору вхідних змінних  $(\sigma, u, N)$  є однозначним. Таким чином, у режимі прогнозування модель задає детерміновану функціональну залежність між вхідними параметрами та деформацією.

Моделі навчаються на обмеженій множині циклів  $N \in [N_{min}, N_{max}]$ . Після чого ідентифікованою функціональною залежністю використовують для прогнозування деформації для  $N > N_{max}$ . Такий підхід забезпечує математичну основу для екстраполяційного прогнозування деформації матеріалу за межами навчального діапазону циклів.

## **2.5. Моделі машинного навчання**

### **2.5.1. Ансамблева регресійна модель зваженого голосування (VotingRegressor)**

У даному дослідженні для прогнозування деформації SMA застосовано ансамблеву модель типу VotingRegressor [55]. Основна ідея методу полягає в поєднанні передбачень декількох незалежно навчених базових моделей з метою підвищення точності прогнозування та зменшення дисперсії результатів. На відміну від одиничних моделей, ансамблеві підходи дають змогу компенсувати індивідуальні недоліки окремих алгоритмів внаслідок їхньої взаємодоповнюваності. Voting-підхід передбачає паралельне навчання декількох різнорідних регресійних моделей, таких як дерева рішень, SVM, kNN та нейронні мережі.

Для підвищення ефективності прогнозування програмно реалізовано зважене голосування, при якому внесок кожного базового алгоритму у фінальний результат визначався індивідуальною вагою [56]. Значення ваг обчислювали на основі оберненого значення MSE, отриманого під час

п'ятикратної перехресної перевірки за схемою GroupKFold із застосуванням OOF.

Для кожної  $j$ -ї моделі на  $k$ -му фолді середньоквадратичну похибку обчислювали за формулою:

$$MSE_j^{(k)} = \frac{1}{n_k} \sum_{i=1}^{n_k} (y_i - \hat{y}_{j,i}^{(k)})^2, \quad (2.12)$$

де  $n_k$  – кількість вимірювань у валідаційній групі (фолді)  $k$ ,  $y_i$  – експериментальне значення деформації,  $\hat{y}_{j,i}^{(k)}$  – прогноз  $j$ -ї моделі, навченої на тренувальних даних (усі фолди, крім  $k$ ) та перевіреної на валідаційному фолді  $k$ .

Середнє значення похибки  $j$ -ї моделі за всіма групами (фолдами) визначали за формулою:

$$\overline{MSE}_j = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K (MSE_j^{(k)}), \quad (2.13)$$

де  $K$  – кількість груп (фолдів) (у дослідженні  $K = 5$ ).

Вагу  $w_j$  для кожної моделі визначали за формулою:

$$w_j = \frac{1}{\overline{MSE}_j}. \quad (2.14)$$

Таким чином, моделі з нижчим значенням середньоквадратичної похибки отримували більшу вагу.

Фінальний прогноз ансамблю обчислювали як зважене середнє прогнозів усіх моделей:

$$\hat{y}(x) = \frac{\sum_{j=1}^M (w_j \cdot \hat{y}_j(x))}{\sum_{j=1}^M w_j}, \quad (2.15)$$

де  $M$  – кількість базових моделей,  $\hat{y}_j(x)$  – прогноз  $j$ -ї моделі для вектора ознак  $x = [\text{Stress}, \text{Cycle}, \text{UpDown}]$ ,  $w_j$  – вага моделі, визначена за (2.14).

Такий підхід дав змогу надати більшого впливу тим алгоритмам, які показали кращу узгодженість з експериментальними даними, та забезпечив

збалансоване поєднання локальної стабільності (через групування циклів навантаження) і глобальної точності прогнозування.

Перевагою Voting-моделі є її відносна простота реалізації, висока стійкість до шуму у даних та зменшення ризику перенавчання. Voting-ансамбль добре узагальнює поведінку матеріалу завдяки застосуванню різних принципів апроксимації нелінійних залежностей.

### 2.5.2. Ансамблева регресійна модель стекинг (StackingRegressor)

Для підвищення точності та стабільності прогнозування у роботі застосовано ансамблеву модель типу StackingRegressor [57]. На відміну від Voting-підходу, стекинг передбачає ієрархічну архітектуру, у якій передбачення базових моделей застосовують як вхідні ознаки для метамоделі вищого рівня. Така структура дає можливість ефективніше враховувати сильні та слабкі сторони кожного алгоритму. За метамодель зазвичай вибирають лінійні моделі з регуляризацією, що сприяє стабільності та інтерпретованості результатів.

Архітектура стекинг-моделі у даному дослідженні має дворівневу структуру. На першому рівні розташовано базові регресори різної природи, включно з ансамблями дерев рішень, SVM, kNN та нейронними мережами. Кожен із них незалежно навчається на тренувальній вибірці та формує власні передбачення деформації SMA. На другому рівні метамодель агрегує ці передбачення та формує остаточний прогноз [58, 59].

У загальному вигляді прогноз ансамблевої Stacking-моделі визначають у вигляді лінійної комбінації прогнозів базових моделей:

$$\hat{y} = b + \sum_{j=1}^m w_j \cdot \hat{y}_j, \quad (2.16)$$

де  $\hat{y}$  – кінцевий прогноз ансамблю,  $\hat{y}_j$  – прогноз  $j$ -ї базової моделі,  $w_j$  – вага, яку визначає метамодель ElasticNet,  $b$  – зсув (bias),  $m$  – кількість базових моделей.

Коефіцієнти  $w_j$  відображають внесок кожної базової моделі у підсумковий прогноз ансамблю. Значення цих коефіцієнтів визначає метамодель ElasticNet у процесі навчання шляхом мінімізації функції втрат з урахуванням регуляризації, що дає змогу автоматично зменшувати вплив менш інформативних або корельованих базових моделей. Зсув  $b$  (intercept або bias) – незалежний параметр моделі, який визначає базовий рівень прогнозованої змінної та дає можливість коригувати середнє значення виходу моделі, коли всі вхідні ознаки дорівнюють нулю. Наявність цього параметра забезпечує зсув гіперплощини прогнозу відносно початку координат, компенсуючи систематичне відхилення базових моделей і підвищуючи точність апроксимації.

У межах ансамблевого Stacking підходу навчання метамоделі здійснювали на OOF-прогнозах, отриманих у процесі групової перехресної валідації GroupKFold. Це забезпечує відсутність витоку інформації між рівнями ансамблю, формує неупереджену навчальну вибірку для метамоделі та дає змогу правильно оцінити внесок кожної базової моделі у підсумковий прогноз.

Застосування StackingRegressor є особливо доцільним для задач прогнозування гістерезисної поведінки SMA, оскільки така поведінка формується під впливом кількох взаємопов'язаних чинників: напруження, номера циклу та фази навантаження. Стекінг дає змогу інтегрувати різні типи нелінійних апроксимацій, сформованих базовими моделями, та сприяє підвищенню точності прогнозування, зокрема під час узагальнення на цикли, що не входили до навчального інтервалу.

### **2.5.3. Рекурентні нейронні мережі (SimpleRNN, LSTM, GRU)**

Для прогнозування часової еволюції деформації SMA у роботі застосовано рекурентні нейронні мережі, зокрема SimpleRNN, LSTM та GRU. Дані моделі належать до класу моделей глибокого навчання та спеціально призначені для

роботи з послідовними даними, у яких поточний стан залежить від попередніх значень.

Базова архітектура RNN (SimpleRNN) використовує рекурентні зв'язки, що дають можливість зберігати інформацію про попередні кроки послідовності [60,61]. Проте дана модель має обмеження, пов'язані з проблемами зникання та вибуху градієнтів, що ускладнюють навчання на довгих часових інтервалах. У задачах циклічного навантаження SMA це може призводити до втрати інформації про накопичувальні ефекти втомі. Для подолання цих можливих недоліків у дослідженні скористалися архітектурами LSTM та GRU. Мережі LSTM містять спеціальні керовані комірки пам'яті з механізмами запису, збереження та забування інформації, що дає змогу ефективно моделювати довготривалі залежності [62-64]. Це є критично важливим для відтворення розвитку гістерезисних петель у процесі циклічного навантаження. GRU-мережі є спрощеним варіантом LSTM, що мають меншу кількість параметрів і, відповідно, швидше навчаються, зберігаючи при цьому здатність до прогнозування довготривалих залежностей [65-67].

Використання різних типів рекурентних архітектур дає можливість оцінити компроміс між складністю моделі, швидкістю навчання та точністю прогнозування. Застосування рекурентних нейронних мереж у даній роботі забезпечує адекватне відтворення часової динаміки деформації SMA та дає можливість враховувати історію навантаження як фактор формування гістерезисної поведінки.

#### **2.5.4. Темпоральна згорткова мережа (TCN)**

Для прогнозування нелінійної гістерезисної поведінки SMA у роботі також скористалися TCN [68,69]. Цей підхід поєднує переваги згорткових нейронних мереж та спеціальних механізмів обробки часових даних, що робить TCN ефективним інструментом для аналізу послідовностей, де значення в кожному кроці залежить від попередньої історії. TCN користується причинними

згортками (causal convolutions), які гарантують, що кожне передбачення базується лише на попередніх значеннях послідовності. Це важливо для правильного відтворення механічної поведінки матеріалу, оскільки деформація в певний момент часу залежить від того, яке навантаження та які фазові перетворення відбувалися перед цим. Однією з ключових властивостей TCN є застосування дилатаційних згорток (dilated convolutions), які дають можливість моделі охоплювати значно довший часовий інтервал без збільшення глибини мережі та без зменшення рівня часової деталізації у вхідному сигналі. Дилатації створюють фільтри, що здатні аналізувати як локальні, так і довготривалі залежності, наприклад, зміну величини гістерезисної петлі з циклу в цикл. Завдяки такому поєднанню причинності та дилатації TCN добре підходить для задач прогнозування поведінки SMA за циклічного навантаженням [70]. Гістерезисна поведінка матеріалу не лише визначається поточним значенням напруження, а й залежить від історії навантаження, включно з фазовими переходами аустеніт–мартенсит, напрямком деформації (навантаження чи розвантаження), а також номером циклу, що відображає накопичення втоми. Модель TCN враховує всі ці взаємозв'язки у часовій послідовності, що робить її придатною для точного прогнозування форми гістерезисних петель.

## 2.6. Оцінювання якості прогнозування

У даній роботі для оцінки продуктивності моделі скористалися такими метриками, як MAE, MSE,  $R^2$  та MAPE [71].

Метрика MAE показує середнє значення абсолютних відхилень між прогнозованими та реальними значеннями, що дає змогу оцінити, наскільки прогнозовані дані відрізняються від фактичних у середньому. Метрику MAE обчислювали за формулою:

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i|, \quad (2.17)$$

де  $n$  – кількість зразків у тестовій вибірці,  $i=1, \dots, n$  – індекс окремого вимірювання тестової вибірки,  $y_i$  – експериментальне значення деформації ( $\varepsilon_{true}^{test}$ ) для  $i$ -го вимірювання,  $\hat{y}_i$  – прогнозоване моделлю значення деформації ( $\varepsilon_{pred}^{test}$ ) для  $i$ -го вимірювання.

Метрика MSE дає можливість оцінити величину квадратичної похибки, що підкреслює більші відхилення, оскільки квадратична функція значно підсилює вплив великих похибок. Метрику обчислювали за формулою:

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2. \quad (2.18)$$

Метрика MAPE відображає середнє відсоткове відхилення прогнозованих значень від фактичних, що є зручним для розуміння відносної точності прогнозів. Метрику обчислювали за формулою:

$$MAPE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|y_i - \hat{y}_i|}{|y_i|}. \quad (2.19)$$

У формулі значення MAPE подано у частках одиниці.

Коефіцієнт детермінації  $R^2$  дає змогу оцінити, наскільки добре модель пояснює дисперсію фактичних значень у тестовому наборі даних. Метрику обчислювали за формулою:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}, \quad (2.20)$$

де  $\bar{y}$  - середнє значення деформації в експериментальних даних.

Застосування кількох метрик дало можливість отримати більш повну та об'єктивну характеристику продуктивності моделі.

Додатково у процесі оцінки точності моделей машинного навчання скористалися низкою візуалізаційних інструментів, які дали змогу здійснити якісний аналіз відповідності прогнозованих значень реальним даним. Графік Actual vs Predicted (реальні значення проти передбачених) дав можливість оцінити, наскільки прогнозовані значення узгоджуються з реальними. Графік залишків (Residual Plot) показав розподіл похибок прогнозування (різниць між фактичними та передбаченими значеннями) залежно від номера вимірювання у тестовому наборі даних. Побудовані гістерезисні петлі дали змогу візуально порівняти форму експериментальної та прогнозованої кривої. Такі візуалізації доповнили числові метрики, забезпечивши глибший аналіз роботи моделей.

## **2.7. Інтерпретація результатів прогнозування методами ХАІ**

У дослідженнях, що базуються на моделях машинного навчання, принципово важливо забезпечити інтерпретованість отриманих прогнозів, тобто можливість пояснити, які саме вхідні ознаки та яким чином впливають на результат моделі. Для цього у роботі застосовано підходи ХАІ, що дають можливість підвищити довіру до моделей, перевірити фізичну обґрунтованість результатів і визначити межі їх узагальнення [72].

У межах цієї роботи фізичну узгодженість моделей машинного навчання запропоновано оцінювати за відповідністю виявлених моделлю залежностей відомим фізичним закономірностям поведінки сплавів з пам'яттю форми під час циклічного навантаження. Такий підхід дає змогу визначити, чи модель не лише формально апроксимує експериментальні дані, а й виявляє структуру впливу вхідних змінних на прогнозовану деформацію, яка не суперечить фізичним уявленням гістерезисну поведінку та накопичення функціональної втоми матеріалу.

Основними критеріями перевірки фізичної узгодженості моделей є:

1. Домінуючий вплив напруження на прогнозовану деформацію. Оскільки деформація SMA безпосередньо пов'язана з прикладеним

напруженням (ознака Stress), результати ХАІ-аналізу мають підтверджувати істотний внесок напруження у формування прогнозу. Високі значення важливості цієї ознаки за SHAP або Integrated Gradients свідчать про те, що модель коректно відображає основну механічну залежність між напруженням і деформацією.

2. Врахування фази навантаження-розвантаження. Гістерезисна поведінка SMA характеризується різними траєкторіями деформування під час навантаження та розвантаження. Тому ознака UpDown, яка визначає фазу циклу, повинна мати ненульовий внесок у прогноз. Її вплив підтверджує, що модель розрізняє гілки гістерезисної петлі та враховує асиметрію між процесами навантаження і розвантаження.

3. Наявність впливу номера циклу навантаження. Номер циклу, що відповідає ознаці Cycle, відображає зміну стану матеріалу внаслідок багаторазового циклічного навантаження та накопичення функціональної втоми. Фізично узгоджена модель має враховувати внесок цієї ознаки, особливо під час екстраполяційного прогнозування за межами навчального діапазону циклів. Зростання внеску ознаки Cycle для віддалених циклів свідчить про те, що модель враховує зміну деформації матеріалу зі збільшенням кількості циклів навантаження-розвантаження, що узгоджується з проявами функціональної втоми.

4. Відповідність локальних пояснень фізичному змісту процесу. Для окремих прогнозів локальні пояснення SHAP або Integrated Gradients мають демонструвати логічно обґрунтований внесок ознак. Наприклад, високі значення напруження повинні відповідно впливати на збільшення прогнозованої деформації, а індикатор фази навантаження-розвантаження має пояснювати відмінності між гілками гістерезисної петлі.

5. Сталість структури впливу ознак у межах різних циклів і частот навантаження. Для фізично узгодженої моделі очікується збереження загальної структури впливу вхідних ознак у різних умовах прогнозування. Зокрема, напруження має залишатися основним чинником формування прогнозованої

деформації, фаза навантаження-розвантаження має відображати гістерезисний характер процесу, а номер циклу навантаження-розвантаження - характеризувати вплив накопичення функціональної втоми матеріалу.

Перевірка фізичної узгодженості моделей у роботі ґрунтується на зіставленні результатів ХАІ-аналізу з фізичними уявленнями про гістерезисну поведінку SMA. Модель можна вважати фізично узгодженою, якщо виявлена структура впливу ознак не суперечить відомим закономірностям формування гістерезисної петлі і накопичення функціональної втоми матеріалу під час циклічного навантаження. Такий підхід дає змогу доповнити кількісне оцінювання точності моделей якісною інтерпретацією їхніх прогнозів і підвищити обґрунтованість використання машинного навчання для екстраполяційного прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми.

Для моделей типу Voting, Stacking та TCN у роботі скористалися методом SHAP [73,74]. Він базується на концепції значень Шеплі з теорії кооперативних ігор, де внесок кожного учасника оцінюється шляхом усереднення його маргінального впливу у всіх можливих коаліціях. У контексті машинного навчання такими “учасниками” виступають вхідні ознаки моделі, а SHAP забезпечує математично обґрунтований спосіб оцінити їхній індивідуальний внесок у прогноз. Метод SHAP дає змогу кількісно визначити, якою мірою кожна ознака зміщує передбачене значення відносно базового рівня моделі (expected value). Для задачі регресії значення SHAP інтерпретують як вплив окремої ознаки на збільшення або зменшення прогнозу. Таке представлення є особливо корисним для аналізу нелінійних моделей навчання, де зв'язки між вхідними параметрами та вихідною змінною є складними та часто неявними.

Для моделі з прогнозом  $\hat{y}(x)$  пояснення у термінах SHAP формалізують як розклад прогнозу на базове значення та внески окремих ознак [75] згідно формули:

$$\hat{y}(x) = \phi_0 + \sum_{j=1}^d \phi_j, \quad (2.21)$$

де  $\phi_0 = E[\hat{y}(x)]$  - базове значення моделі (середній прогноз на тренувальних даних),  $\phi_j$  - внесок  $j$ -ї ознаки ( $j \in \{1, \dots, d\}$ ),  $d$  - кількість вхідних ознак (у нашому випадку: Stress, Cycle, UpDown).

Значення  $\phi_j$  визначають за формулою Шеплі:

$$\phi_j = \sum_{S \subseteq N \setminus \{j\}} \frac{|S|! (d - |S| - 1)!}{d!} (\hat{y}_{S \cup \{j\}}(x) - \hat{y}_S(x)), \quad (2.22)$$

де  $N = \{1, 2, \dots, d\}$  - множина всіх ознак,  $S$  - підмножина ознак без  $j$ -ї ознаки,  $|S|$  - кількість ознак у підмножині  $S$ ,  $\hat{y}_S(x)$  - прогноз моделі, побудованої лише на підмножині ознак  $S$ ,  $\hat{y}_{S \cup \{j\}}(x)$  - прогноз моделі, побудованої на підмножині ознак  $S$  разом з ознакою  $j$ .

Метод SHAP дає змогу оцінювати як глобальну важливість ознак, що визначає їхній середній внесок у побудову моделі, так і локальний внесок кожної окремої ознаки у прогноз для конкретного вимірювання. Такий підхід підвищує прозорість роботи моделі та забезпечує глибше розуміння логіки прийняття рішень, оскільки дає можливість інтерпретувати, які параметри та в якій мірі вплинули на кінцевий результат.

Для рекурентних моделей SimpleRNN, LSTM та GRU, що є диференційовними моделями, застосовано метод IG [76,77]. Його застосування дало змогу не лише кількісно оцінити внесок окремих ознак у процес прийняття рішення моделлю, а й підвищити прозорість та довіру до отриманих результатів при аналізі рекурентних моделей. Метод IG обчислює внесок кожної ознаки у передбачення моделі шляхом інтегрування градієнтів вихідної функції вздовж прямолінійного шляху між базовим (нейтральним) значенням і фактичним вхідним вектором. Нехай  $F(x)$  - диференційовна модель (нейронна мережа), що

відображає вхідний вектор ознак  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$  у скалярне передбачення. Тоді внесок (інтегрований градієнт)  $i$ -ої ознаки визначають як:

$$IG_i(x) = (x_i - x'_i) \int_{\alpha=0}^1 \frac{\partial F(x' + \alpha(x - x'))}{\partial x_i} d\alpha, \quad (2.23)$$

де  $x' = (x'_1, x'_2, \dots, x'_n)$  - базовий (нейтральний) вектор, для якого вихід моделі  $F(x')$  зазвичай близький до нуля або неінформативний,  $i = 1, \dots, n$  - номер ознаки,  $\alpha \in [0,1]$  - параметр, що описує шлях від базового стану до фактичного вхідного прикладу,  $\frac{\partial F}{\partial x_i}$  - частинна похідна (градієнт) вихідної функції за  $i$ -ю ознакою.

Отримані інтегровані градієнти  $IG_i(x)$  є кількісною мірою внеску кожної ознаки у результат моделі. Сума всіх внесків апроксимує різницю між передбаченим значенням і базовим виходом:

$$\sum_{i=1}^n IG_i(x) \approx F(x) - F(x'). \quad (2.24)$$

Метод ґрунтується на аксіомах чутливості (Sensitivity) та інваріантності реалізації (Implementation Invariance), що гарантує його надійність і теоретичну обґрунтованість [77].

Для рекурентних нейронних мереж вхід має вигляд часової послідовності:

$$x = \{x_{t,i}\}, \quad (2.25)$$

де  $t = 1, \dots, T$  - номер часового кроку.

У цьому випадку внесок ознаки  $i$  на часовому кроці  $t$  позначають як  $IG_{t,i}$ .

Для окремого циклу навантаження інтегральну міру впливу ознаки  $i$  визначали як суму абсолютних значень її внеску по всіх часових кроках:

$$TI_i = \sum_{t=1}^T |IG_{t,i}|. \quad (2.26)$$

Величина  $TI_i$  (Total Importance) характеризує накопичений інтегральний вплив відповідної ознаки на сумарний прогноз деформації протягом усього циклу навантаження–розвантаження. На відміну від локальної оцінки в окремій точці, така інтегральна характеристика відображає сукупну роль параметра у формуванні виходу моделі у межах повного циклу.

Для забезпечення порівняльності між ознаками інтегральні значення нормували до відсоткових часток:

$$P_i = \frac{TI_i}{\sum_{k=1}^n TI_k} \cdot 100\%. \quad (2.27)$$

Для узагальнення результатів у масштабі всієї вибірки, що містить  $C$  циклів навантаження, для кожного циклу  $j$  обчислювали інтегральну міру впливу:

$$TI_{j,i} = \sum_{t=1}^{T_j} |IG_{t,i}^j|, \quad (2.28)$$

де  $T_j$  – кількість часових кроків у  $j$ -му циклі.

Глобальну інтегральну міру впливу визначали як середнє значення по всіх циклах:

$$\overline{TI}_i = \frac{1}{C} \sum_{j=1}^C TI_{j,i}. \quad (2.29)$$

Показник  $\overline{TI}_i$  відображає середню інтегральну силу впливу ознаки на один цикл навантаження та характеризує її роль у формуванні прогнозу в масштабі всієї вибірки.

Для аналізу структури глобальних впливів також застосовували нормування:

$$\overline{P}_i = \frac{\overline{TI}_i}{\sum_{k=1}^n \overline{TI}_k} \cdot 100\%. \quad (2.30)$$

Такий підхід дає змогу оцінити вплив кожної ознаки на вихід моделі. Це дало можливість проаналізувати, як зміни у вхідних ознаках рекурентних моделей впливають на вихідний прогноз, і виявити, які параметри здійснюють найбільший внесок у результат.

Для окремого часового кроку (вимірювання)  $t_0$  в межах одного циклу навантаження визначено локальну інтегральну міру впливу ознаки, що характеризує її сумарний внесок у формування прогнозу моделі саме в цій точці часу з урахуванням усієї попередньої історії. У цьому випадку величину впливу ознаки  $i$  визначали як суму абсолютних значень  $IG$  по всіх часових кроках послідовності, що формують прогноз у момент  $t_0$ :

$$TI_i^{(t_0)} = \sum_{t=1}^T |IG_{t,i}^{(t_0)}|, \quad (2.31)$$

де  $IG_{t,i}^{(t_0)}$  – величина впливу значення ознаки  $i$ , зафіксованого на часовому кроці  $t$ , на прогнозоване значення моделі у момент часу  $t_0$ ,  $T$  – довжина часової послідовності, що враховується моделлю для формування прогнозу в момент часу  $t_0$ .

Величина  $TI_i^{(t_0)}$  характеризує накопичений історичний вплив ознаки на конкретне передбачення. У фізичному сенсі це означає, що прогноз деформації

у момент часу  $t_0$  визначається не лише поточними значеннями напруження або фазою навантаження–розвантаження, а й усією попередньою еволюцією стану матеріалу в межах циклу. Така постановка дає змогу кількісно оцінити, якою мірою модель враховує довготривалі залежності, зокрема накопичення ефектів функціональної втоми.

Для забезпечення можливості порівняння між ознаками локальні інтегральні значення також нормували до відсоткових часток:

$$P_i^{(t_0)} = \frac{TI_i^{(t_0)}}{\sum_{k=1}^n TI_k^{(t_0)}} \cdot 100\%. \quad (2.32)$$

Отримані величини відображають структуру впливів для конкретного вимірювання та їх залежність від попередньої часової історії.

## **2.8. Програмна система побудови, оцінювання та інтерпретації моделей**

### **2.8.1. Загальна структура програмної системи**

Програмну систему дослідження побудовано з урахуванням специфіки експериментальних даних сплавів з пам'яттю форми. Її організовано за модульним принципом, що забезпечує відтворюваність результатів, зручність розширення для нових моделей або діапазонів циклів навантаження, а також можливість виконання порівняльного аналізу різних підходів до прогнозування. Загальний робочий процес охоплює повний цикл обробки даних, починаючи від завантаження та аналізу експериментальних даних і завершуючи формуванням прогнозів, їх інтерпретацією та автоматизованим збереженням результатів.

На рисунку 2.2 показано спрощену структуру програмної системи дослідження прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми із

застосуванням моделей машинного навчання та методів пояснюваного штучного інтелекту, яка відображає логіку взаємодії основних модулів.

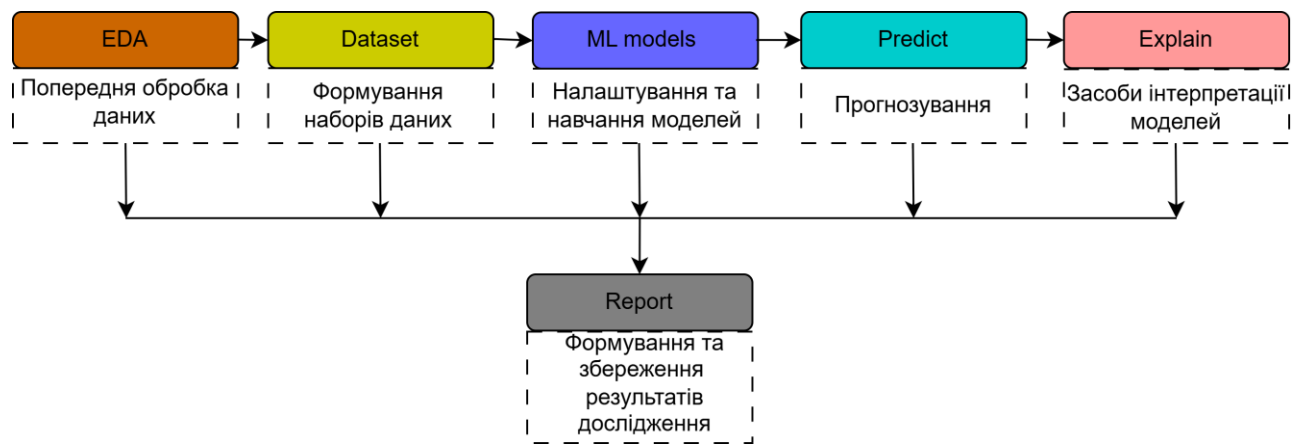


Рис. 2.2. Спрощена структура програмної системи дослідження прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми

Кожен модуль виконує чітко визначені функції, має формалізовані вхідні та вихідні дані та може використовуватися як автономно, так і в складі повного обчислювального конвеєра. Деталізований опис структури програмної системи, алгоритмів, моделей і процедур обробки даних подано у додатку В.

Вхідними даними є файли у форматі CSV, сформовані на основі експериментальних випробувань NiTi-дроту за різних частот циклічного навантаження.

Модуль дослідницького аналізу даних є початковим етапом програмної системи дослідження та виконує важливу роль у забезпеченні якості, надійності й репрезентативності експериментальних даних, що застосовуються для подальшої побудови моделей машинного навчання. Метою цього модуля є попередній аналіз експериментальних вимірювань, спрямований на виявлення статистичних властивостей даних, перевірку їх коректності і виявлення можливих аномалій до етапу формування навчання моделей.

У межах модуля EDA здійснюється описова статистична оцінка основних змінних, зокрема напруження, деформації, номера циклу, фази навантаження або

розвантаження та частоти циклічного навантаження. Аналізуються такі характеристики, як мінімальні та максимальні значення, середні величини, дисперсія, асиметрія та ексцес розподілів. Важливим складником модуля EDA є контроль якості даних і перевірка їх статистичної однорідності. Для цього застосовуються як глобальні, так і локальні критерії аналізу, що дають змогу виявляти поодинокі викиди, короткочасні аномальні сплески сигналів або систематичні зміщення у вимірюваннях (розділ 2.2). Результатом функціонування модуля EDA є підтвердження коректності та придатності експериментальних даних для подальшого аналізу, а також формування обґрунтованих рішень щодо очищення, фільтрації або виключення окремих фрагментів даних за необхідності. Отримані на цьому етапі висновки безпосередньо впливають на процес формування набору даних та забезпечують коректну роботу наступних модулів архітектури, зокрема навчання, прогнозування та інтерпретації моделей машинного навчання.

Модуль Dataset забезпечує централізовану обробку експериментальних даних та формування стандартизованих наборів для подальшого машинного навчання. Особливістю даних SMA є те, що окремі вимірювання не є незалежними між собою, оскільки об'єднані в цикли навантаження–розвантаження. Це зумовлює необхідність спеціальної організації даних і подальшого групового розбиття і виключення витоку інформації між навчальними та тестовими вибірками. З урахуванням циклічної природи експериментальних даних SMA у модулі застосовано груповий принцип розбиття, при якому параметр `Cycle` виступає груповою ознакою. Це означає, що всі вимірювання, які належать до одного циклу навантаження–розвантаження, розглядають як єдине ціле та повністю відносяться або до тренувальної, або до тестової вибірки. Формування базового поділу даних на тренувальну та тестову підвибірki здійснюється за алгоритмом `GroupShuffleSplit`, що забезпечує випадковий, але коректний розподіл унікальних циклів із фіксованою часткою тестових даних (розділ 2.3).

У межах модуля Dataset реалізовано такі етапи:

- додаткова перевірка цілісності та повноти даних;
- базова статистична оцінка (мінімум, максимум, середнє, дисперсія);
- формування матриці вхідних ознак та цільового значення;
- збереження інформації про групи (Cycle) для подальшої коректної валідації;
- експорт підготовлених наборів у проміжні файли.

Цей підхід гарантує відтворюваність експериментів та можливість повторного застосування підготовлених даних для різних моделей.

Модуль `ML models` є основним компонентом програмної системи дослідження та призначений для побудови моделей машинного навчання й оцінювання їх узагальнювальної здатності.

Для ансамблевих регресійних моделей типу `Voting` і `Stacking` налаштування гіперпараметрів здійснювали методом `GridSearchCV`, інтегрованим з процедурою групової крос-валідації `GroupKFold`. Така комбінація дає можливість систематично дослідити дискретний простір гіперпараметрів базових моделей для `VotingRegressor` та базових моделей і метамоделі стекінгу для `StackingRegressor` з урахуванням структури даних та вибрати конфігурацію, що забезпечує мінімальну похибку прогнозування на валідаційних підвибірках.

Для запобігання перенавчанню моделей застосовано комплекс взаємодоповнювальних підходів. Зокрема, групова крос-валідація `GroupKFold` із розбиттям за номером циклу виключає витік інформації між навчальною та валідаційною вибірками та забезпечує коректну оцінку узагальнювальної здатності моделей. Додатково застосовано регуляризацію у метамоделі стекінгу `ElasticNet`, яка поєднує  $L1$ - та  $L2$ -штрафи і обмежує складність моделі. У базових моделях скористалися вбудованими механізмами контролю складності, зокрема обмеженням глибини дерев, кількості оцінювачів та параметрів нейронної мережі, що запобігає надмірному пристосуванню до навчальних даних. Для моделей на основі нейронних мереж застосовано ранню зупинку навчання (`early stopping`), яка припиняє процес навчання за відсутності покращення значення цільової метрики на валідаційній підвибірці. Важливим елементом є також

застосування ансамблевих стратегій. У моделі Voting ваги базових алгоритмів визначають на основі результатів групової крос-валідації (обернено пропорційно середній похибці MSE). У свою чергу, стекінг дає змогу метамоделі навчатися на узагальнених передбаченнях базових моделей, що додатково знижує ризик перенавчання завдяки поєднанню моделей із різними принципами побудови. Додатково стабільність навчання забезпечено шляхом масштабування вхідних ознак для моделей, чутливих до їх масштабу, зокрема SVR, kNN та MLP, що сприяє кращій збіжності алгоритмів навчання. У сукупності зазначені підходи формують сукупність взаємодоповнювальних засобів запобігання перенавчання, що дає змогу досягти належної точності прогнозування при збереженні здатності моделей до узагальнення на нових циклах навантаження, які виходять за межі навчального діапазону.

Для нейронних мереж (SimpleRNN, LSTM, GRU та TCN) підбір архітектури та параметрів навчання здійснювали із застосуванням модуля Keras Tuner з алгоритмом Hyperband [78] у поєднанні з процедурою групової крос-валідації GroupKFold. Застосування Hyperband дає можливість автоматизувати процес підбору гіперпараметрів нейронних мереж, зокрема кількості шарів і нейронів, типів функцій активації, коефіцієнтів регуляризації, швидкості навчання та параметрів оптимізатора, водночас ефективно керуючи обчислювальними ресурсами внаслідок адаптивного відсікання менш перспективних конфігурацій. Поєднання Keras Tuner з груповою крос-валідацією забезпечує коректну оцінку якості моделей і підвищує надійність отриманих результатів.

Для запобігання перенавчання нейронних мереж застосовано низку взаємодоповнювальних підходів. Зокрема, використано механізм ранньої зупинки навчання (early stopping), який припиняє навчання за відсутності покращення цільової метрики на валідаційній вибірці, що дає змогу зменшити ризик надмірного підлаштування моделі під навчальні дані. Додатково застосовано dropout-регуляризацію, яка передбачає випадкове вимкнення частини нейронів під час навчання та зменшує залежність моделі від окремих

нейронів і їхніх співналаштувань. Важливим елементом є застосування групового розбиття даних (GroupKFold) за номером циклу навантаження, що виключає витік інформації між навчальною та валідаційною вибірками та забезпечує коректну оцінку узагальнювальної здатності моделей. Також застосовано адаптивне зменшення швидкості навчання (learning rate scheduling), що сприяє стабілізації процесу навчання на його пізніх етапах.

Крім того, підбір гіперпараметрів у межах Keras Tuner включає параметри, що безпосередньо впливають на складність моделі (кількість шарів, коефіцієнти регуляризації тощо), що дає можливість обирати конфігурації з кращим балансом між точністю та здатністю до узагальнення. Сукупність зазначених підходів підвищує стійкість моделей до перенавчання та покращує їхні узагальнювальні властивості під час прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми.

Оцінка якості прогнозування в модулі здійснюється на основі метрик MSE, MAE,  $R^2$ , MAPE. Результатом функціонування модуля ML models є навчені моделі машинного навчання, збережені у форматах model.pkl для ансамблевих алгоритмів та model.h5 для нейронних мереж, а також файли з графічними та текстовими підсумками оцінки якості прогнозування. Така організація вихідних даних забезпечує можливість повторного використання навчених моделей на етапі прогнозування додаткових циклів без необхідності повторного навчання, підвищує обчислювальну ефективність і гарантує відтворюваність результатів дослідження.

Модуль Predict дає можливість прогнозувати гістерезисну поведінку сплавів з пам'яттю форми за межами навчального діапазону циклів навантаження, що є принципово важливим для аналізу еволюції гістерезисної поведінки. На відміну від етапу навчання та тестування, де моделі працюють у межах обмеженого інтервалу номерів циклів, у цьому модулі реалізовано режим екстраполяційного прогнозування, спрямований на прогнозування деформації матеріалу на пізніших стадіях циклічного навантаження. Такий підхід дає змогу дослідити накопичення залишкової деформації та зміну форми гістерезисних

петель SMA без необхідності проведення тривалих і ресурсомістких експериментальних випробувань. На вхід модуля Predict подають експериментальні дані для окремого циклу або набору циклів, які не входили до навчальної, валідаційної або тестової вибірки, у вигляді файлів формату CSV, а також попередньо навчені та збережені моделі машинного навчання. Вхідні дані містять ті самі ознаки, якими скористалися для навчання моделей, зокрема напруження, номер циклу, фазу навантаження та розвантаження, що забезпечує узгодженість структури даних і коректність прогнозування. Результатом роботи модуля Predict є файл прогнозованих значень деформації для заданого циклу або діапазону циклів, який зберігається у форматі CSV. У цьому файлі наведено як вхідні параметри, так і відповідні прогнозовані значення деформації, що дає можливість безпосередньо користуватися результатами для подальшого аналізу, інтерпретації та порівняння з експериментальними даними у випадку їх наявності. Збереження прогнозів у структурованому вигляді забезпечує відтворюваність результатів і спрощує інтеграцію модуля Predict з іншими компонентами програмної системи дослідження. Оцінку якості прогнозування в модулі здійснено на основі метрик MSE, MAE,  $R^2$ , MAPE.

Окрім формування числових прогнозів, у межах модуля Predict автоматично генеруються графічні представлення результатів, які відіграють важливу роль у якісній оцінці адекватності моделей (розділ 2.5). Зокрема, побудовано графіки узгодженості між експериментальними та прогнозованими значеннями деформації (реальні значення проти передбачених), що дають можливість візуально оцінити точність прогнозування. Також відтворено петлі гістерезису у координатах “напруження-деформація”, які є основною характеристикою поведінки SMA та які дають змогу порівняти форму та оцінити площу гістерезисної петлі для експериментальних і прогнозованих даних. Додатково проаналізовано залишки прогнозування шляхом побудови відповідних розподілів, що дає змогу оцінити статистичні властивості похибок і виявити можливі зони погіршення якості моделі на пізніших циклах навантаження.

Таким чином, модуль Predict забезпечує перехід від навчання моделей до їх практичного застосування в задачах прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми та створює основу для подальшої інтерпретації отриманих результатів у межах модулів пояснюваного штучного інтелекту та формування звітів.

Застосування складних нелінійних моделей машинного навчання в задачах матеріалознавства, зокрема для прогнозування гістерезисної поведінки SMA, може забезпечувати підвищення точності прогнозування, однак водночас знижує прозорість процесу формування прогнозу. Такі моделі часто функціонують як “чорні скриньки”, що ускладнює оцінювання фізичної узгодженості отриманих результатів. У цьому контексті інтерпретація прогнозів є необхідною умовою для коректного застосування машинного навчання в інженерних і наукових дослідженнях, оскільки дає змогу оцінити відповідність отриманих прогнозів фізичним уявленням про формування гістерезисної петлі, вплив фазових перетворень, накопичення функціональної втоми та зміну властивостей SMA під час циклічного навантаження. З цією метою у програмній системі дослідження побудовано окремий модуль Explain, призначений для застосування методів пояснюваного штучного інтелекту. У межах модуля Explain застосовано різні методи інтерпретації залежно від типу побудованої моделі прогнозування. Для ансамблевих регресійних моделей, таких як Voting і Stacking, а також для темпоральних згорткових нейронних мереж TCN, застосовано метод SHAP. Для рекурентних нейронних мереж, зокрема SimpleRNN, LSTM та GRU, застосовано методом IG. Результатом функціонування модуля Explain є багаторівнева інтерпретація прогнозів моделей машинного навчання. На глобальному рівні сформовано оцінки важливості вхідних ознак, які відображають середній вплив таких параметрів, як напруження, номер циклу, фаза навантаження або розвантаження на прогнозування деформації. Такі оцінки дають можливість встановити домінуючі чинники, що визначають поведінку SMA у різних режимах навантаження, і перевірити їх відповідність фізичним уявленням про процеси фазових перетворень. На локальному рівні модуль Explain забезпечує

побудову пояснень для конкретних моментів навантаження, що дає змогу аналізувати причини відхилень прогнозу, зміну ролі окремих ознак на пізніших циклах і особливості поведінки матеріалу в фазах навантаження та розвантаження.

Візуалізацію результатів інтерпретації здійснено у вигляді узагальнювальних діаграм важливості ознак, графіків залежностей між значеннями ознак та їхнім внеском у прогноз, а також локальних діаграм пояснення окремих прогнозів. Такі візуальні інструменти дають змогу наочно представити структуру формування прогнозу та спрощують аналіз складних моделей. Загалом модуль Explain сприяє встановленню прозорішого зв'язку між результатами машинного навчання та фізичною природою гістерезисної поведінки SMA, підвищує довіру до моделей і дає змогу оцінити межі їх узагальнення під час прогнозування на пізніших циклах навантаження-розвантаження.

Модуль Report призначено для автоматизації узагальнення результатів, отриманих на всіх етапах функціонування програмної системи дослідження, а також для підготовки вихідних матеріалів, придатних для використання в наукових публікаціях, дисертаційних роботах і технічних звітах. У межах цього модуля числові результати, навчені моделі, прогнози та матеріали інтерпретації інтегруються в єдину структуровану систему, що забезпечує логічну завершеність дослідження та спрощує подальший аналіз і представлення отриманих даних. Автоматизація формування звітів мінімізує ймовірність помилок ручної обробки та забезпечує відтворюваність результатів, що є особливо важливим у контексті багатоетапних обчислювальних експериментів. Усі результати роботи зберігаються в чітко визначеній ієрархічній структурі каталогів, сформованій за принципом функціонального розподілу. У відповідних підкаталогах розміщуються вихідні дані та підготовлені вибірки, навчені моделі машинного навчання, числові показники якості прогнозування, результати прогнозування для додаткових циклів навантаження-розвантаження, матеріали пояснюваного штучного інтелекту та графічні візуалізації. Така організація дає

змогу однозначно ідентифікувати результати для кожного режиму навантаження та частоти, забезпечує зручний доступ до необхідних артефактів і спрощує порівняльний аналіз між різними сценаріями. Застосування структурованого підходу до збереження результатів у межах модуля Report сприяє систематизації даних і створює основу для повторного використання отриманих матеріалів. Це дає змогу без додаткових обчислювальних витрат формувати узагальнені таблиці, ілюстрації та аналітичні висновки, а також адаптувати результати до вимог різних форматів представлення, зокрема наукових статей і технічної документації. У цілому модуль Report завершує робочий цикл програмної системи, забезпечуючи логічне поєднання етапів обробки даних, побудови моделей, прогнозування та інтерпретації в єдину цілісну систему результатів.

### **2.8.2. Використане програмне та апаратне забезпечення**

Усі етапи аналізу, прогнозування та інтерпретації результатів у межах даного дослідження реалізовано мовою програмування Python, яка є де-факто стандартом для задач аналізу даних та машинного навчання. Обчислювальні експерименти виконано із застосуванням перевірених і добре задокументованих програмних компонентів, що забезпечує відтворюваність отриманих результатів.

Для побудови та навчання моделей машинного навчання скористалися бібліотекою Scikit-learn (sklearn) [79], яка надає широкий набір реалізацій алгоритмів регресії та ансамблевого навчання. Крім того, дана бібліотека дає можливість організувати процедури крос-валідації та коректне розбиття даних за груповим принципом методами GroupShuffleSplit та GroupKFold.

Реалізацію моделей глибокого навчання здійснено з використанням фреймворку TensorFlow у поєднанні з високорівневим інтерфейсом Keras [80]. Зазначений програмний стек дає можливість побудувати та навчити рекурентні нейронні мережі типу SimpleRNN, LSTM та GRU, а також темпоральні згорткові нейронні мережі TCN. Обчислення виконано з підтримкою апаратного

прискорення (GPU), що значно скорочувало час тренування моделей на великих масивах експериментальних даних.

Підготовку та попередню обробку експериментальних даних здійснено з використанням бібліотек NumPy [81] та Pandas [82]. Бібліотеку NumPy застосовано для виконання чисельних операцій, роботи з багатовимірними масивами та проведення обчислень. Бібліотеку Pandas використано для зчитування даних із CSV-файлів, формування табличних структур даних (DataFrame), фільтрування, агрегування, нормалізації даних, а також формування навчальних і тестових вибірок. Комбінація NumPy та Pandas забезпечила ефективну й надійну обробку експериментальних даних.

Для графічного представлення результатів аналізу та прогнозування скористалися бібліотеками Matplotlib [83] та Seaborn [84]. За їх допомогою побудовано гістограми розподілу даних, діаграми розсіювання, графіки залишків, криві навчання, а також петлі гістерезису.

Інтерпретацію результатів машинного навчання виконано із застосуванням бібліотеки SHAP [73]. Для інтерпретації прогнозів рекурентних нейронних мереж (SimpleRNN, LSTM та GRU) у даній роботі застосовано метод Integrated Gradients, який реалізовано програмно з використанням механізму автоматичного диференціювання tf.GradientTape [85]. Інтегральні градієнти обчислено шляхом дискретної апроксимації інтеграла вздовж траєкторії від базового вхідного стану (baseline), заданого нульовим тензором, до фактичної вхідної послідовності. Для цього сформовано набір інтерпольованих вхідних даних із використанням рівномірної сітки коефіцієнтів масштабування в інтервалі  $[0; 1]$ , після чого для кожної точки траєкторії обчислено градієнт виходу моделі відносно вхідних ознак. Вихід нейронної мережі агрегували обчисленням суми прогнозованих значень по часових кроках, що дало можливість отримати узгоджену оцінку внеску кожної ознаки у загальний прогноз часової послідовності. Остаточні значення Integrated Gradients визначено як добуток різниці між вхідним тензором і baseline та середнього градієнта вздовж траєкторії інтегрування, після чого результати агреговано у

часовому вимірі та ними користувалися для локального й глобального аналізу важливості вхідних параметрів.

За допомогою бібліотеки `joblib` [86] зберігали всі моделі, реалізовані на основі бібліотеки `Scikit-learn`, включно з базовими регресійними алгоритмами, ансамблевими моделями типу `Voting` і `Stacking`, а також повними обчислювальними пайплайнами попередньої обробки даних. Моделі глибокого навчання, реалізовані у фреймворку `TensorFlow/Keras`, зберігали із застосуванням вбудованих засобів `Keras`.

Усі застосовані програмні бібліотеки є відкритими та ними широко користуються у сучасних дослідженнях із машинного навчання.

Експериментальні дослідження виконано на високопродуктивній обчислювальній платформі, розгорнутій під керуванням операційної системи `Linux`. Операційна система `Linux` забезпечує ефективне керування багатоядерними ресурсами, оптимальну роботу з `NVMe`-накопичувачами та повноцінну підтримку `GPU`-прискорення. Обчислювальне ядро системи базується на процесорі `Intel Core i7-14700KF`, який належить до покоління `Raptor Lake Refresh` і реалізує гібридну архітектуру з поділом на продуктивні та енергоефективні ядра. Процесор містить 20 фізичних ядер (8 продуктивних та 12 енергоефективних), що дає можливість виконувати до 28 потоків одночасно. Така конфігурація забезпечує високу ефективність багатопотокових обчислень, що є важливим для чисельного моделювання, навчання моделей машинного навчання та аналізу великих експериментальних масивів даних. Відсутність інтегрованого графічного ядра компенсовано застосуванням окремого графічного прискорювача. Для апаратного прискорення обчислень та паралельної обробки даних скористалися відеокартою `MSI GeForce RTX 4070 SUPER 12G VENTUS 3X OC`, побудованій на архітектурі `NVIDIA Ada Lovelace`. Графічний процесор оснащено 12 ГБ відеопам'яті типу `GDDR6X` з підтримкою сучасні технології паралельних обчислень, зокрема `CUDA`, `Tensor Cores` та `RT Cores`. Під керуванням `Linux` із драйверами `NVIDIA` відеокарта забезпечує ефективне виконання задач глибокого навчання. Зберігання операційної

системи, програмного забезпечення та експериментальних даних реалізовано на твердотільному накопичувачі Samsung 990 Pro NVMe об'ємом 1 ТБ, виконаному у форм-факторі M.2 2280. Накопичувач підключено через інтерфейс PCIe 4.0 ×4 із застосуванням протоколу NVMe 2.0, що забезпечує швидкість послідовного читання до 7450 МБ/с та запис до 6900 МБ/с. Така пропускна здатність мінімізує затримки доступу до даних і забезпечує високу продуктивність під час роботи з великими масивами даних, журналами експериментів та проміжними результатами моделювання.

## 2.9. Висновки до розділу 2

У другому розділі наведено опис експериментальної бази дослідження, розглянуто методи обробки та аналізу даних, обґрунтовано вибір моделей машинного навчання, а також представлено структура програмної системи їх побудови, оцінювання та інтерпретації в задачі прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми. За результатами проведеного дослідження можна сформулювати такі висновки:

- Сформовано набір даних. Описано умови вимірювань, а також структуру даних і розподіл кількості замірів за частотами, що забезпечує відтворюваність формування набору даних.

- Представлено методи виявлення потенційних аномалій в експериментальних даних за змінними Stress і Strain, зокрема глобальне правило  $\pm 3\sigma$ , критерій міжквартильного розмаху IQR та локальний rolling z-score у ковзному вікні. Застосування цих методів дає змогу оцінити статистичну однорідність даних і виявити можливі нетипові значення, здатні впливати на якість подальшого навчання моделей.

- Представлено коректну стратегію розбиття даних і валідації моделей машинного навчання з урахуванням циклічної природи експериментальних даних. Застосування GroupShuffleSplit і GroupKFold із групуванням за номером циклу навантаження-розвантаження забезпечило відсутність витoku інформації

між вибірками, а формування OOF-прогнозів у межах групової крос-валідації дало змогу отримати статистично обґрунтовані оцінки узагальнювальної здатності моделей.

– Запропоновано математичну модель задачі прогнозування, у якому номер циклу  $N$  розглядали як незалежну вхідну змінну. Це дало можливість чітко відокремити прогнозування в межах діапазону навчальних даних (у межах  $N \in [N_{min}, N_{max}]$ ) від екстраполяційного прогнозування для  $N > N_{max}$  і визначити математичну модель, спільну для різних класів ML моделей.

– Обґрунтовано вибір моделей машинного навчання для прогнозування деформації сплавів з пам'яттю форми, зокрема ансамблевих регресійних моделей VotingRegressor і StackingRegressor, а також моделей глибокого навчання для обробки послідовних даних: SimpleRNN, LSTM, GRU та TCN.

– Представлено методи оцінювання якості прогнозування на основі метрик MAE, MSE,  $R^2$  та MAPE, а також набору візуалізацій (реальні значення деформації проти передбачених, графіки залишків, гістерезисні петлі), що забезпечує комплексний числовий і якісний аналіз точності та узгодженості прогнозів з експериментом.

– Представлено методи пояснюваного штучного інтелекту для інтерпретації прогнозів моделей машинного навчання, зокрема SHAP для ансамблевих моделей і TCN та Integrated Gradients для рекурентних нейронних мереж SimpleRNN, LSTM і GRU.

– Розроблено модульну структуру програмної системи дослідження у вигляді обчислювального конвеєра (EDA → Dataset → ML models → Predict → Explain → Report), що забезпечує відтворюваність, масштабованість і автоматизацію основних етапів побудови, оцінювання та інтерпретації моделей машинного навчання для подальшого застосування одержаних результатів у наукових і прикладних задачах.

– Описано програмну систему та апаратне забезпечення дослідження, що охоплює використані мови програмування, бібліотеки машинного навчання, засоби обробки даних, інтерпретації результатів і графічної візуалізації, а також

характеристики обчислювальної платформи. Це забезпечує відтворюваність обчислювальних експериментів.

Отже, у другому розділі сформовано цілісну методологічну основу дослідження, що охоплює підготовку експериментальних даних, побудову, оцінювання та інтерпретацію моделей машинного навчання для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми.

## РОЗДІЛ 3. ПОБУДОВА ТА ОЦІНЮВАННЯ ТОЧНОСТІ МОДЕЛЕЙ МАШИННОГО НАВЧАННЯ

Методи машинного навчання дають змогу будувати моделі прогнозування на основі експериментальних даних без необхідності явного задання складних математичних залежностей між напруженням, деформацією, номером циклу та фазою навантаження-розвантаження. У розділі представлено результати побудови, навчання та оцінювання моделей машинного навчання для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми. Представлено результати попереднього аналізу експериментальних даних і перевірки їх придатності до подальшого моделювання. Далі розроблено ансамблеві моделі VotingRegressor і StackingRegressor, рекурентні нейронні мережі SimpleRNN, LSTM, GRU, а також темпоральну згорткову мережу TCN. Для кожної моделі наведено особливості налаштування гіперпараметрів, архітектуру, результати кількісного оцінювання за метриками MSE, MAE, MAPE та  $R^2$ , а також графічний аналіз узгодженості прогнозованих і експериментальних значень деформації. Проведено порівняльний аналіз точності побудованих моделей у межах тестового діапазону циклів навантаження. Це дало змогу оцінити переваги та обмеження ансамблевих, рекурентних і згорткових моделей для задачі прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми.

### 3.1. Аналіз результатів попередньої обробки даних

Аналіз результатів попередньої обробки даних є необхідним етапом перед побудовою моделей машинного навчання, оскільки якість вхідного набору даних безпосередньо впливає на точність та узагальнювальну здатність моделей машинного навчання. Наявність аномальних або помилкових значень у змінних напруження та деформації може спричинити спотворення параметрів моделі, погіршення якості прогнозування та некоректну інтерпретацію результатів. Тому перевірка розподілів експериментальних даних дає змогу виявити

потенційні аномальні значення, оцінити однорідність вибірки та переконатися, що подальше навчання моделей здійснюється на репрезентативних даних.

Для візуального аналізу результатів  $k$ -sigma-тесту побудовано гістограми розподілу напруження та деформації (рис. 3.1-3.7). Така візуалізація дала змогу візуально оцінити, чи є значення, що виходять за статистично допустимий інтервал, а також форму емпіричного розподілу, що доповнило результати, зафіксовані у звіті.

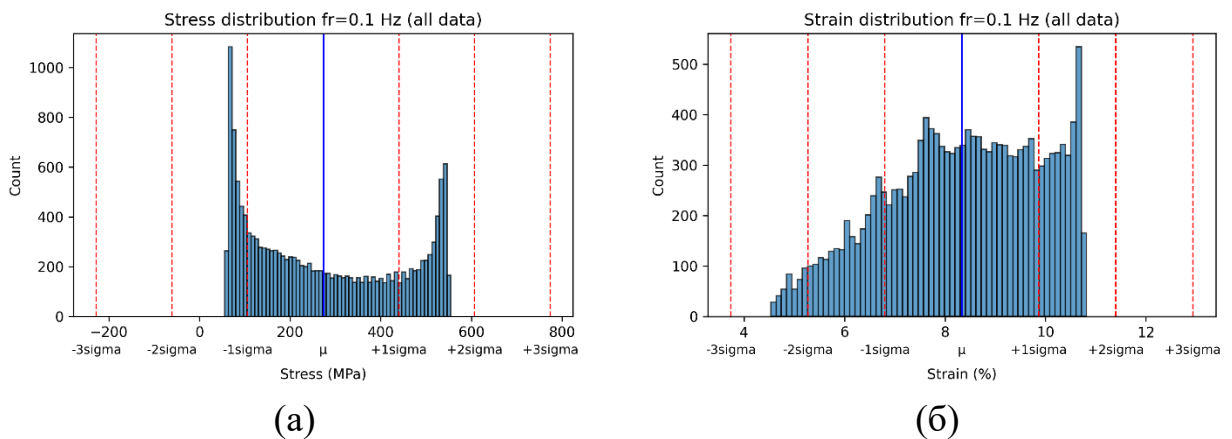


Рис. 3.1. Статистичні розподіли напруження (а) та деформації (б) для 100–250 циклів навантаження за частоти 0,1 Гц.

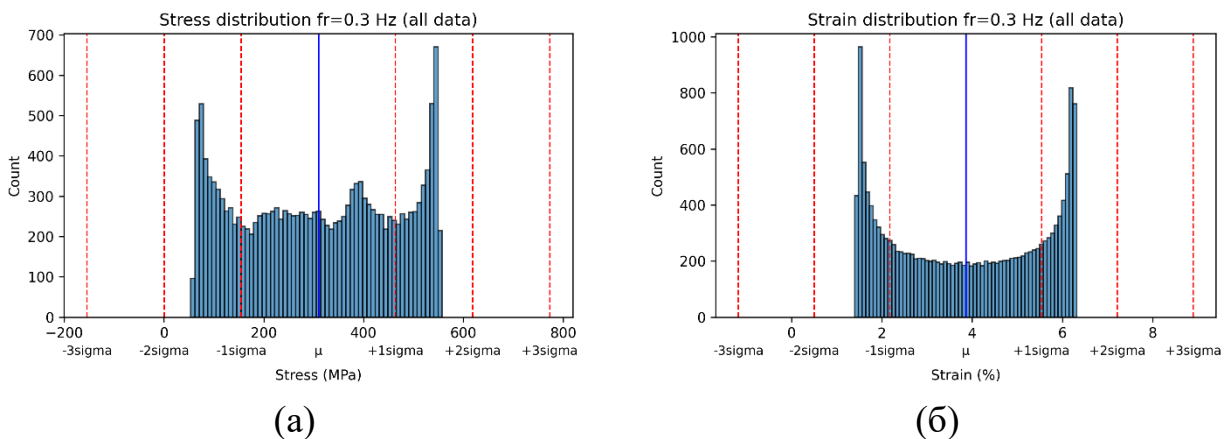
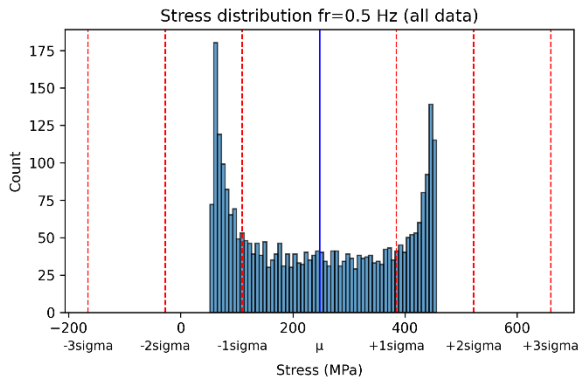
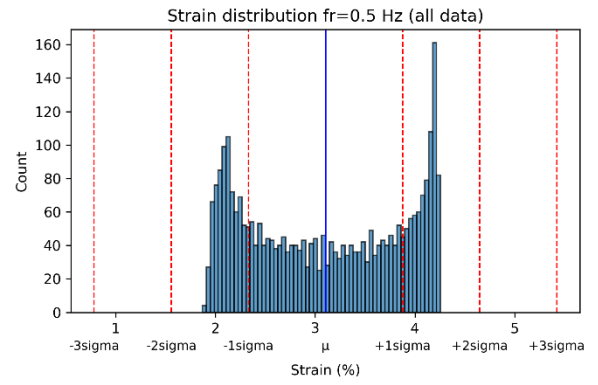


Рис. 3.2. Статистичні розподіли напруження (а) та деформації (б) для 100–250 циклів навантаження за частоти 0,3 Гц.

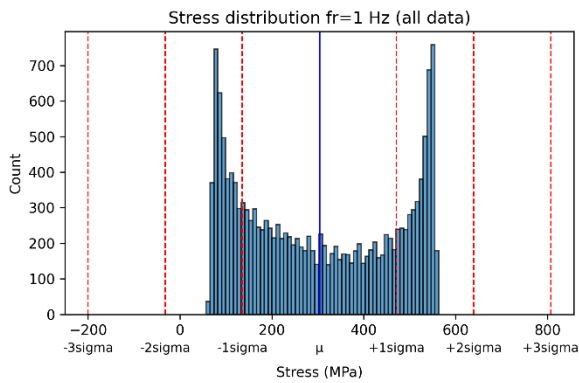


(a)

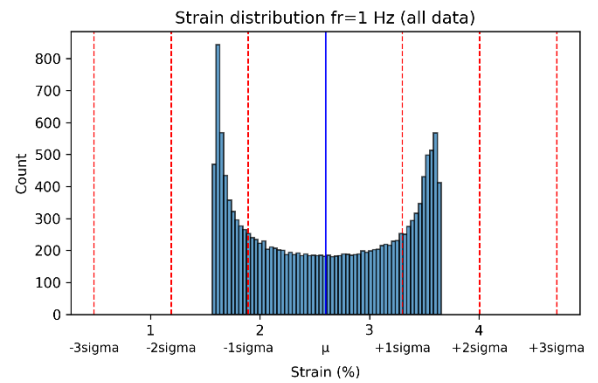


(б)

Рис. 3.3. Статистичні розподіли напруження (а) та деформації (б) для 100–250 циклів навантаження за частоти 0,5 Гц.

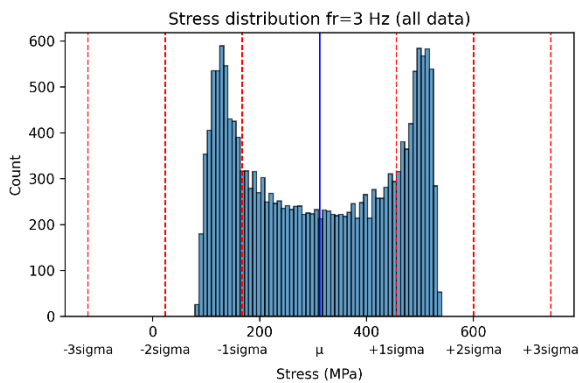


(a)

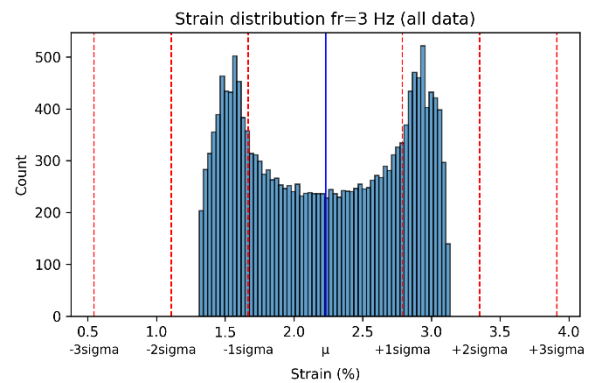


(б)

Рис. 3.4. Статистичні розподіли напруження (а) та деформації (б) для 100–250 циклів навантаження за частоти 1 Гц.



(a)



(б)

Рис. 3.5. Статистичні розподіли напруження (а) та деформації (б) для 100–250 циклів навантаження за частоти 3 Гц.

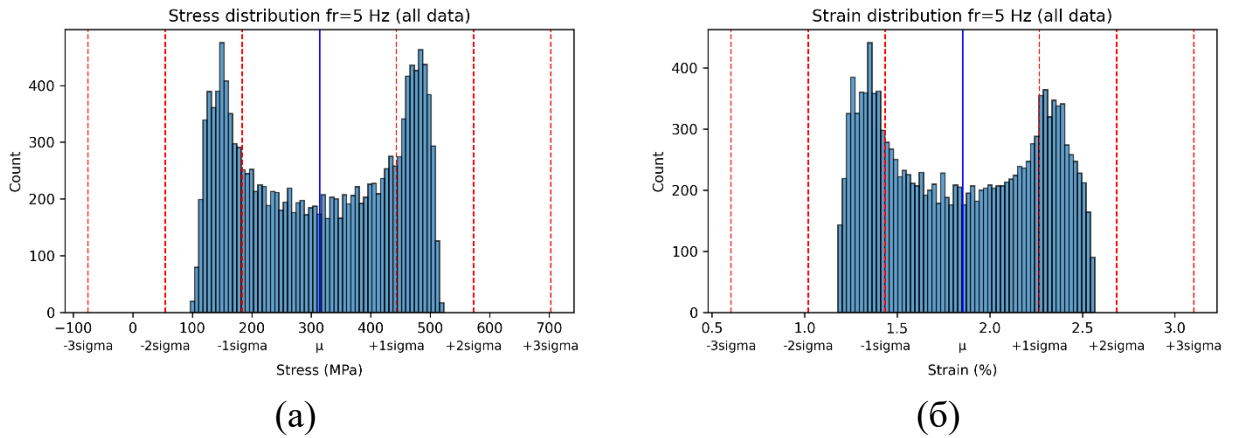


Рис. 3.6. Статистичні розподіли напруження (а) та деформації (б) для 100–250 циклів навантаження за частоти 5 Гц.

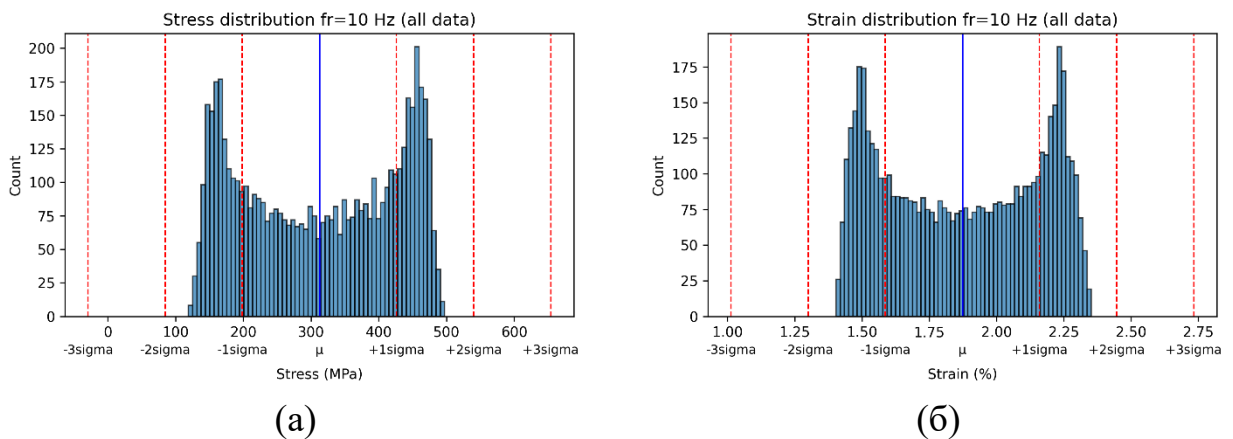


Рис. 3.7. Статистичні розподіли напруження (а) та деформації (б) для 100–250 циклів навантаження за частоти 10 Гц.

Отримані гістограми розподілу напруження та деформації свідчать про істотну ненормальність статистичних розподілів, що є характерним для циклічної гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми. У всіх випадках спостерігається виражена двомодальна або U-подібна форма розподілу, яка відповідає фазам навантаження та розвантаження в межах гістерезисної петлі. Лінії  $\pm\sigma$ ,  $\pm 2\sigma$  та  $\pm 3\sigma$  показують, що значна частина даних систематично концентрується поблизу крайніх значень. Середнє значення  $\mu$  розташоване між двома модальними областями розподілу та не відповідає найбільш імовірним станам системи, що свідчить про багатомодальний характер даних і відображає циклічну гістерезисну поведінку матеріалу. Це підтверджує,

що правило  $\pm 3\sigma$  доцільно розглядати лише як індикативний критерій виявлення грубих аномалій, які за результатами тесту не виявлено, а не як строгий статистичний тест. Зі зростанням частоти навантаження спостерігається зменшення діапазону деформацій та зростання концентрації значень поблизу граничних рівнів, що відображає зміну кінетики фазових перетворень. Отримані результати підтверджують доцільність застосування статистичних методів аналізу даних, стійких до асиметрії та багатомодальності розподілу, зокрема глобального одномірного критерію на основі міжквартильного розмаху IQR та локального правила rolling z-score у ковзному вікні.

Діаграми розмаху напруження та деформації у фазах навантаження та розвантаження, побудовані на основі міжквартильного розмаху IQR, показано на рисунках 3.8–3.14.

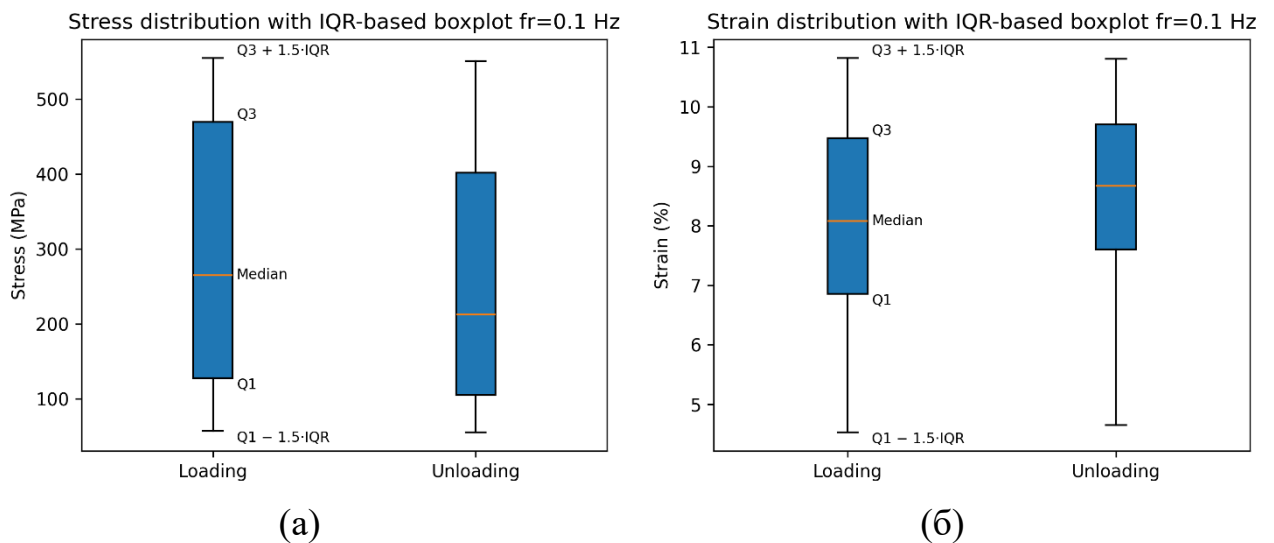


Рис. 3.8. Діаграми розмаху напруження (а) та деформації (б) у фазах навантаження та розвантаження за частоти 0,1 Гц, побудовані на основі IQR

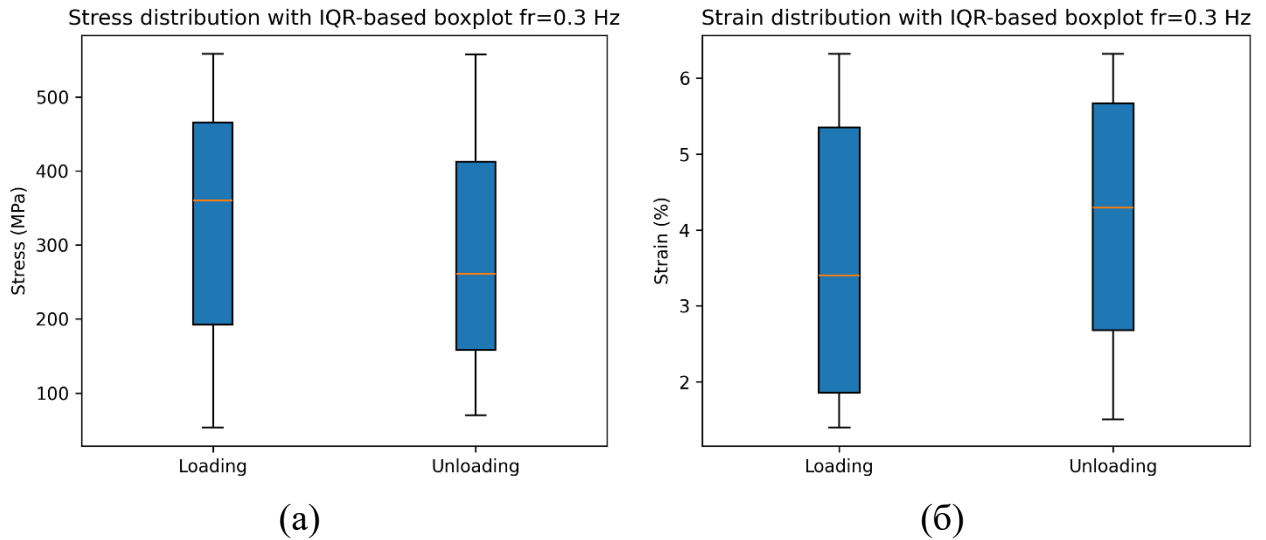


Рис. 3.9. Діаграми розмаху напруження (а) та деформації (б) у фазах навантаження та розвантаження за частоти 0,3 Гц, побудовані на основі IQR

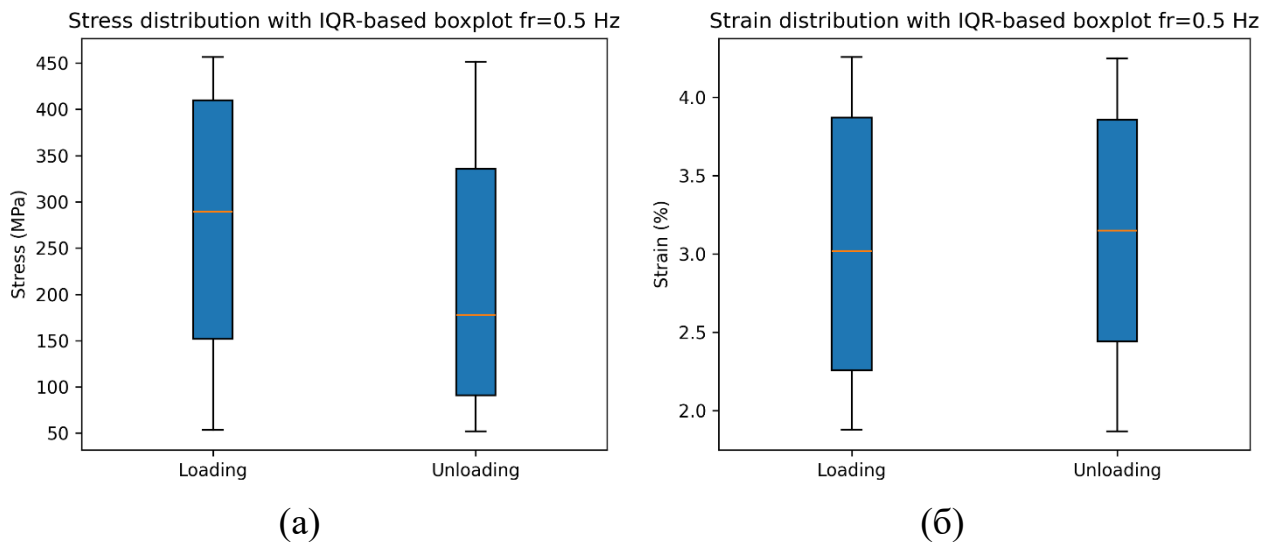


Рис. 3.10. Діаграми розмаху напруження (а) та деформації (б) у фазах навантаження та розвантаження за частоти 0,5 Гц, побудовані на основі IQR

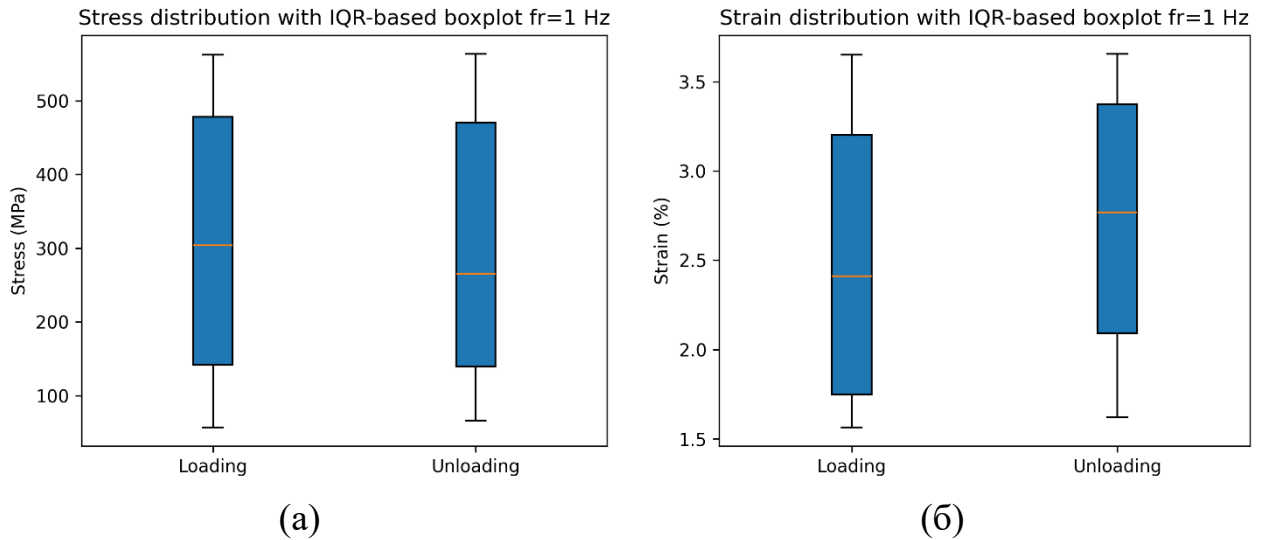


Рис. 3.11. Діаграми розмаху напруження (а) та деформації (б) у фазах навантаження та розвантаження за частоти 1 Гц, побудовані на основі IQR

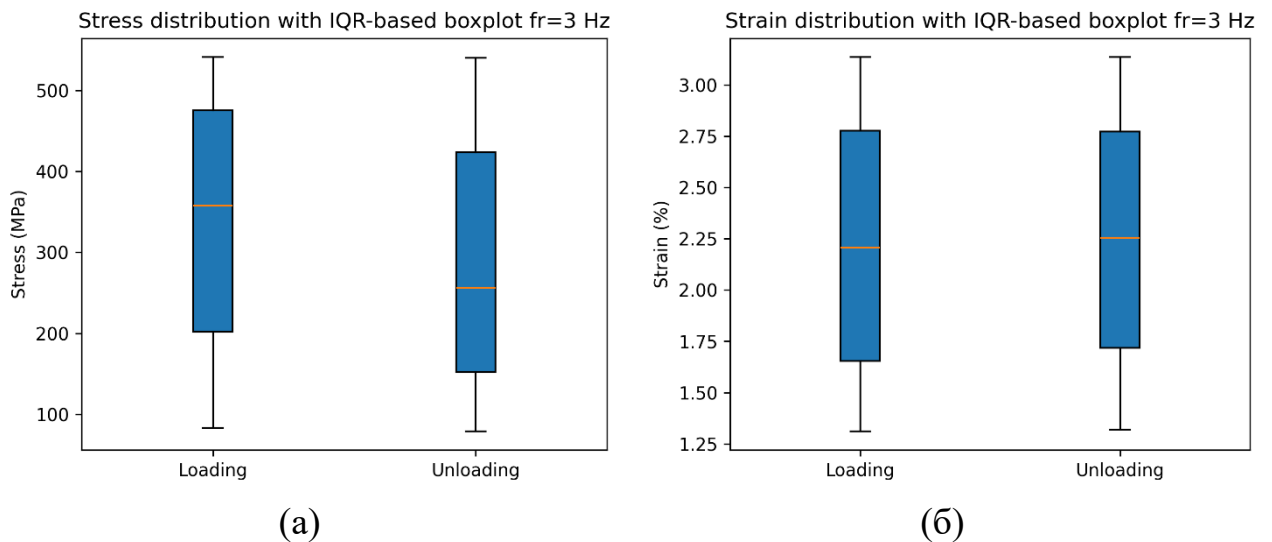


Рис. 3.12. Діаграми розмаху напруження (а) та деформації (б) у фазах навантаження та розвантаження за частоти 3 Гц, побудовані на основі IQR

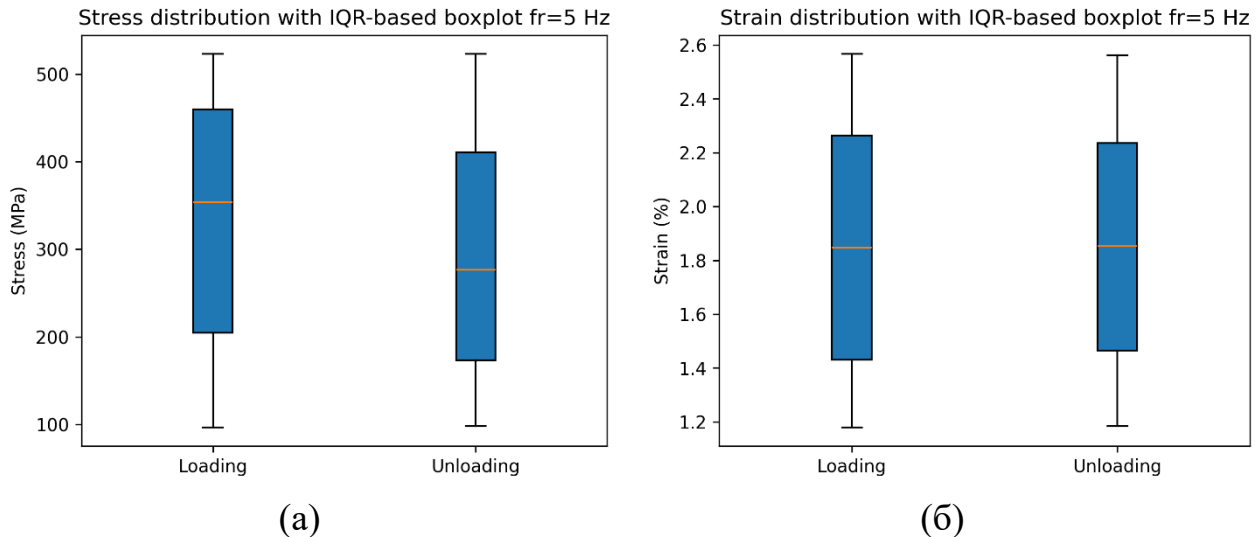


Рис. 3.13. Діаграми розмаху напруження (а) та деформації (б) у фазах навантаження та розвантаження за частоти 5 Гц, побудовані на основі IQR

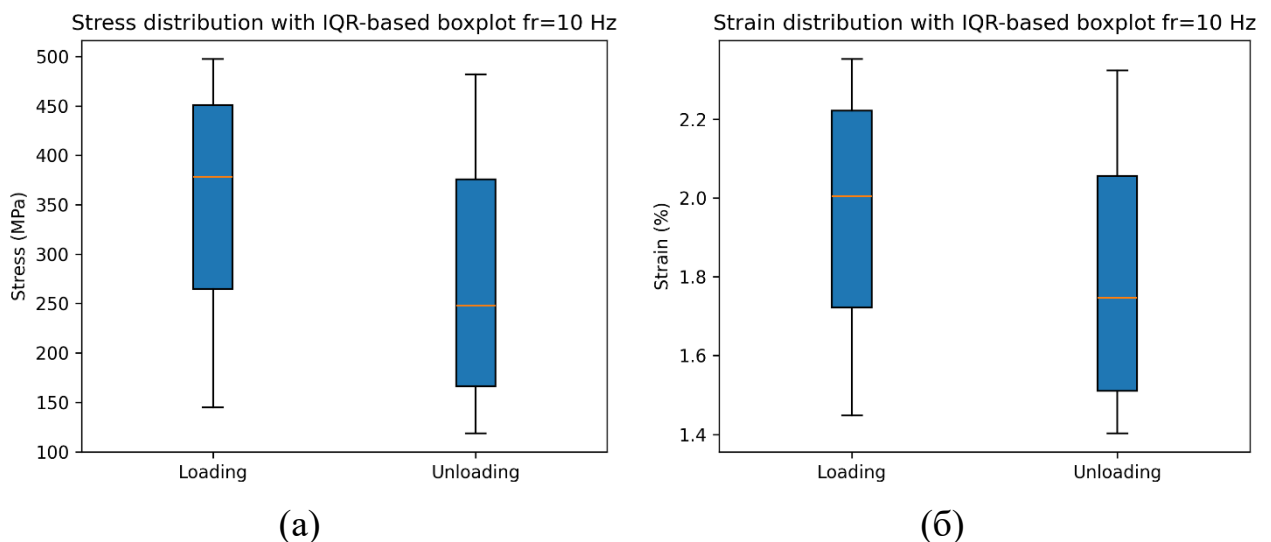


Рис. 3.14. Діаграми розмаху напруження (а) та деформації (б) у фазах навантаження та розвантаження за частоти 10 Гц, побудовані на основі IQR

Аналіз розподілу напруження та деформації на основі IQR показав відсутність кватильних викидів, оскільки всі значення знаходяться в межах допустимого інтервалу.

Для узагальненої оцінки локальних відхилень у даних напруження та деформації було проаналізовано розподіл локального  $z$ -показника  $Z_{local}$ , поданий у вигляді гістограми (рис. 3.15–3.21).

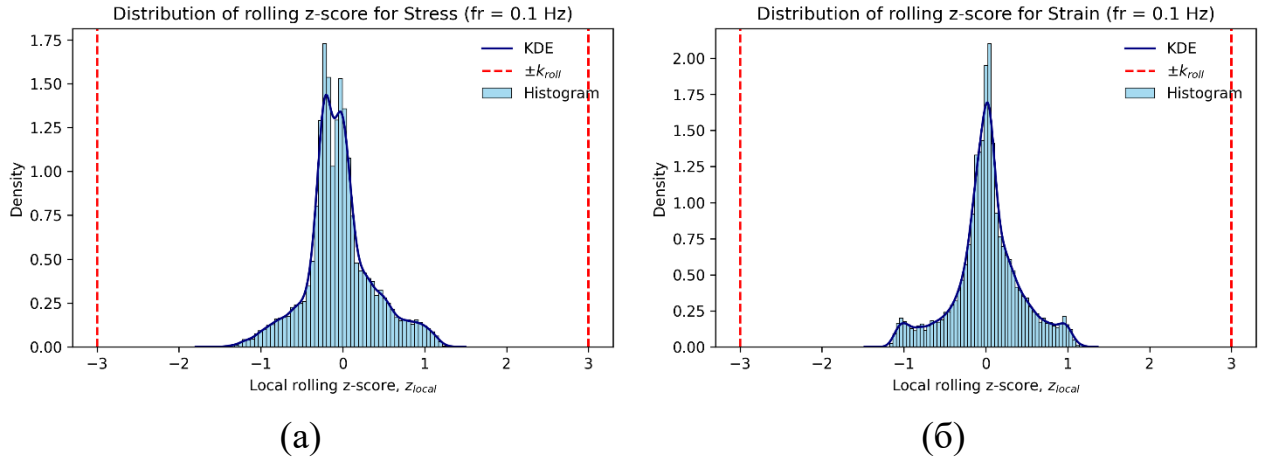


Рис. 3.15. Розподіли локального ковзного z-показника  $Z_{local}$  для напруження (а) та деформації (б) за частоти навантаження 0,1 Гц

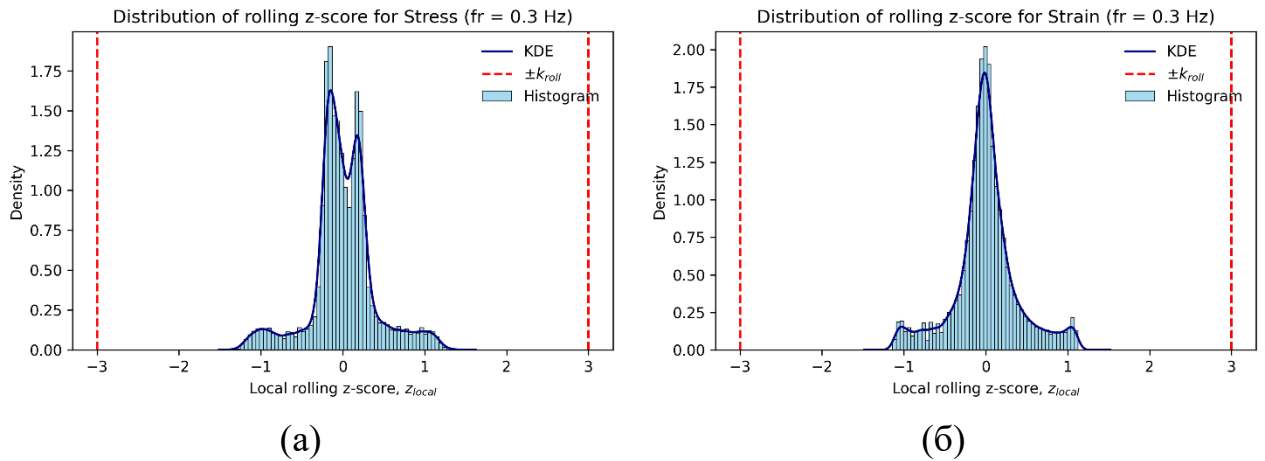


Рис. 3.16. Розподіли локального ковзного z-показника  $Z_{local}$  для напруження (а) та деформації (б) за частоти навантаження 0,3 Гц

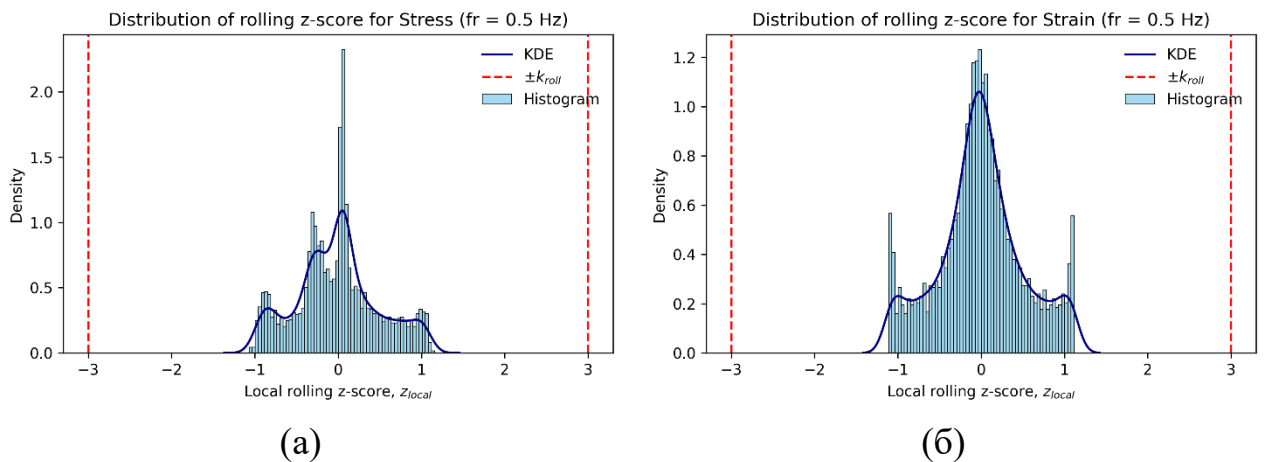


Рис. 3.17. Розподіли локального ковзного z-показника  $Z_{local}$  для напруження (а) та деформації (б) за частоти навантаження 0,5 Гц

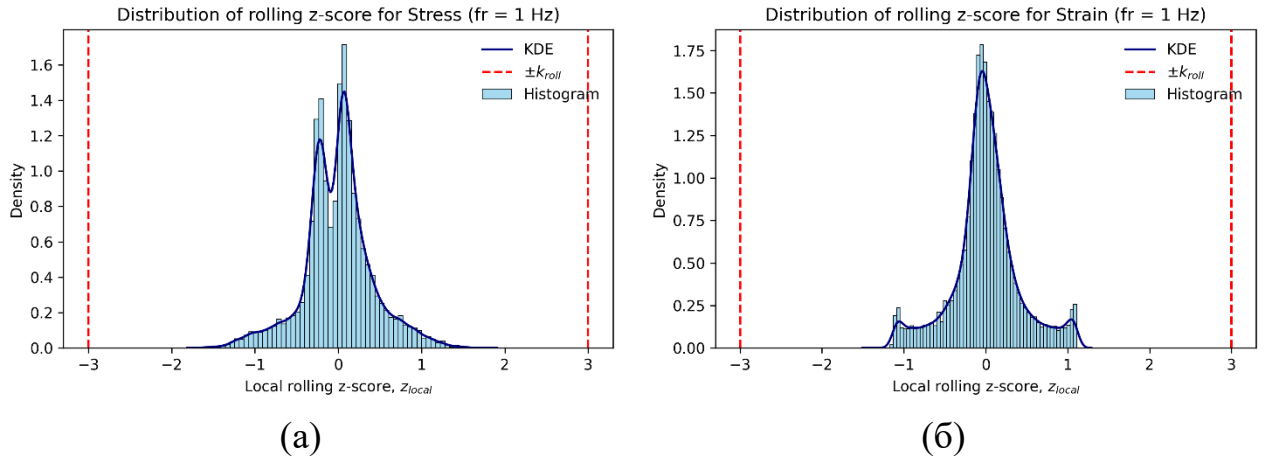


Рис. 3.18. Розподіли локального ковзного z-показника  $Z_{local}$  для напруження (а) та деформації (б) за частоти навантаження 1 Гц

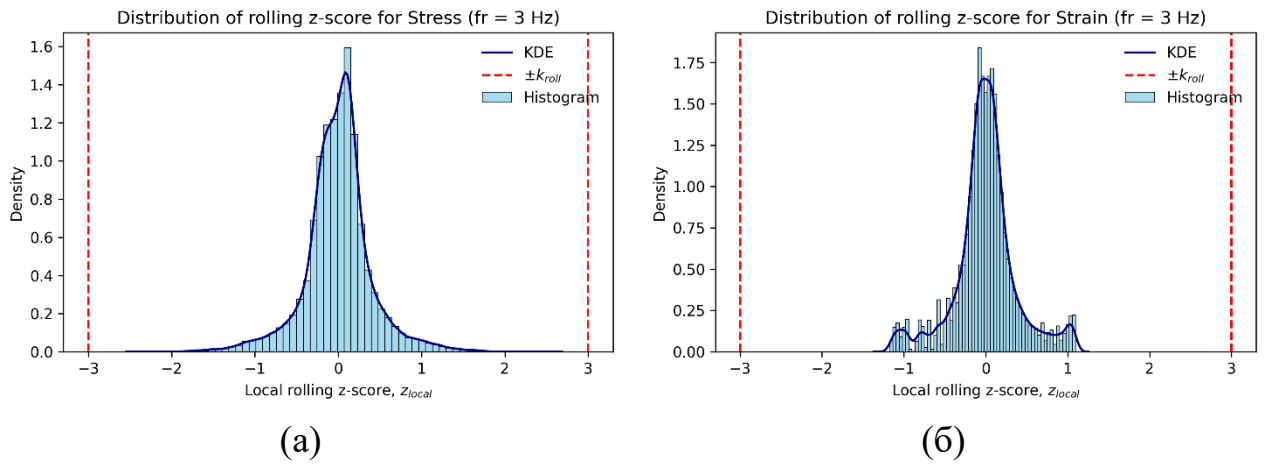


Рис. 3.19. Розподіли локального ковзного z-показника  $Z_{local}$  для напруження (а) та деформації (б) за частоти навантаження 3 Гц

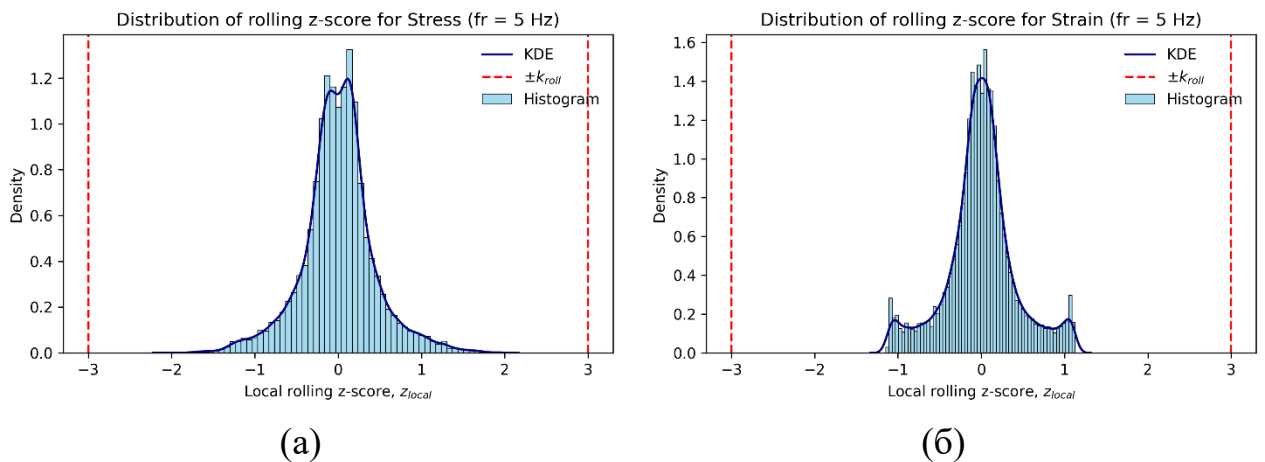


Рис. 3.20. Розподіли локального ковзного z-показника  $Z_{local}$  для напруження (а) та деформації (б) за частоти навантаження 5 Гц

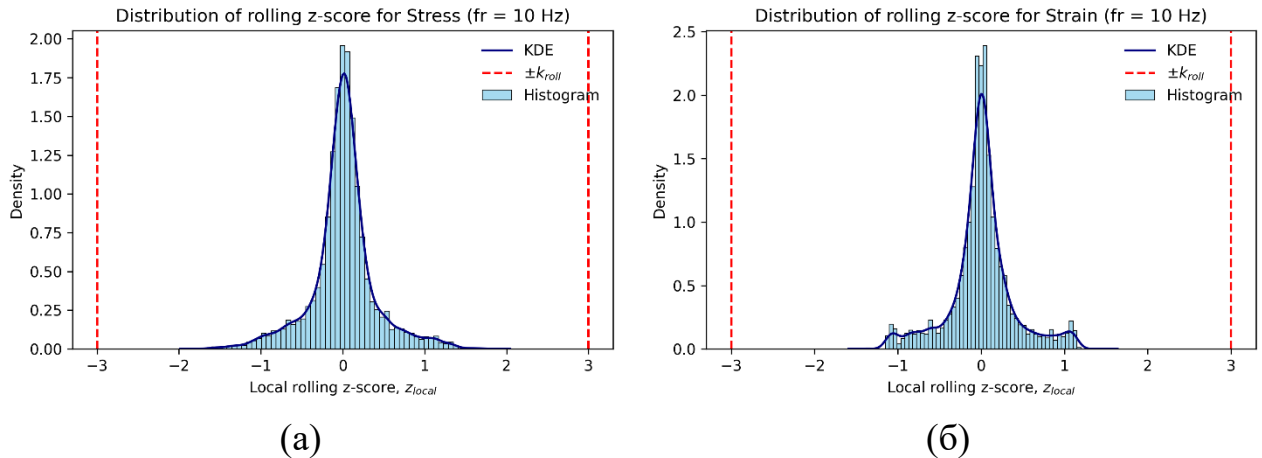


Рис. 3.21. Розподіли локального ковзного z-показника  $z_{local}$  для напруження (а) та деформації (б) за частоти навантаження 10 Гц

Отримані розподіли  $z$ -показника  $z_{local}$  для напруження і деформації при різних частотах навантаження свідчать про те, що значень  $z_{local}$  лежить у межах порогів  $\pm k_{roll}$ . Таким чином, досліджувані експериментальні дані можна вважати статистично однорідними у локальному сенсі, що є важливою умовою для коректного застосування методів ML.

## 3.2. Результати дослідження ансамблевої моделі VotingRegressor

### 3.2.1. Налаштування гіперпараметрів базових моделей

Усі базові моделі ансамблю VotingRegressor попередньо оптимізовано та налаштовано з урахуванням фізичної природи задачі прогнозування деформації SMA. Основну увагу звернуто на забезпечення точного відтворення гістерезисної поведінки матеріалу в умовах циклічного навантаження, а також на зменшення ризику перенаванчання. Зі зростанням частоти циклічного навантаження змінюється характер залежності між напруженням і деформацією. Зменшується роль накопичувальних (еволюційних) ефектів. Налаштування гіперпараметрів виконували окремо для кожної частоти із застосуванням методу

GridSearchCV. У межах GridSearchCV для кожної базової моделі задавали дискретний простір гіперпараметрів, після чого проводили перебір комбінацій із п'ятикратною перехресною перевіркою (GroupKFold) та вибором конфігурації, що забезпечувала мінімальну похибку MSE [56]. В таблиці 3.1 наведено основні гіперпараметри.

Таблиця 3.1.

Гіперпараметри базових моделей ансамблю VotingRegressor для різних частот навантаження

Модель	Гіперпараметр	Частота, Гц						
		0,1	0,3	0,5	1	3	5	10
<b>RF</b>	n_estimators	300	300	300	300	350	350	400
	max_depth	25	25	22	20	18	18	15
	min_samples_split	2	2	2	2	3	3	4
	min_samples_leaf	1	1	1	1	2	2	3
	bootstrap	True						
	criterion	squared_error						
<b>GBR</b>	n_estimators	300	300	300	300	350	400	450
	learning_rate	0,1	0,1	0,07	0,05	0,05	0,05	0,05
	max_depth	6	6	6	5	5	4	3
	subsample	1	1	1	1	0,9	0,9	0,8
	loss	squared_error						
<b>ET</b>	n_estimators	250	250	300	300	350	350	400
	max_depth	25	25	22	20	18	15	15
	bootstrap	False						
	criterion	squared_error						
<b>SVR</b>	kernel	rbf						
	C	20	20	15	15	10	10	8
	epsilon	0,1	0,1	0,1	0,08	0,05	0,05	0,03
	gamma	scale						
<b>kNN</b>	n_neighbors	5	5	5	7	9	9	9
	weights	uniform			distance			
	metric	minkowski (p=2)						
<b>MLP</b>	hidden_layer_sizes	128-64-32	128-64-32	128-64-32	128-64	64-32	64-32	32-16
	activation	relu						
	solver	adam						
	learning_rate	adaptive, init= 0.001						
	max_iter	2000	2000	2000	1800	1500	1200	1000
	early_stopping	True, patience=25						

Для базових моделей SVR, kNN та MLP, які є чутливими до масштабу вхідних ознак, для всіх досліджуваних частот циклічного навантаження застосовано єдиний метод попереднього масштабування даних – StandardScaler. StandardScaler не нормалізує дані до заданого інтервалу, а стандартизує їх, забезпечуючи нульове середнє значення та одиничне стандартне відхилення.

За результатами автоматизованого пошуку гіперпараметрів із застосуванням GridSearchCV для вищих частот циклічного навантаження, як правило, обирали менш глибокі дерева рішень для ансамблевих моделей, що відображало зменшення складності моделей. Для бустингових алгоритмів спостерігалось поєднання обмеження глибини слабких дерев із помірним зменшенням швидкості навчання, а також застосування часткового субсемплінгу, що сприяло стабілізації навчання. Для MLP характерним стало спрощення архітектури (зменшення кількості шарів і нейронів) та скорочення кількості ітерацій навчання.

Такий автоматизований підбір гіперпараметрів дав можливість узгодити складність базових моделей із динамікою процесу за різних частот навантаження, забезпечити стабільність прогнозування та знизити ризик перенавчання при переході до більш динамічних режимів деформації.

### **3.2.2. Аналіз вагових коефіцієнтів базових моделей**

Вагові коефіцієнти базових моделей ансамблю VotingRegressor визначали на основі результатів групової крос-валідації з використанням алгоритму GroupKFold. Для кожної базової моделі обчислювали середнє значення квадратичної похибки прогнозування на валідаційних підвибірках, після чого ваги визначали як величини, обернено пропорційні до відповідних значень середньої похибки ( $1/\text{mean}(\text{MSE})$ ) [56] (розділ 2.5.1). Такий підхід забезпечив більший внесок у підсумковий прогноз моделей із вищою точністю.

На рис. 3.22–3.25 наведено розподіли вагових коефіцієнтів базових моделей для різних частот циклічного навантаження. Аналіз отриманих

результатів свідчить, що внесок окремих алгоритмів істотно залежить від частоти навантаження, що відображає зміну характеру гістерезисної поведінки SMA.

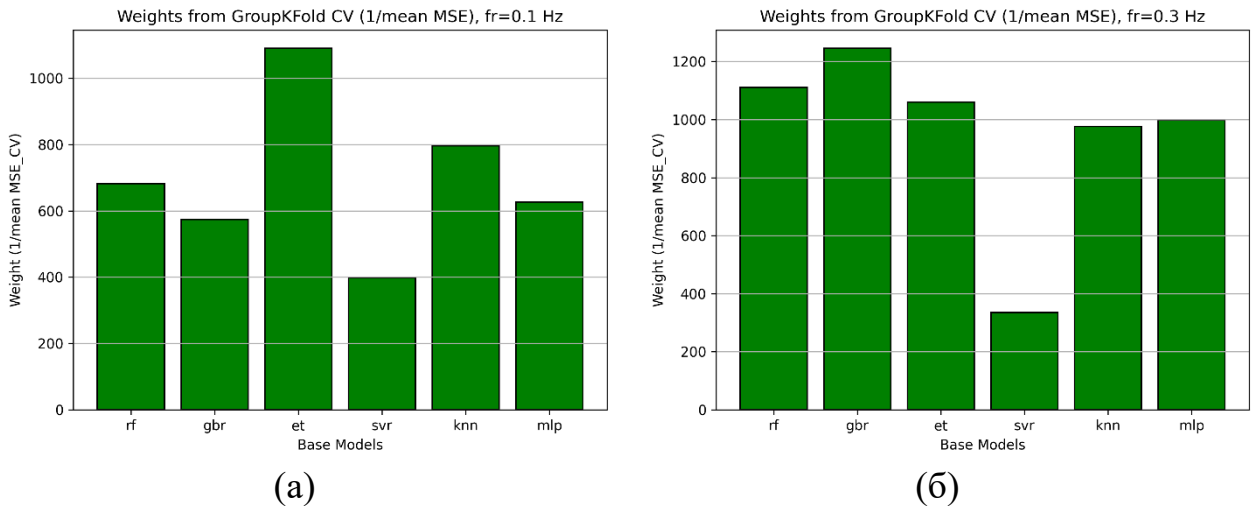


Рис. 3.22. Розподіл вагових коефіцієнтів базових моделей ансамблю Voting Regressor для циклічного навантаження з частотою 0,1 Гц (а) та 0,3 Гц (б)

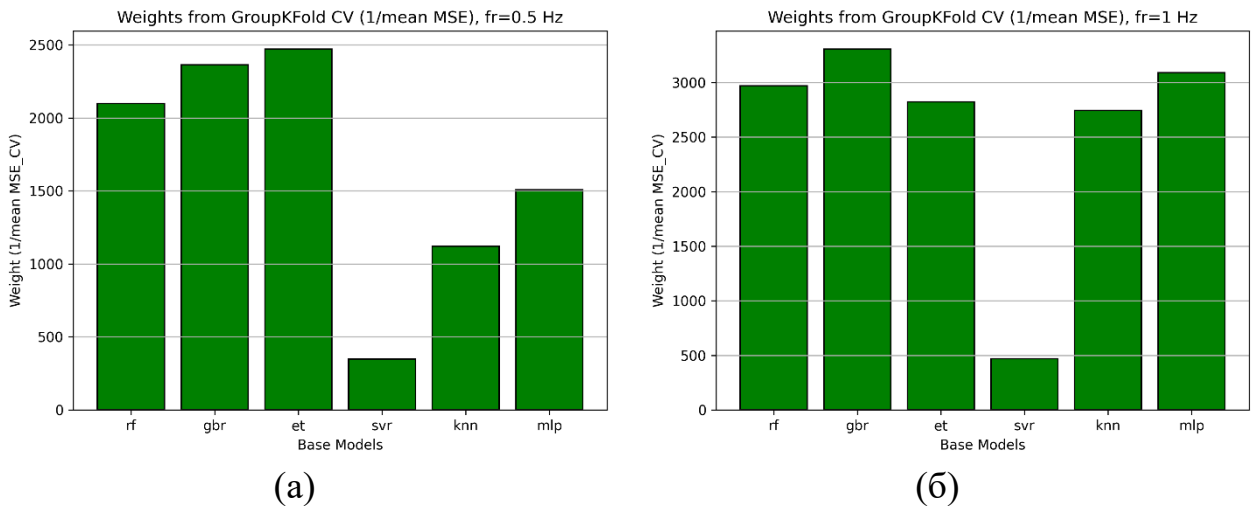


Рис. 3.23. Розподіл вагових коефіцієнтів базових моделей ансамблю Voting Regressor для циклічного навантаження з частотою 0,5 Гц (а) та 1 Гц (б)

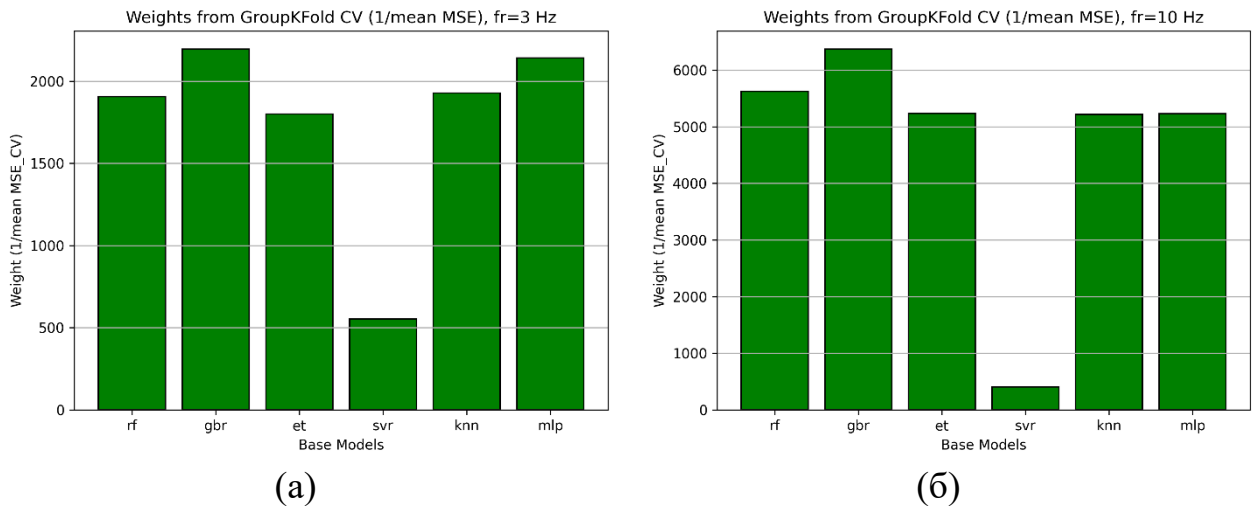


Рис. 3.24. Розподіл вагових коефіцієнтів базових моделей ансамблю Voting Regressor для циклічного навантаження з частотою 3 Гц (а) та 5 Гц (б)

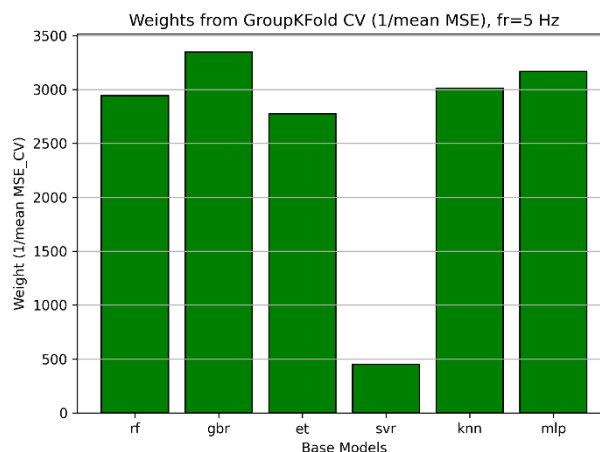


Рис. 3.25. Розподіл вагових коефіцієнтів базових моделей ансамблю Voting Regressor для циклічного навантаження з частотою 10 Гц

Таким чином, отриманий розподіл вагових коефіцієнтів підтверджує адаптивний характер ансамблю VotingRegressor. Внесок кожної базової моделі автоматично змінюється залежно від режиму циклічного навантаження, що дає можливість з високою точністю відтворювати гістерезисну поведінку SMA в широкому діапазоні частот.

### 3.2.3. Оцінювання точності моделі VotingRegressor

Точність ансамблевої моделі оцінювали за стандартними метриками регресійного аналізу (MSE, MAE, MAPE та коефіцієнтом детермінації  $R^2$ ). Оцінювання здійснювали на незалежній тестовій вибірці, сформованій за груповим принципом.

У таблиці 3.2 наведено результати кількісної оцінки точності ансамблевих Voting-моделей для тестових даних у діапазоні 100–250 циклів.

Таблиця 3.2.

Метрики точності ансамблевих Voting-моделей для різних частот

Частота, Гц	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
0,1	0,0009	0,0208	0,9996	0,0028
0,3	0,0008	0,0205	0,9997	0,0065
0,5	0,0003	0,0142	0,9994	0,0051
1	0,0003	0,0129	0,9994	0,0055
3	0,0006	0,0182	0,9985	0,0092
5	0,0003	0,0127	0,9984	0,0071
10	0,0002	0,0099	0,9981	0,0054

Надзвичайно малі значення похибок підтверджують високу точність побудованих Voting -моделей.

Застосування візуалізаційних інструментів доповнило кількісну оцінку точності моделей та забезпечило якісний аналіз відповідності прогнозованих і експериментальних значень деформації, а також структуру похибок прогнозування.

На рисунку 3.26 наведено співвідношення між експериментальними та передбаченими значеннями деформації для ансамблевої моделі VotingRegressor для частот циклічного навантаження 0,1 та 10 Гц.

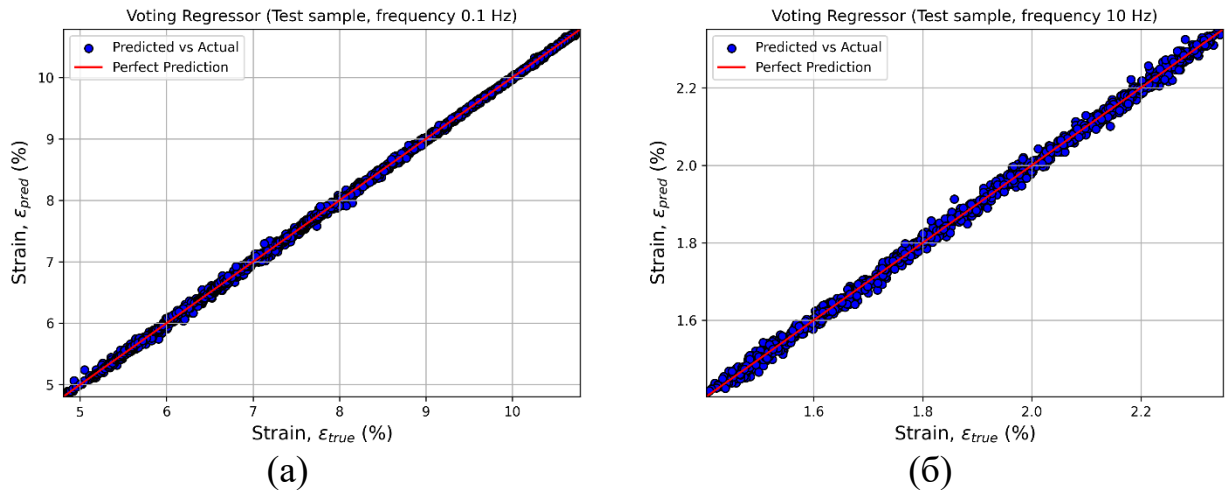


Рис. 3.26. Залежності експериментальних та передбачених значень деформації для ансамблевої моделі VotingRegressor за частот циклічного навантаження 0,1 Гц (а) та 10 Гц (б)

Аналогічні графіки побудовано і для інших досліджуваних частот навантаження, що підтвердило узгодженість між експериментальними та прогнозованими значеннями деформації в усьому розглянутому діапазоні частот.

Графік залишків відобразив розподіл похибок прогнозування, тобто різниць між експериментальними та передбаченими значеннями, залежно від номера тестового зразка (вимірювання), що дало змогу зробити висновок про відсутність виражених систематичних відхилень і випадковий характер похибок.

На рисунку 3.27 наведено графіки залишків прогнозування за частот циклічного навантаження 0,1 та 10 Гц, які ілюструють розподіл похибок відносно нульового рівня.

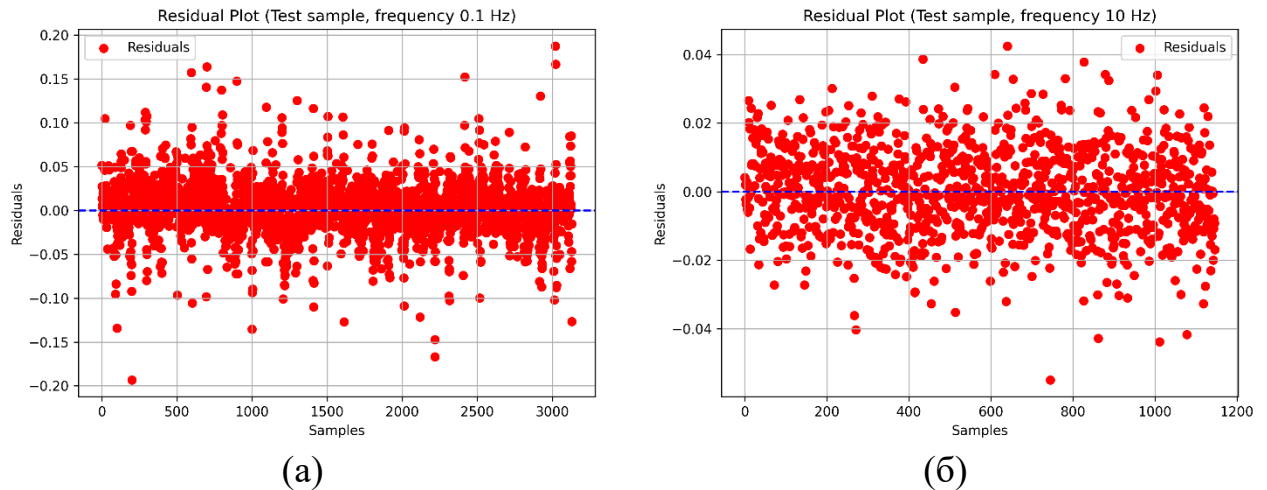


Рис. 3.27. Графіки залишків прогнозування ансамблевої моделі VotingRegressor при частотах циклічного навантаження 0,1 Гц (а) та 10 Гц (б)

Аналогічні графіки побудовано і для інших досліджуваних частот навантаження, що підтвердило стабільність характеру залишків, їх випадковий розподіл навколо нульового рівня.

### 3.3. Результати дослідження ансамблевої моделі StackingRegressor

#### 3.3.1. Налаштування гіперпараметрів базових моделей та мета-моделі

Під час побудови ансамблевої моделі StackingRegressor підбір гіперпараметрів базових моделей першого рівня та метамоделі другого рівня здійснено методом GridSearchCV за критерієм мінімізації середньоквадратичної похибки (MSE). З метою запобігання витоку інформації між навчальною та валідаційною вибірками та забезпечення коректної оцінки узагальнювальної здатності моделей застосовувано групову п'ятикратну крос-валідацію GroupKFold, у якій груповою ознакою слугував номер циклу навантаження (ознака Cycle).

Гіперпараметри кожної базової моделі підбирали в обмежених, фізично та методологічно обґрунтованих діапазонах (кількість дерев, глибина дерев,

параметри регуляризації, кількість нейронів, параметри ядра тощо), що дало змогу досягти компромісу між точністю моделі та її узагальнювальною здатністю [58, 59].

На другому рівні ансамблю скористалися мета-моделлю ElasticNet, яка поєднує властивості  $L1$ - та  $L2$ -регуляризації. Такий підхід забезпечив баланс між відбором найінформативніших моделей (через розріджувальний ефект  $L1$ -норми) та стабілізацією їхніх ваг (завдяки  $L2$ -компоненті), що запобігає перенаванчання та надмірній кореляції між базовими прогнозами. Оптимальні значення коефіцієнтів регуляризації ( $\alpha$ ) та співвідношення  $L1/L2$ -штрафів ( $l1\_ratio$ ) визначали за допомогою GridSearchCV, застосувавши ту ж групову схему крос-валідації.

Параметр  $l1\_ratio \in [0, 1]$  визначає відношення між  $L1$  та  $L2$  регуляризацією у загальній функції штрафу. Якщо  $l1\_ratio = 1$ , маємо чисту Lasso-регуляризацію ( $L1$ ), що розріджує модель, тобто занулює неістотні коефіцієнти. Це сприяє відбору найважливіших ознак (або базових моделей у ансамблі). Якщо  $l1\_ratio = 0$ , отримуємо чисту Ridge-регуляризацію ( $L2$ ), яка не занулює коефіцієнти, однак зменшує їх амплітуди, стабілізуючи модель за наявності мультиколінеарності.

У результаті налаштування гіперпараметрів сформовано оптимальну конфігурацію Stacking-моделі, яка забезпечила мінімальне значення MSE на валідаційних підвибірках.

В таблиці 3.3 наведено основні гіперпараметри. Для всіх досліджуваних частот зберігається єдина архітектура ансамблю, а зміни гіперпараметрів мають поступовий і обмежений характер. Це свідчить про стабільність побудованої Stacking-моделі та підтверджує, що відмінності в точності прогнозування зумовлені насамперед фізичними особливостями гістерезисної поведінки SMA при різних частотах навантаження, а не штучним переналаштуванням моделей.

Таблиця 3.3.

Гіперпараметри базових моделей і мета-моделі ансамблю StackingRegressor для різних частот навантаження

Модель	Гіперпараметр	Частота, Гц						
		0,1	0,3	0,5	1	3	5	10
<b>Elastic Net (мета-модель)</b>	$\alpha$	0,01	0,01	0,01	0,01	0,03	0,05	0,04
	l1_ratio	0,8	0,8	0,8	0,8	0,8	0,9	0,9
	fit_intercept	True						
	max_iter	1000			1300			
	selection	cyclic						
<b>RF</b>	n_estimators	200	200	200	300	350	400	400
	max_depth	None	None	None	None	25	25	25
	min_samples_split	2	2	2	2	3	3	6
	min_samples_leaf	1	1	1	1	2	2	3
	bootstrap	True						
	criterion	squared_error						
<b>GBR</b>	n_estimators	200	200	200	250	300	400	400
	learning_rate	0,1	0,1	0,1	0,1	0,05	0,05	0,05
	max_depth	3	3	3	3	3	3	3
	subsample	1	1	1	1	0,9	0,8	0,8
	loss							
<b>ET</b>	n_estimators	250	250	250	300	300	400	400
	max_depth	None	None	None	None	25	25	20
	bootstrap	False						
	criterion	squared_error						
<b>SVR</b>	kernel	rbf						
	C	20	20	20	20	10	10	8
	epsilon	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,2	0,2
	gamma	scale						
<b>kNN</b>	n_neighbors	5	5	5	5	7	9	9
	weights	uniform	uniform	uniform	uniform	distance	distance	distance
	metric	minkowski (p=2)						
<b>MLP</b>	hidden_layer_sizes	128-64-32	128-64-32	128-64-32	96-64-32	64-32-16	64-32-16	64-32
	activation	relu						
	solver	adam						
	learning_rate	adaptive, init= 0.001						
	max_iter	2000	2000	2000	2000	2500	2500	2500
	early_stopping	True, patience=30						

Для базових моделей SVR, kNN та MLP, чутливих до масштабу вхідних ознак, для всіх досліджуваних частот циклічного навантаження застосовано єдиний метод попереднього масштабування даних - StandardScaler.

### 3.3.2. Аналіз ваг мета-моделі ElasticNet

Нормований розподіл ваг мета-моделі ElasticNet відображає відносний внесок кожного базового алгоритму у кінцевий прогноз ансамблю StackingRegressor. Для забезпечення коректної інтерпретації результуючих коефіцієнтів ваги пронормовано таким чином, що сума їхніх абсолютних значень дорівнювала одиниці. Це дало змогу безпосередньо порівнювати вплив різних базових моделей незалежно від масштабу їхніх прогнозів. Мета-модель ElasticNet формує кінцевий прогноз у вигляді лінійної комбінації прогнозів базових моделей першого рівня, при цьому вагові коефіцієнти визначають у процесі навчання шляхом мінімізації функції втрат із одночасним застосуванням  $L1$ - та  $L2$ -регуляризації. Такий підхід дає можливість, з одного боку, зменшити вплив мультиколінеарності між прогнозами окремих моделей, а з іншого - автоматично зменшувати або повністю зануляти внесок малоєфективних або надлишкових компонент ансамблю [59]. На рис. 3.28–3.31 наведено нормований розподіл ваг мета-моделі ElasticNet для різних частот циклічного навантаження.

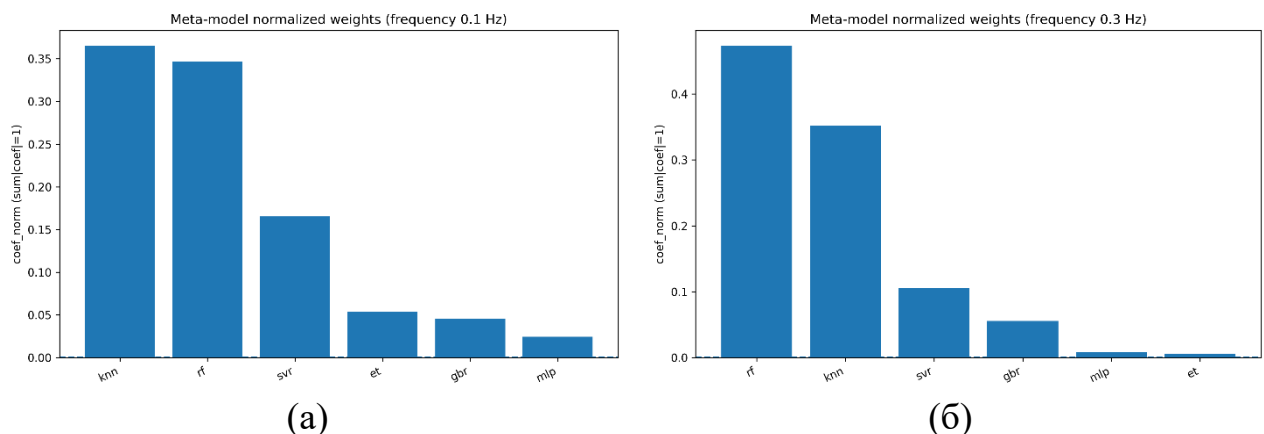


Рис. 3.28. Нормований розподіл ваг мета-моделі ElasticNet для ансамблю StackingRegressor за частот навантаження 0,1 Гц (а) та 0,3 Гц (б)

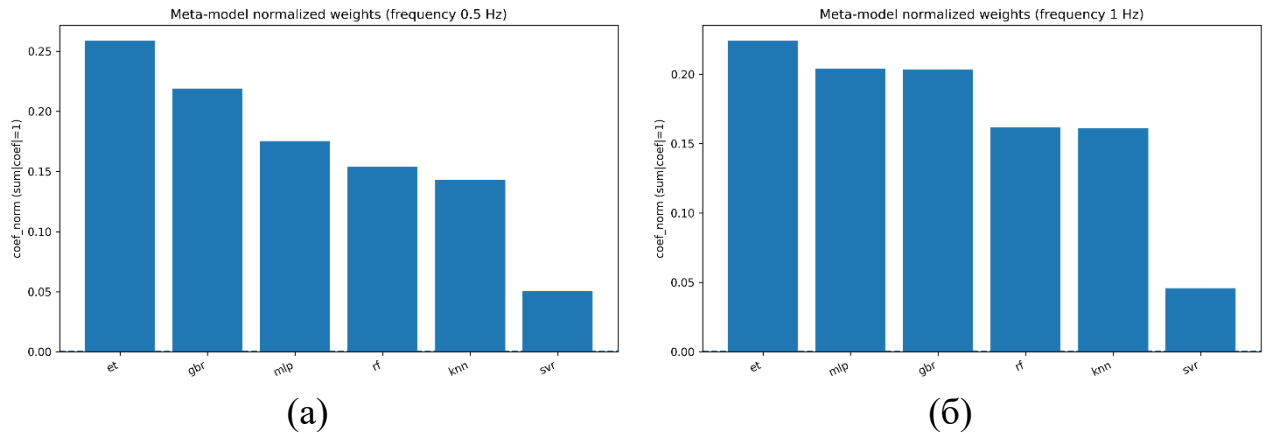


Рис. 3.29. Нормований розподіл ваг мета-моделі ElasticNet для ансамблю StackingRegressor за частот навантаження 0,5 Гц (а) та 1 Гц (б)

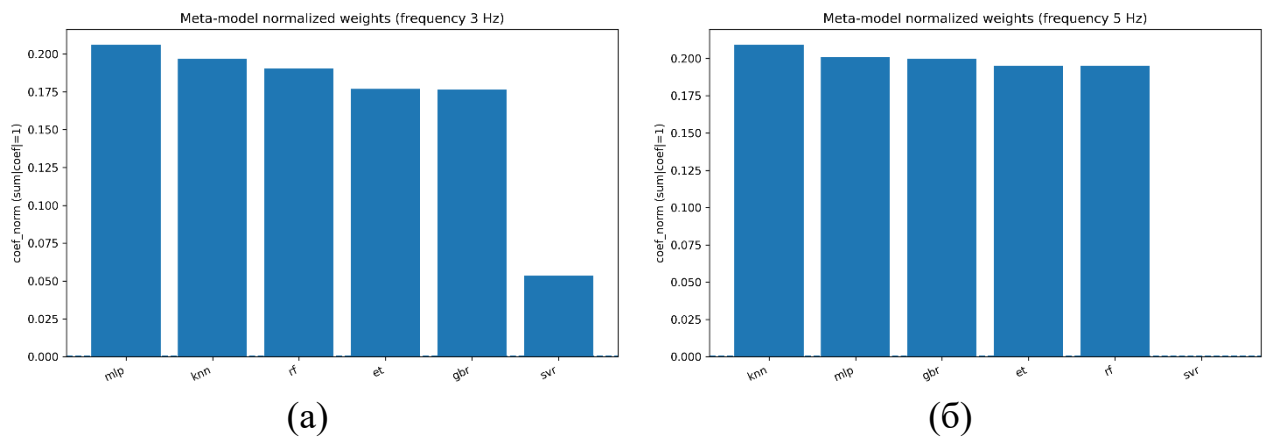


Рис. 3.30. Нормований розподіл ваг мета-моделі ElasticNet для ансамблю StackingRegressor за частот навантаження 3 Гц (а) та 5 Гц (б)

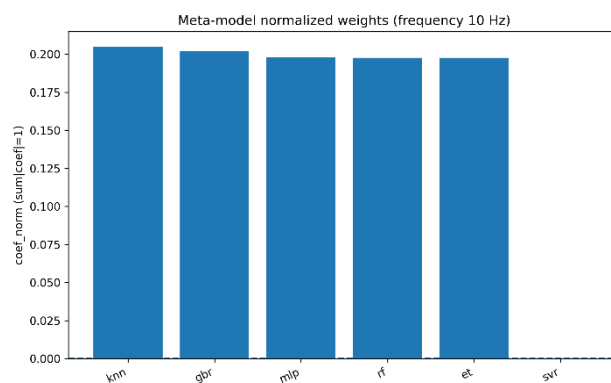


Рис. 3.31. Нормований розподіл ваг мета-моделі ElasticNet для ансамблю StackingRegressor за частоти навантаження 10 Гц

Аналіз нормованих ваг метамоделі ElasticNet для різних частот навантаження показав значну залежність структури ансамблю від динамічного режиму деформування SMA. Для низьких частот (0,1–0,3 Гц) домінуючий внесок у формування прогнозу забезпечують моделі kNN та Random Forest. Із підвищенням частоти навантаження до 0,5–1 Гц спостерігається більш збалансований розподіл ваг між алгоритмами на основі дерев рішень, нейронною мережею MLP та методами градієнтного бустингу. Для високочастотних режимів (3–10 Гц) ваги метамоделі набувають майже рівномірного розподілу між більшістю базових алгоритмів, за винятком SVR, внесок якого зменшується практично до нуля.

Отримані результати підтверджують адаптивний характер Stacking-ансамблю, у якому метамоделі ElasticNet автоматично перерозподіляє ваги між базовими алгоритмами залежно від частотного режиму навантаження. Застосування нормалізації ваг дає можливість інтерпретувати їх як міру відносної важливості відповідної базової моделі в ансамблі, що є особливо цінним у контексті ХАІ. Такий аналіз дає змогу не лише оцінити точність ансамблю в цілому, але й зробити висновки щодо доцільності включення окремих алгоритмів до складу моделі, а також їхньої ролі в описі фізичних механізмів еволюції гістерезисної поведінки SMA.

Таким чином, аналіз розподілу ваг метамоделі ElasticNet підтверджує, що ансамблевий Stacking підхід забезпечує адаптивне поєднання різнорідних моделей, у якому кожен базовий алгоритм робить узгоджений внесок у формування прогнозу деформації.

### **3.3.3. Оцінювання точності моделі StackingRegressor**

Точність ансамблевої моделі оцінювали за стандартними метриками регресійного аналізу (MSE, MAE, MAPE та коефіцієнтом детермінації  $R^2$ ). Оцінювання проводили на незалежній тестовій вибірці, сформованій за груповим принципом.

У таблиці 3.4 наведено результати кількісної оцінки точності ансамблевих Stacking-моделей для тестових даних у діапазоні 100–250 циклів.

Таблиця 3.4.

Метрики точності ансамблевих Stacking-моделей для різних частот

Частота, Гц	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
0,1	0,0011	0,0240	0,9995	0,0032
0,3	0,0009	0,0229	0,9997	0,0073
0,5	0,0004	0,0163	0,9992	0,0057
1	0,0004	0,0175	0,9990	0,0075
3	0,0007	0,0218	0,9976	0,0106
5	0,0006	0,0218	0,9959	0,0125
10	0,0011	0,0285	0,9869	0,0157

Отримані значення метрик свідчать про високу узгодженість прогнозованих і експериментальних значень деформації в усьому досліджуваному частотному діапазоні. Для низьких і середніх частот навантаження (0,1–1 Гц) модель показує надзвичайно високі значення коефіцієнта детермінації ( $R^2 \geq 0,999$ ) та мінімальні значення похибок. Зі збільшенням частоти навантаження до 3–5 Гц спостерігається помірне зростання значень MSE, MAE та MAPE. Для максимальної досліджуваної частоти 10 Гц спостерігається найбільше зниження точності прогнозування ( $R^2=0,9869$ ), однак навіть у цьому режимі ансамблева модель забезпечує прийнятний рівень похибки. Це свідчить про добру узагальнювальну здатність Stacking-моделі та її стійкість до зміни динамічних умов навантаження.

Застосування візуалізаційних інструментів доповнило кількісну оцінку точності ансамблевої Stacking-моделі та забезпечило якісний аналіз відповідності прогнозованих і експериментальних значень деформації, а також структури похибок прогнозування.

На рисунку 3.32 наведено відношення між експериментальними та передбаченими значеннями деформації для ансамблевої моделі StackingRegressor для частотах циклічного навантаження 0,1 та 10 Гц.

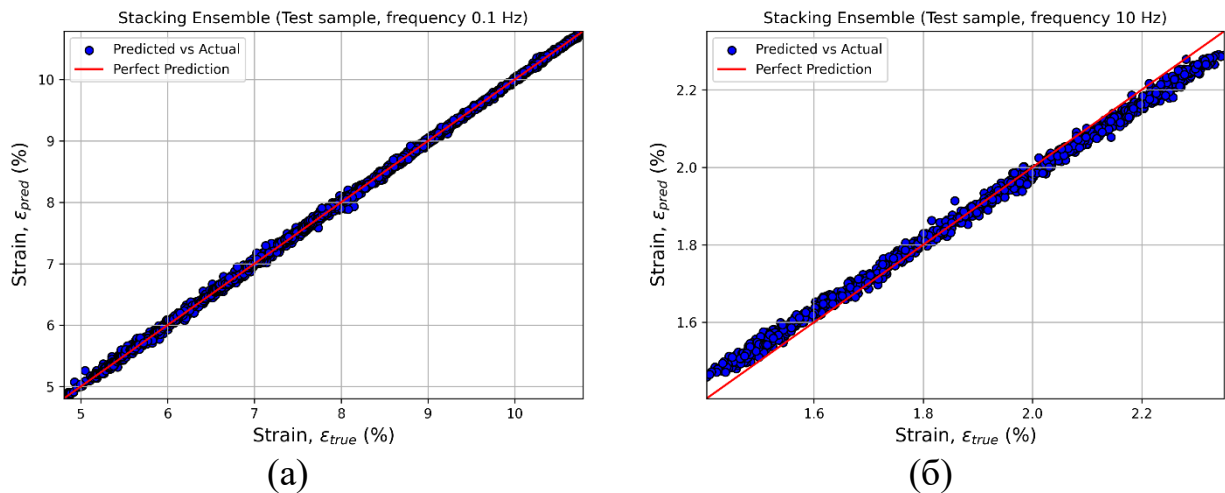


Рис. 3.32. Співвідношення між експериментальними та передбаченими значеннями деформації для ансамблевої моделі StackingRegressor за частот циклічного навантаження 0,1 Гц (а) та 10 Гц (б)

Аналогічні графіки побудовано і для інших досліджуваних частот навантаження, що підтвердило стабільність узгодженості між експериментальними та прогнозованими значеннями деформації в усьому розглянутому діапазоні частот. Для низьких і середніх частот (0,1–1 Гц) розсіювання прогнозів є мінімальним у всьому діапазоні деформацій, що узгоджується з високими значеннями коефіцієнта детермінації, наведеними в таблиці 3.4. Зі збільшенням частоти до 3–10 Гц спостерігається незначне зростання дисперсії прогнозів, особливо в області більших значень деформації.

Графік залишків відобразив розподіл похибок прогнозування, тобто різниць між експериментальними та передбаченими значеннями деформації, залежно від номера вимірювання.

На рисунку 3.33 наведено графіки залишків прогнозування для ансамблевої моделі Stacking Regressor для частот циклічного навантаження 0,1 та 10 Гц, які ілюструють розподіл похибок відносно нульового рівня.

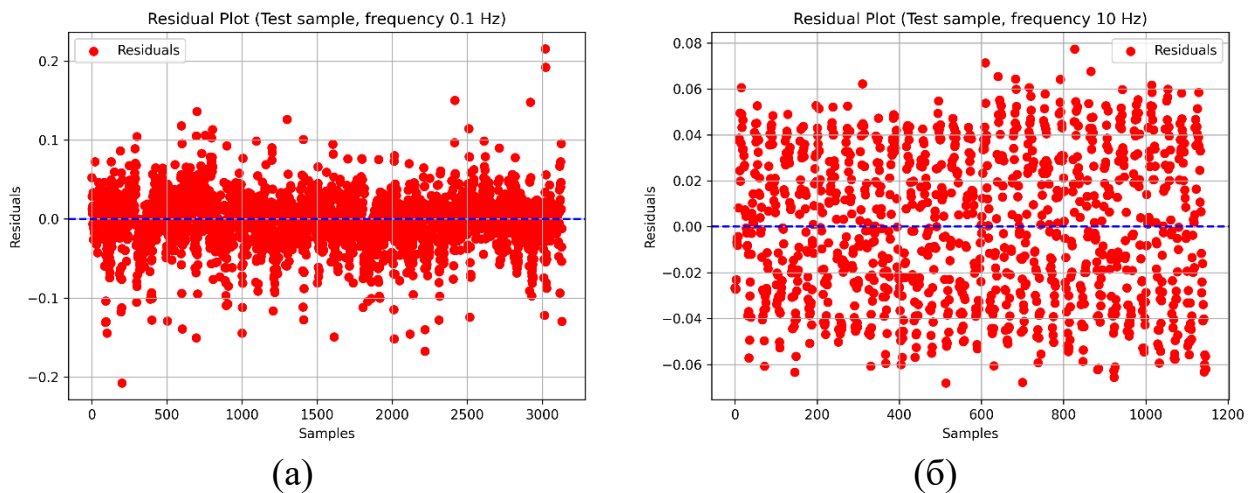


Рис. 3.33. Графіки залишків прогнозування ансамблевої моделі Stacking Regressor за частот циклічного навантаження 0,1 Гц (а) та 10 Гц (б)

Аналогічні графіки побудовано і для інших досліджуваних частот навантаження. Аналіз цього розподілу показав відсутність виражених систематичних відхилень, трендів або кластеризації залишків, що свідчить про випадковий характер похибок та адекватність побудованої моделі. Така поведінка залишків підтверджує коректність ансамблевої Stacking-моделі.

Таким чином, результати кількісної та якісної оцінки підтверджують, що ансамблевий підхід на основі Stacking Regressor з метамоделлю ElasticNet забезпечує високу точність і узгодженість прогнозів деформації сплавів з пам'яттю форми в широкому діапазоні частот навантаження.

### 3.4. Результати дослідження рекурентних нейронних мереж

#### 3.4.1. Архітектура та налаштування гіперпараметрів моделей

Рекурентні нейронні мережі типу SimpleRNN, LSTM та GRU належать до класу моделей глибокого навчання, здатних ефективно моделювати часові та послідовні залежності у даних. Завдяки наявності зворотних зв'язків такі архітектури забезпечують накопичення контекстної інформації та є придатними

для відтворення часових залежностей у зміні деформації матеріалу за умов циклічного навантаження. У межах даного дослідження архітектури рекурентних нейронних мереж реалізовано із застосуванням фреймворку TensorFlow/Keras, а підбір гіперпараметрів здійснювали автоматизовано на основі алгоритму Hyperband, що забезпечує ефективний пошук оптимальних конфігурацій у широкому просторі моделей [44].

Кожна з досліджуваних моделей містила:

- вхідний шар, що відповідає кількості вхідних ознак (Stress, Cycle, UpDown);
- від одного до чотирьох прихованих рекурентних шарів типу SimpleRNN, LSTM або GRU;
- вихідний повнозв'язний шар, який формує прогноз деформації для кожного кроку часової послідовності.

У випадку багатошарових архітектур рекурентні шари налаштовували з параметром `return_sequences=True`, що дало можливість зберігати часову структуру даних та правильно передавати послідовність на наступні рівні мережі. Для прихованих шарів застосовували нелінійну функцію активації `tanh`, яка є стандартною для рекурентних мереж і забезпечує стабільність градієнтів при моделюванні часових залежностей.

Під час побудови архітектури моделі кількість нейронів у кожному прихованому рекурентному шарі варіювали від 32 до 256 з кроком 32, а кількість прихованих шарів задавали в межах від одного до чотирьох. Для кожного рекурентного шару автоматично підбирали рівень `dropout`-регуляризації в межах 0,1–0,5 з кроком 0,1, що передбачало випадкове відключення частини нейронів під час навчання та сприяло зменшенню ризику перенавчання.

Стабільну збіжність процесу навчання в усіх архітектурах забезпечували оптимізатором Adam з експоненційним спадом швидкості навчання, реалізованим через механізм `ExponentialDecay`. Початкове значення швидкості навчання вибирали з множини  $\{0,001; 0,0001\}$ , після чого застосовували експоненційне зменшення темпу навчання з коефіцієнтом 0,96 кожні 1000

кроків. Для фінальних моделей зафіксовано значення  $\text{initial learning rate} = 0,001$ , що забезпечило компроміс між швидкістю збіжності та стабільністю процесу навчання.

Для забезпечення коректного оцінювання узагальнювальної здатності рекурентних нейронних мереж застосовано групову крос-валідацію `GroupKFold` із розбиттям даних за номером циклу навантаження-розвантаження. Крім того, у процесі навчання застосовували механізм ранньої зупинки (`EarlyStopping`) з параметром  $\text{patience} = 150$ , який автоматично припиняв навчання у разі стабілізації валідаційної похибки та відновлював ваги, що відповідали найкращому значенню функції втрат. Такий підхід дав можливість запобігти перенавчанню та зменшити надмірні обчислювальні витрати. Для всіх досліджуваних моделей RNN застосовували єдиний метод попереднього масштабування даних – `RobustScaler`.

Комбінація автоматизованого підбору гіперпараметрів, адаптивного коригування швидкості навчання та механізмів регуляризації забезпечила підвищену стійкість процесу навчання, прискорену збіжність і високу узагальнювальну здатність рекурентних нейронних мереж. Остаточну конфігурацію кожної моделі визначали за мінімальним значенням MSE на валідаційній вибірці.

На рисунку 3.34 показано динаміку функції втрат для тренувальної та валідаційної вибірок під час навчання моделі LSTM для частоти циклічного навантаження 0,3 Гц.

Як видно з рисунка 3.34, на початковому етапі навчання спостерігається різке зменшення значень функції втрат, що свідчить про швидке засвоєння моделлю базових закономірностей часової структури даних. Уже протягом перших десятків епох значення MSE для обох вибірок зменшується на порядок.

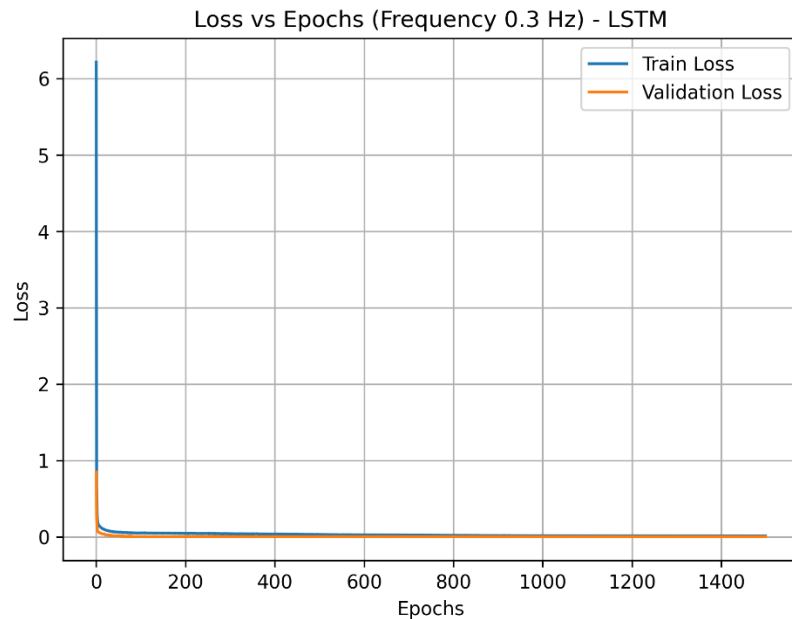


Рис. 3.34. Динаміка функції втрат (MSE) для тренувальної та валідаційної вибірок у процесі навчання моделі LSTM за частоти циклічного навантаження 0,3 Гц.

Подальший процес навчання характеризується поступовим і стабільним зниженням як тренувальної, так і валідаційної похибки без різких коливань. Криві втрат для тренувальної та валідаційної вибірок залишаються близькими між собою протягом усього процесу навчання, що свідчить про відсутність перенавчання та добру узгодженість моделі з даними, якими не користувалися безпосередньо під час навчання.

Отримані результати підтверджують, що LSTM-модель правильно відтворює часові залежності деформації SMA для частоти 0,3 Гц та є стійкою до перенавчання за умов тривалого процесу навчання.

Аналогічний характер кривих навчання отримано і для інших значень частоти циклічного навантаження, а також для інших типів рекурентних нейронних мереж (SimpleRNN, GRU) [44]. Для всіх досліджуваних конфігурацій спостерігали швидке зменшення значень функції втрат на початкових етапах навчання з подальшою стабілізацією тренувальної та валідаційної похибок на

низькому рівні. Криві втрат для тренувальної та валідаційної вибірок залишалися близькими між собою протягом усього процесу навчання, що свідчить про відсутність перенавчання. Подібність динаміки навчання для різних частот і типів рекурентних архітектур підтверджує стійкість обраної стратегії підбору гіперпараметрів, регуляризації та налаштування процесу навчання, а також свідчить про доцільність застосування рекурентних нейронних мереж для прогнозування гістерезисної поведінки SMA за різних частот навантаження. Параметри архітектури та результати автоматизованого тюнінгу наведено в таблицях 3.5–3.7

Таблиця 3.5.

Основні гіперпараметри моделей на основі нейромережі SimpleRNN

Частота, Гц	Конфігурація прихованих рекурентних шарів	Коефіцієнт регуляризації Dropout для рекурентних шарів
0,1	96-256-224-32	0,2-0,1-0,5-0,3
0,3	192-128-224-32	0,1-0,1-0,5-0,3
0,5	128-64-256-32	0,3-0,1-0,1-0,5
1	128-224-160-128	0,1-0,3-0,2-0,5
3	256-96-192-64	0,1-0,1-0,4-0,2
5	32-256-128-160	0,1-0,2-0,3-0,4
10	256-128-192-64	0,1-0,3-0,4-0,5

Таблиця 3.6.

Основні гіперпараметри моделей на основі нейромережі LSTM

Частота, Гц	Конфігурація прихованих рекурентних шарів	Коефіцієнт регуляризації Dropout для рекурентних шарів
0,1	160-256-128-256	0,2-0,3-0,1-0,3
0,3	224-128-64-256	0,2-0,2-0,1-0,2
0,5	64-256-96-64	0,2-0,1-0,5-0,5
1	256-160-224-64	0,1-0,1-0,5-0,4
3	256-224-32-256	0,3-0,1-0,4-0,2
5	224-224-224-160	0,3-0,2-0,1-0,2
10	224-128-160-96	0,1-0,2-0,5-0,5

## Основні гіперпараметри моделей на основі нейромережі GRU

Частота, Гц	Конфігурація прихованих рекурентних шарів	Коефіцієнт регуляризації Dropout для рекурентних шарів
0,1	224-256-224-64	0,2-0,5-0,3-0,2
0,3	96-256-32-192	0,1-0,1-0,3-0,4
0,5	32-224-128-64	0,2-0,1-0,3-0,2
1	256-224-128-224	0,1-0,2-0,1-0,1
3	256-224-32-64	0,2-0,2-0,1-0,1
5	160-128-256-160	0,3-0,1-0,1-0,5
10	224-256-224-64	0,5-0,2-0,2-0,3

Наведені в таблицях результати автоматизованого тюнінгу свідчать про те, що оптимальні архітектури рекурентних нейронних мереж є чутливими до частоти циклічного навантаження та типу рекурентної комірки. При цьому для всіх моделей найкращими є багатошарові конфігурації з неоднорідною кількістю нейронів у прихованих шарах, що дає змогу одночасно відтворювати як короткочасні, так і довготривалі часові залежності. Підібрані значення рівня Dropout свідчать про доцільність застосування регуляризації рекурентних моделей і забезпечують баланс між точністю прогнозування та узагальнювальною здатністю мереж.

Для кожної частоти навантаження після налаштування гіперпараметрів та завершення навчання моделі RNN зберігали як окремі файли у форматі .h5 (Keras). Такий формат містить архітектуру моделі, її вагові коефіцієнти та конфігурацію оптимізатора, що забезпечує можливість точного відтворення отриманих результатів і подальшого застосування моделі без повторного навчання. Окремо зберігали об'єкт масштабування даних RobustScaler, що забезпечувало коректну обробку нових даних в умовах, ідентичних до тих, якими користувалися під час навчання моделі.

### 3.4.2. Оцінювання точності рекурентних нейронних мереж

Оцінювання ефективності навчання рекурентних нейронних мереж здійснювали з використанням стандартних метрик регресійного аналізу. Оцінювання проводили окремо для кожної з трьох архітектур рекурентних нейронних мереж (SimpleRNN, LSTM та GRU) та частот циклічного навантаження. Значення метрик для всіх досліджуваних моделей і семи частот навантаження наведено в таблиці 3.8, що дає можливість виконати порівняльний аналіз точності та узагальнювальної здатності рекурентних архітектур за різних режимів навантаження.

Таблиця 3.8.

Метрики точності моделей SimpleRNN, LSTM та GRU для різних частот навантаження

Частота, Гц	Модель	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
0,1	SimpleRNN	0,0008	0,0224	0,9996	0,0028
	LSTM	0,0014	0,0276	0,9994	0,0037
	GRU	0,0004	0,0157	0,9998	0,0020
0,3	SimpleRNN	0,0002	0,0112	0,9999	0,0036
	LSTM	0,0002	0,0103	0,9999	0,0037
	GRU	0,0001	0,0080	0,9999	0,0025
0,5	SimpleRNN	0,0003	0,0127	0,9996	0,0044
	LSTM	0,0001	0,0099	0,9997	0,0035
	GRU	0,0002	0,0112	0,9996	0,0039
1	SimpleRNN	0,0007	0,0067	0,9998	0,0029
	LSTM	0,0004	0,0049	0,9999	0,0021
	GRU	0,0004	0,0054	0,9999	0,0023
3	SimpleRNN	0,0007	0,0065	0,9998	0,0032
	LSTM	0,0004	0,0052	0,9998	0,0025
	GRU	0,0003	0,0043	0,9999	0,0021
5	SimpleRNN	0,0004	0,0049	0,9997	0,0028
	LSTM	0,0004	0,0051	0,9997	0,0028
	GRU	0,0002	0,0040	0,9998	0,0023
10	SimpleRNN	0,0007	0,0066	0,9991	0,0036
	LSTM	0,0004	0,0054	0,9994	0,0029
	GRU	0,0005	0,0053	0,9994	0,0029

Аналіз результатів, наведених у таблиці 3.8, свідчить про високу точність усіх досліджуваних рекурентних нейронних мереж. Значення коефіцієнта детермінації  $R^2$  для всіх моделей і режимів навантаження перевищують 0,999, що вказує на майже повну узгодженість прогнозованих і експериментальних значень деформації. Порівняльний аналіз показує, що мережі типу GRU та LSTM у середньому показують дещо кращі значення похибок (MSE, MAE, MAPE) порівняно з SimpleRNN, особливо за середніх і високих частот циклічного навантаження. Це можна пояснити наявністю механізмів керування потоком інформації в комірках LSTM та GRU, які дають можливість ефективніше моделювати довготривалі часові залежності та зменшувати вплив накопичення помилок. Разом з тим, модель SimpleRNN також забезпечує високий рівень точності прогнозування, зберігаючи конкурентні значення метрик за всіх частот навантаження.

Низькі MAPE, які в більшості випадків не перевищують 0,4 %, підтверджують практичну придатність усіх розглянутих рекурентних моделей для інженерних задач прогнозування гістерезисної поведінки SMA. Загалом, отримані результати підтверджують доцільність використання більш складних архітектур LSTM або GRU.

Для візуальної оцінки якості прогнозування побудовано графіки, що відображають відношення між експериментальними та прогнозованими значеннями деформації. Такий підхід дав змогу наочно оцінити ступінь узгодженості прогнозів моделі з реальними даними та виявити можливі відхилення.

На рисунку 3.35 наведено графіки відношень між експериментальними та передбаченими значеннями деформації для моделей SimpleRNN, LSTM та GRU за частоти циклічного навантаження 0,3 Гц, що дає можливість виконати порівняльну візуальну оцінку якості прогнозування для різних рекурентних архітектур.

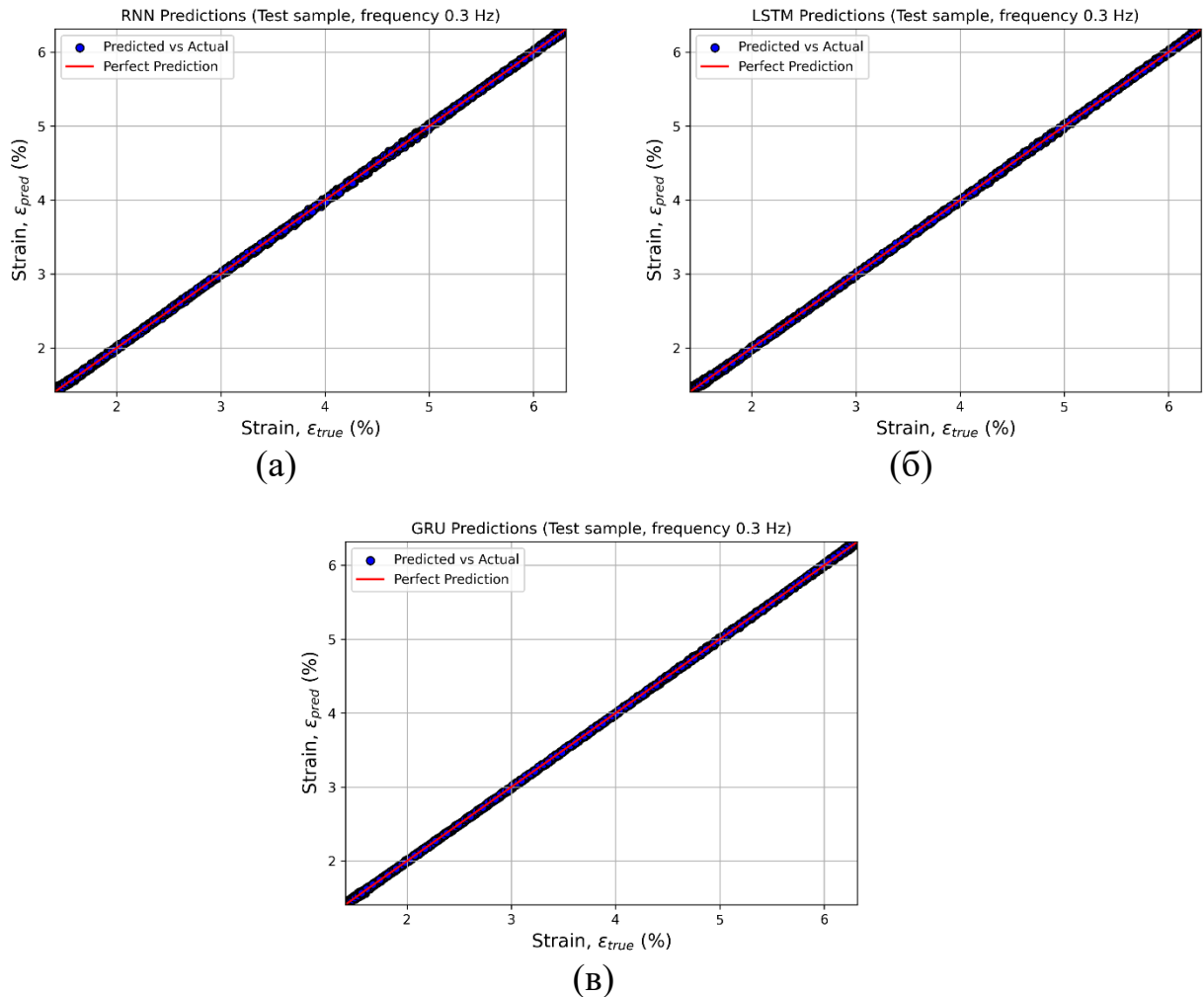


Рис. 3.35. Відношення між експериментальними та передбаченими значеннями деформації для моделей: (а) SimpleRNN, (б) LSTM, (в) GRU за частоти циклічного навантаження 0,3 Гц

Аналогічні графіки побудовано і для інших значень частоти циклічного навантаження. Отримані результати показали, що для всіх досліджуваних частот точки щільно групуються поблизу діагоналі  $y = x$ , що свідчить про високу точність прогнозування та відсутність вираженого зміщення між передбаченими і фактичними значеннями деформації. Загальний аналіз побудованих графіків підтверджує високу узгодженість результатів прогнозування з експериментальними даними для всіх розглянутих рекурентних нейронних мереж і режимів навантаження, що узгоджується з числовими оцінками точності та підтверджує надійність отриманих моделей.

Додатково для оцінювання якості прогнозування побудовано графіки залишків (Residual Plots), що відображають розподіл різниць між експериментальними та передбаченими значеннями деформації залежно від номера вимірювання у тестовій підвибірці.

На рисунку 3.36 наведено графіки залишків прогнозування для моделей SimpleRNN, LSTM та GRU для частоти циклічного навантаження 0,3 Гц, які ілюструють розподіл похибок відносно нульового рівня.

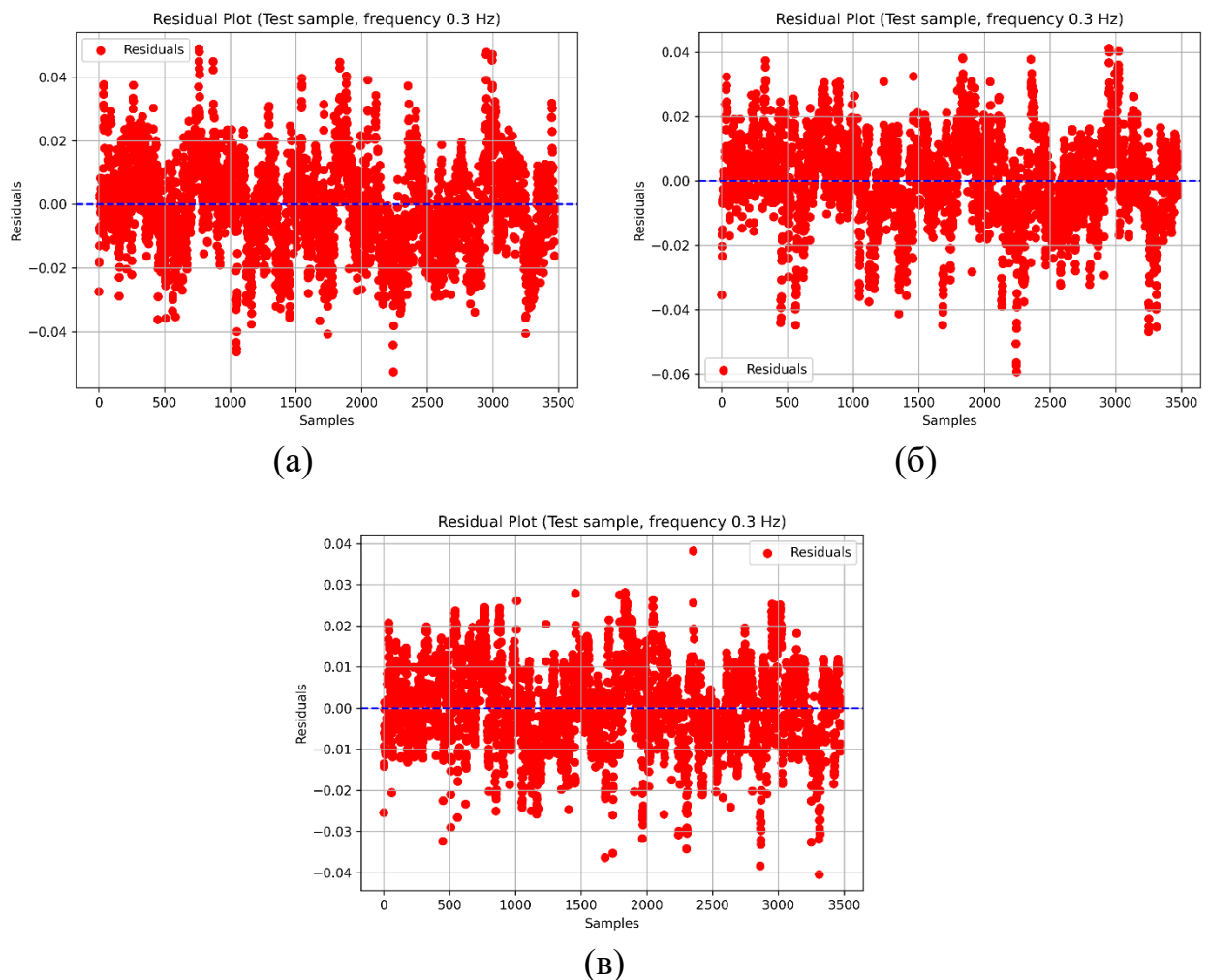


Рис. 3.36. Графіки залишків прогнозування для моделей: (а) SimpleRNN, (б) LSTM, (в) GRU за частоти циклічного навантаження 0,3 Гц

Аналогічні графіки залишків побудовано для всіх досліджуваних частот циклічного навантаження. Для кожної з рекурентних нейронних мереж

спостерігали випадковий характер розподілу залишків без виражених трендів або систематичних відхилень відносно нульового рівня, що свідчить про відсутність систематичних помилок і коректне узагальнення моделей. Амплітуда коливань залишків не перевищує  $\pm 0,05$ , що підтверджує високу стабільність прогнозів і збалансованість процесу навчання рекурентних нейронних мереж.

Відсутність виражених трендів та симетричний характер розподілу залишків свідчать про адекватність моделей, коректність апроксимації експериментальних даних і відсутність систематичного зміщення прогнозів.

### **3.5. Результати дослідження темпоральної згорткової мережі**

#### **3.5.1. Архітектура та налаштування гіперпараметрів**

Архітектуру моделей TCN реалізовано з використанням фреймворку TensorFlow/Keras, а налаштування їх конфігурації здійснено шляхом автоматизованого підбору гіперпараметрів на основі алгоритму Hyperband, що входить до складу бібліотеки Keras Tuner.

Алгоритм Hyperband виконує пошук у великому просторі архітектурних і навчальних параметрів, поєднуючи стратегію раннього відсікання неконкурентних конфігурацій із концентрацією обчислювальних ресурсів на найбільш перспективних моделях [70]. Такий підхід дає змогу ефективно досліджувати складні багатовимірні простори гіперпараметрів без надмірних обчислювальних витрат.

У процесі тюнінгу розглядали як структурні, так і навчальні гіперпараметри TCN-мережі. Зокрема, кількість стеків TCN змінювали в діапазоні від 1 до 3. Для кожного стеку оптимізували:

- кількість згорткових фільтрів у межах 64–256 з кроком 64;
- розмір ядра згортки ( $\text{kernel\_size} \in \{2, 3, 4\}$ );
- рівень регуляризації Dropout у діапазоні 0,1-0,5.

Застосування Dropout дало змогу збалансувати узагальнювальну здатність моделі та зменшити ризик перенавчання.

Критерієм якості під час автоматизованого пошуку слугувала функція втрат на валідаційному наборі (`objective = val_loss`). Максимальна кількість епох для окремого процесу навчання становила 1500, при цьому скористалися механізмом ранньої зупинки (`EarlyStopping`) з моніторингом `val_loss`, що забезпечувало припинення навчання у разі відсутності подальшого покращення якості.

Набір коефіцієнтів дилатації зафіксовано у вигляді `dilation_rates = [1, 2, 4, 8, 16]`, що забезпечило ефективне охоплення широкого спектра часових масштабів без зменшення часової роздільної здатності послідовності. Застосування причинних дилатованих згорток у TCN дає можливість збільшувати `receptive field` без звертання до `pooling`-операцій або `subsampling`. Завдяки цьому модель зберігає початкову часову дискретизацію сигналу, тобто жоден часовий крок не відкидається й не агрегується. Такий підхід є принципово важливим для прогнозування гістерезисної поведінки, де кожна точка навантаження та розвантаження несе фізичну інформацію.

Навчання моделей у межах `Hyperband` здійснювали з розміром батча 8. У TCN-стеках як функцію активації використано `Rectified Linear Unit (ReLU)`, що забезпечує необхідну нелінійність моделі та сприяє стабільності навчання. Використання `ReLU` зменшує ризик проблеми затухання градієнтів.

Налаштування параметрів мережі здійснювали за допомогою алгоритму `Adam` із динамічним коефіцієнтом швидкості навчання. Початкове значення `learning rate` ( $10^{-3}$  або  $10^{-4}$ ) визначали автоматично в процесі тюнінгу. Подальшу адаптацію швидкості навчання реалізовували за допомогою експоненційного закону зменшення (`ExponentialDecay`), що забезпечувало поступове зменшення кроку градієнтного спуску в міру наближення до мінімуму функції втрат.

За функцію втрат у задачі навчання моделі вибрали `MSE`, що є базовим та обґрунтованим критерієм для регресійного прогнозування неперервних величин і забезпечує підвищену чутливість до значних відхилень між прогнозованими та

експериментальними значеннями деформації. Паралельно в процесі навчання аналізували динаміку MAE та коефіцієнта детермінації  $R^2$ , що дало змогу здійснити всестороннє оцінювання процесу навчання моделей.

На рисунку 3.37 наведено динаміку показників якості навчання моделі TCN для частоти 1 Гц, зокрема зміну значень MAE, MSE та коефіцієнта детермінації  $R^2$  упродовж епох.

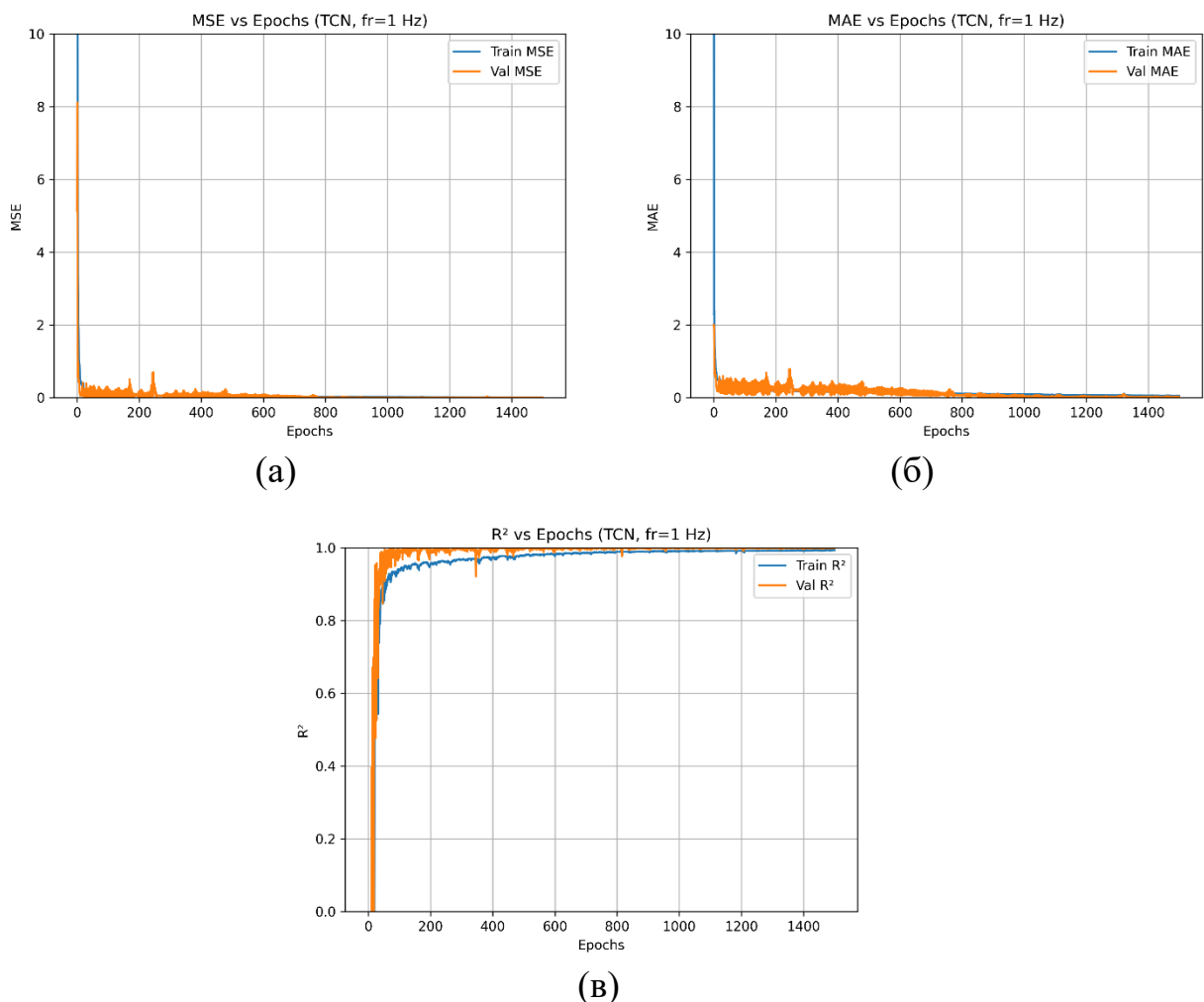


Рис. 3.37. Динаміка показників якості навчання моделі TCN для частоти 1 Гц: (а) залежність MSE від кількості епох; (б) залежність MAE від кількості епох; (в) залежність коефіцієнта детермінації  $R^2$  від кількості епох

Отримані криві демонструють швидке покращення якості прогнозування на ранніх етапах навчання моделі. Значення MAE та MSE стрімко зменшуються

впродовж перших десятків епох, що свідчить про ефективне засвоєння основних закономірностей у даних. При цьому валідаційні криві практично збігаються з тренувальними, що вказує на відсутність ознак перенавчання та підтверджує здатність моделі до ефективного узагальнення навчальних даних.

Коефіцієнт детермінації  $R^2$  зростає до значень понад 0,95 вже на початкових етапах навчання та в подальших епохах наближається до 1,0, що свідчить про здатність моделі пояснювати значну частку варіації експериментальних значень деформації. Така динаміка показників якості підтверджує високу стабільність, збіжність та ефективність обраної TCN-архітектури для моделювання гістерезисної поведінки SMA. Аналогічний характер кривих навчання отримано і для інших значень частоти циклічного навантаження.

Структура остаточно обраних моделей включає послідовні TCN-стеки з оптимальними значеннями кількості згорткових фільтрів і розмірів ядер згортки, визначеними в процесі автоматизованого тюнінгу. Після кожного TCN-стеку розташовано шари Dropout із коефіцієнтами регуляризації, підібраними індивідуально для кожної частоти циклічного навантаження, що дало можливість забезпечити баланс між складністю моделі та її узагальнювальною здатністю. Основні гіперпараметри остаточно обраних TCN-моделей наведено в таблиці 3.9.

Таблиця 3.9.

Основні гіперпараметри моделей на основі TCN-архітектури

Частота, Гц	Кількості фільтрів	Розмірів ядер згортки	Коефіцієнт регуляризації Dropout
0,1	192	3	0,2
0,3	64-256	2-4	0,1-0,3
0,5	64-128	4-2	0,1-0,2
1	128-128	3-3	0,2-0,2
3	64-64	4-4	0,1-0,3
5	256-256	3-4	0,3-0,5
10	64-128-64	4-2-3	0,3-0,2-0,2

Зміна кількості стеків, ширини фільтрів і рівня регуляризації зі зростанням частоти навантаження відображає адаптацію архітектури TCN до зростаючої динамічності процесу деформації та ускладнення часових залежностей у даних.

Завершальним елементом є шар TimeDistributed Dense, який формує прогноз деформації для кожного часового кроку вхідної послідовності.

Для кожної частоти навантаження, після завершення навчання та налаштування гіперпараметрів, модель TCN зберігали як окремий файл у форматі .h5 (keras). Такий формат забезпечує повну сумісність із TensorFlow і містить архітектуру моделі, ваги та конфігурацію оптимізатора. Це гарантує можливість точного відтворення результатів і подальшого застосування моделі без повторного навчання. Окремо зберігався об'єкт масштабування даних (RobustScaler). Це забезпечило коректну обробку нових даних у тих самих умовах, що й під час навчання [70].

### 3.5.2. Оцінювання точності TCN-моделі

Оцінювання точності моделей здійснювали окремо для кожного значення частоти навантаження з використанням стандартних метрик регресійного аналізу: MSE, MAE, MAPE та коефіцієнта детермінації  $R^2$  (таблиця 3.10).

Таблиця 3.10.

Метрики точності TCN-моделей для різних частот

Частота, Гц	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
0,1	0,0016	0,0316	0,9993	0,0040
0,3	0,0002	0,0114	0,9999	0,0038
0,5	0,0001	0,0095	0,9997	0,0033
1	0,0001	0,0060	0,9999	0,0026
3	0,0001	0,0055	0,9998	0,0026
5	0,0001	0,0055	0,9997	0,0032
10	0,0001	0,0088	0,9984	0,0048

Як показано в таблиці, кожна з моделей показала високу точність прогнозування в межах відповідної частоти. Значення MSE та MAE залишаються низькими, що свідчить про здатність моделі точно відтворювати величину деформації в абсолютних одиницях. Високі значення коефіцієнта детермінації  $R^2$  (близькі до 1,0) підтверджують якісне відтворення загальної форми петлі гістерезису та стабільне її моделювання в межах кожного частотного режиму. Метрика MAPE, що є важливою при порівнянні прогнозів між різними частотами демонструє низькі відносні похибки. Таким чином, результати свідчать про те, що підхід із побудовою окремих моделей TCN для кожної частоти навантаження забезпечує високу точність прогнозування та стабільність моделі [70].

На рисунку 3.38 наведено графіки відношень між експериментальними та передбаченими значеннями деформації для моделі TCN за частот циклічного навантаження 0,1 Гц, 1 Гц та 10 Гц, що дають можливість наочно оцінити точність прогнозування та ступінь узгодженості між прогнозованими та експериментальними даними.

Як видно з рисунка, точки “експериментальні значення – передбачені значення” для моделі TCN розташовані вздовж бісектриси першого координатного кута, що відповідає лінії ідеального прогнозування. Це свідчить про високу узгодженість між передбаченими та експериментальними значеннями деформації в усьому діапазоні її змін. Розсіювання точок відносно лінії ідеального прогнозу є мінімальним і не демонструє вираженої залежності від рівня деформації, що підтверджує відсутність систематичних зміщень у прогнозах та стабільність роботи моделі.

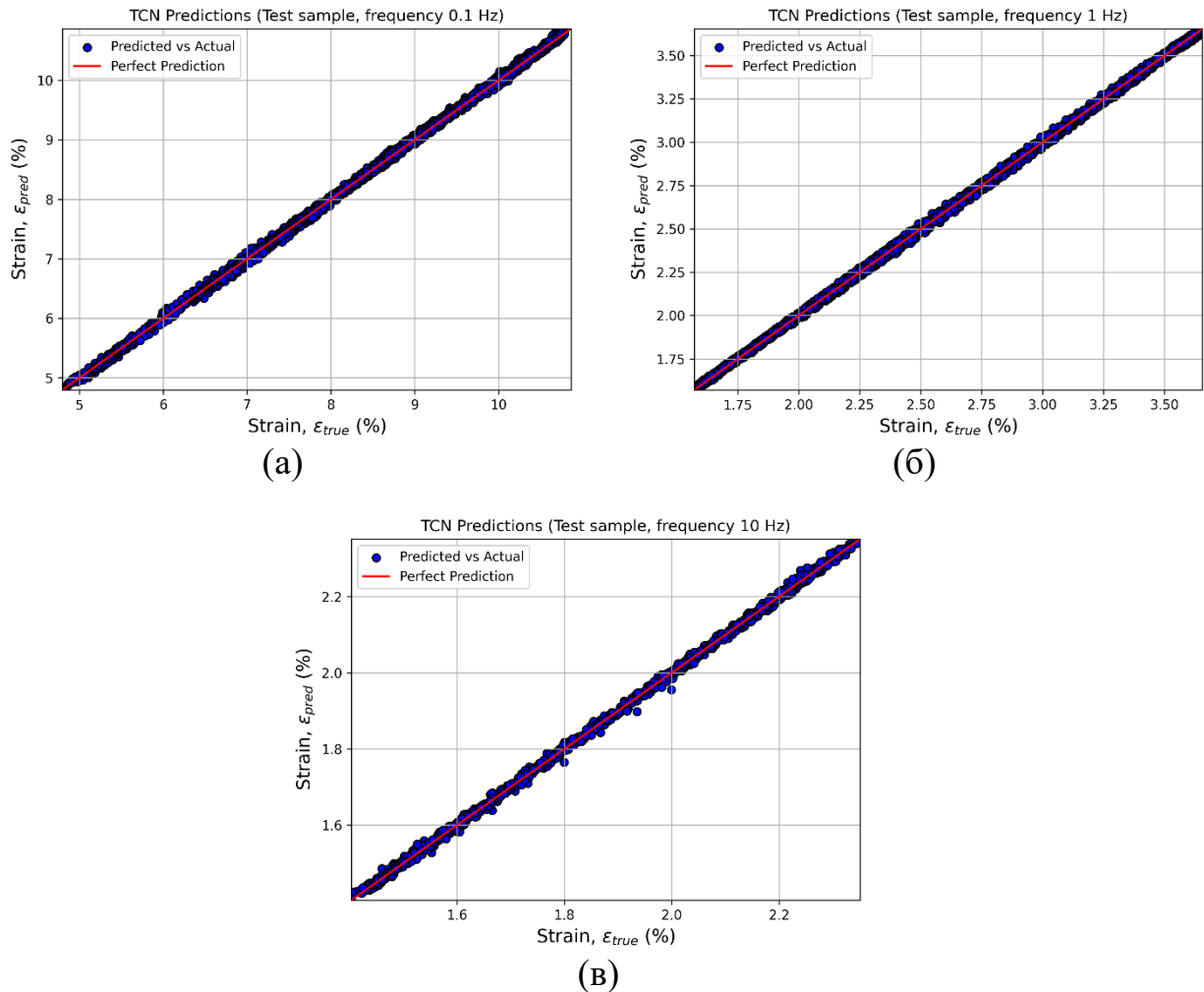


Рис. 3.38. Графіки співвідношень між експериментальними та передбаченими значеннями деформації для TCN моделі за частот циклічного навантаження 0,1 Гц (а), 1 Гц (б) та 10 Гц (в)

Аналогічні графіки побудовано і для інших досліджуваних частот циклічного навантаження, що підтвердило стабільну узгодженість між експериментальними та прогнозованими значеннями деформації в усьому розглянутому діапазоні частот.

Також побудовано графік залишків. На рисунку 3.39 наведено графіки залишків прогнозування для моделі TCN за частот циклічного навантаження 0,1 Гц, 1 Гц та 10 Гц, які ілюструють характер розподілу похибок відносно нульового

рівня та дають можливість оцінити наявність систематичних відхилень у прогнозах.

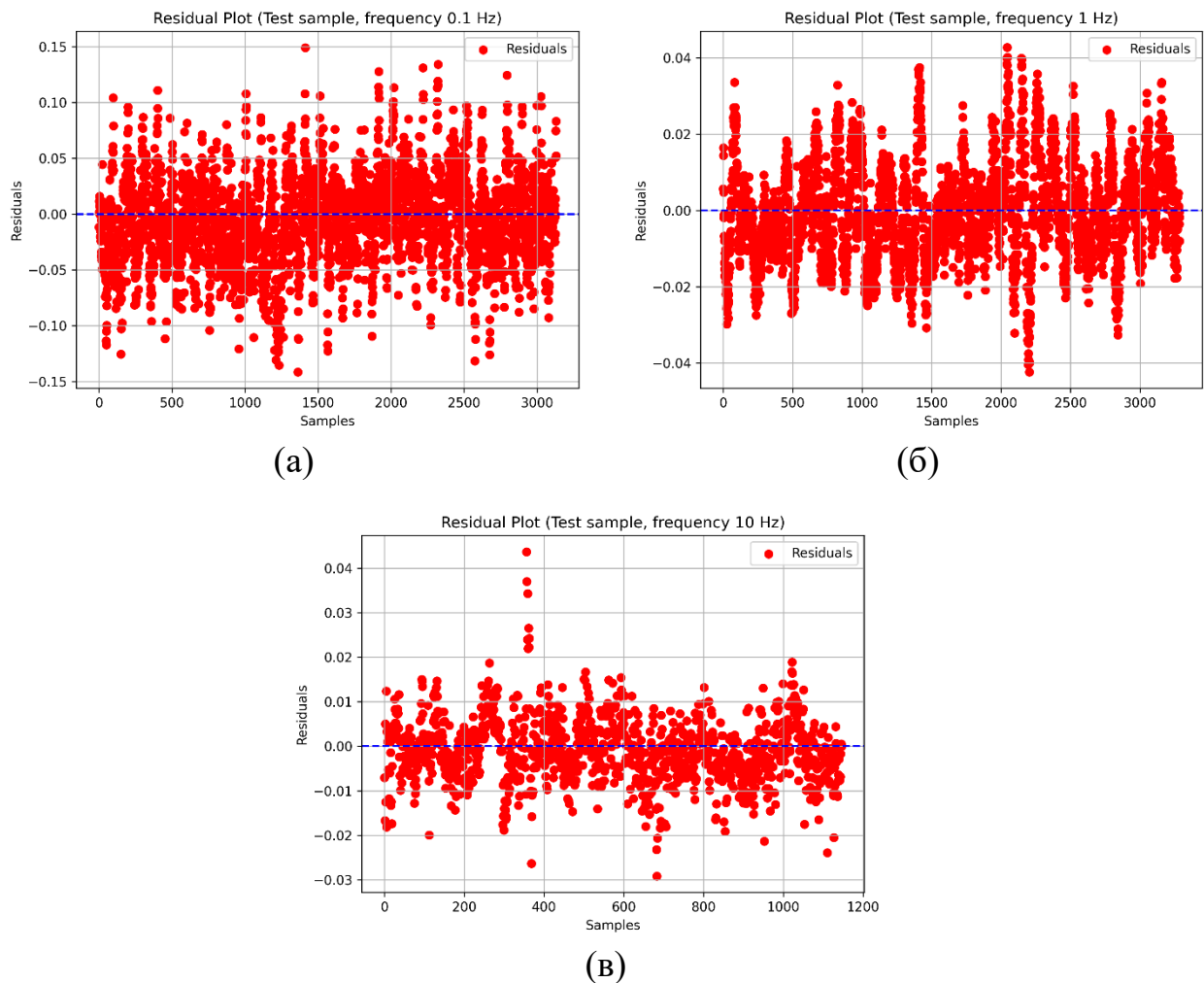


Рис. 3.39. Розподіл залишків прогнозування моделі TCN за частот циклічного навантаження 0,1 Гц (а), 1 Гц (б) та 10 Гц (в)

Аналогічні графіки побудовано і для інших досліджуваних частот циклічного навантаження. Аналіз розподілу залишків показав відсутність виражених систематичних відхилень, трендів або кластеризації похибок, що свідчить про їх переважно випадковий характер та адекватність побудованої моделі.

Результати моделювання підтверджують, що TCN-архітектура є ефективним інструментом для прогнозування нелінійної гістерезисної поведінки SMA. Модель поєднує високу точність, стабільність навчання та здатність до узагальнення в широкому діапазоні частот циклічного навантаження, що дає підстави розглядати її як перспективний підхід до прогнозування гістерезисної поведінки SMA.

### 3.6. Порівняльний аналіз точності моделей

Для узагальненого оцінювання якості побудованих моделей виконано порівняння їх точності на тестових даних за чотирма основними метриками: MSE, MAE, MAPE та  $R^2$ . До аналізу включено моделі SimpleRNN, LSTM, GRU, TCN, VotingRegressor і StackingRegressor. Порівняння проведено для семи частот циклічного навантаження. Відповідні результати графічно подано на рисунках 3.40–3.43.

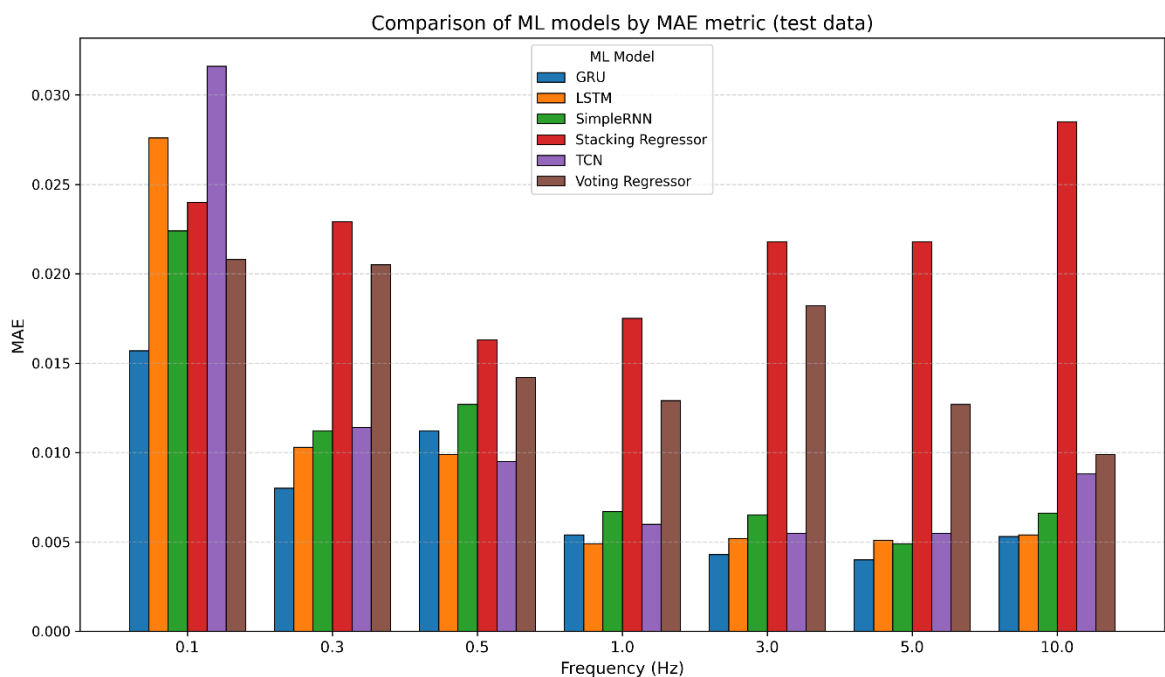


Рис. 3.40. Порівняння моделей машинного навчання за метрикою MAE на тестових даних

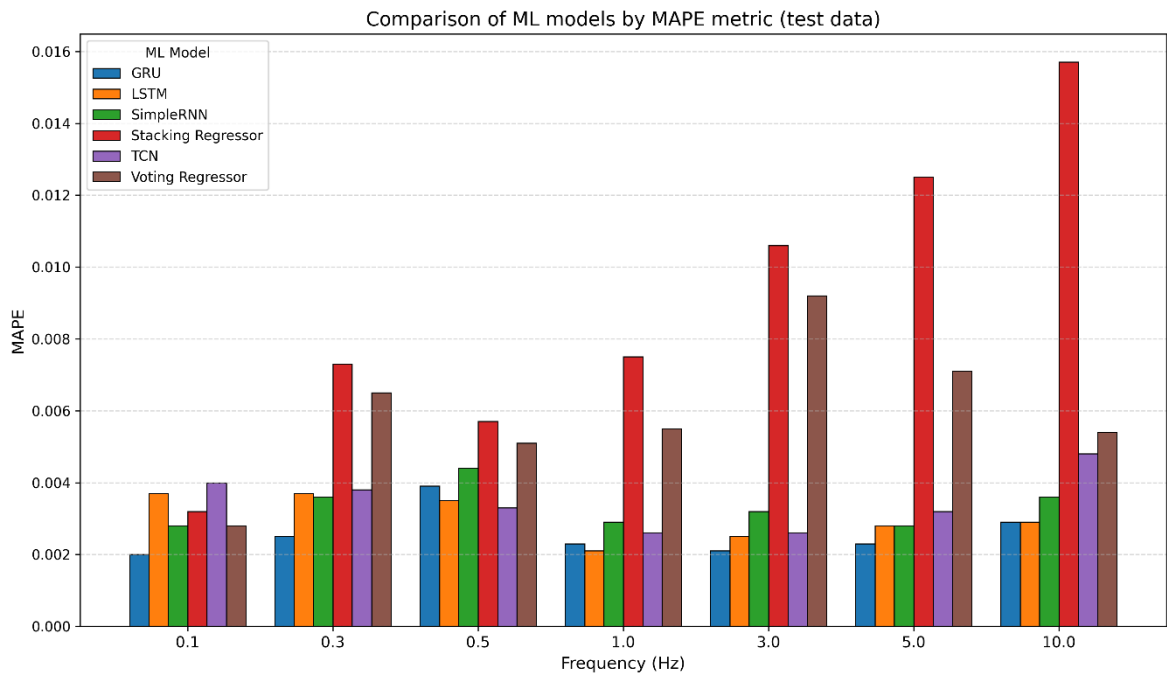


Рис. 3.41. Порівняння моделей машинного навчання за метрикою MAPE на тестових даних

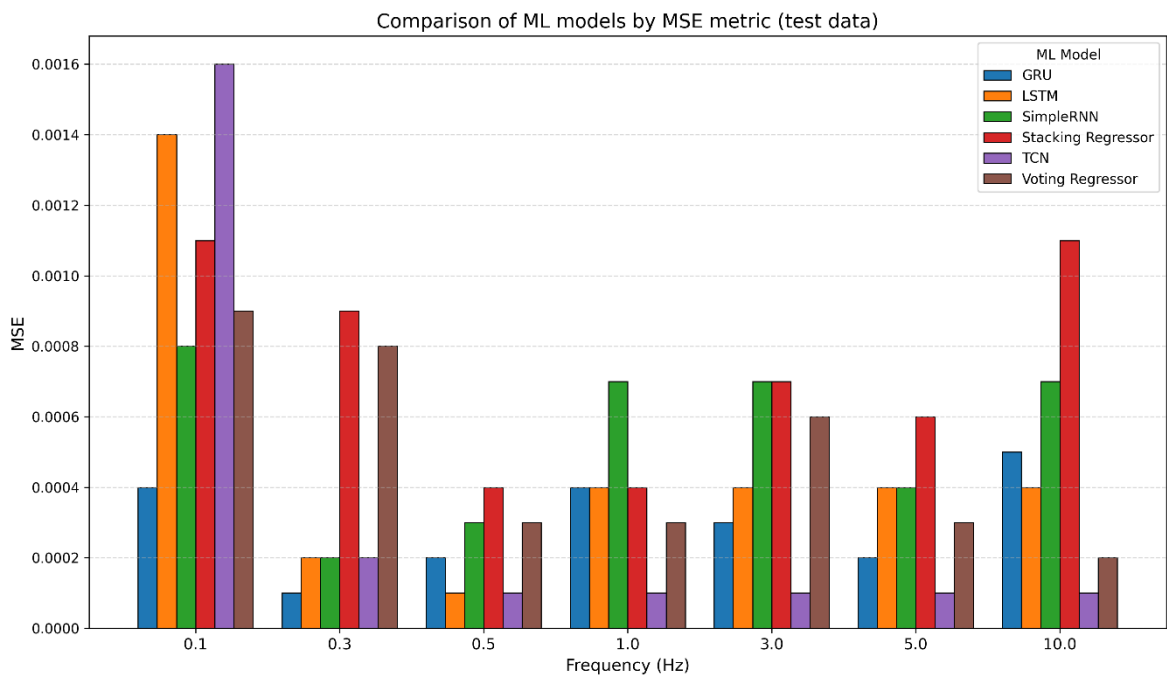


Рис. 3.42. Порівняння моделей машинного навчання за метрикою MSE на тестових даних

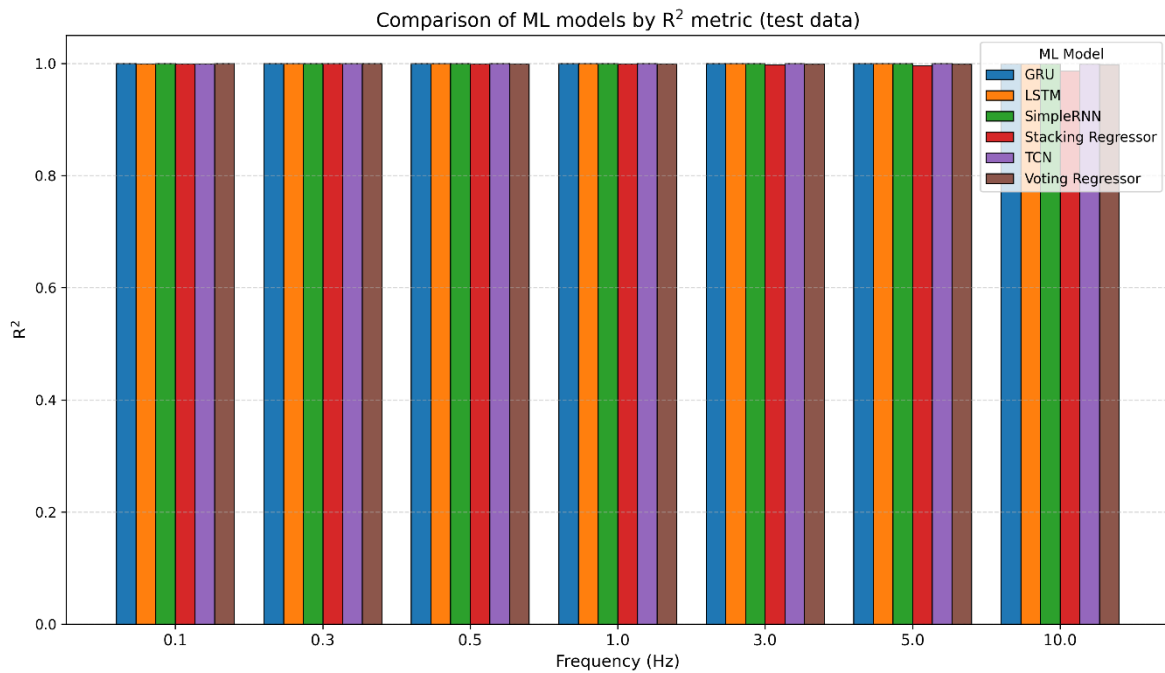


Рис. 3.43. Порівняння моделей машинного навчання за метрикою  $R^2$  на тестових даних

Отримані результати свідчать, що всі досліджувані моделі загалом забезпечують високу точність прогнозування, оскільки значення коефіцієнта детермінації  $R^2$  для всіх частот залишаються близькими до одиниці (рис. 3.43). Це підтверджує, що як ансамблеві, так і рекурентні та згорткові нейронні моделі здатні адекватно відтворювати залежність між напруженням, номером циклу, фазою навантаження-розвантаження та деформацією SMA.

Порівняння за метрикою MAE показує, що найменші середні абсолютні похибки в більшості випадків демонструють моделі GRU, LSTM та TCN (рис. 3.40). Водночас StackingRegressor і VotingRegressor у більшості частотних режимів мають дещо вищі значення цієї метрики, хоча їх точність також залишається високою в межах тестового діапазону даних.

Аналіз метрики MAPE підтверджує аналогічну тенденцію (рис. 3.41). Найменші відносні похибки характерні переважно для моделей GRU, LSTM, SimpleRNN та TCN, а StackingRegressor та VotingRegressor в окремих випадках показує вищі значення відносної похибки. Проте навіть за таких значень метрик точність прогнозування залишається високою.

За метрикою MSE найкращі результати переважно демонструють моделі глибокого навчання (рис. 3.42). Це вказує на їх здатність ефективно мінімізувати квадратичну похибку та краще відтворювати складні нелінійні залежності в експериментальних даних. Ансамблеві моделі VotingRegressor і StackingRegressor також показують високі значення точності, хоча в окремих частотних режимах поступаються рекурентним та згортковим архітектурам.

Таким чином, проведене порівняння підтвердило, що всі досліджувані моделі в межах тестового діапазону даних продемонстрували високу точність прогнозування. Незважаючи на певні відмінності між значеннями метрик, усі моделі забезпечують якісне відтворення гістерезисної поведінки SMA на тестових вибірках.

### 3.7. Висновки до розділу 3

У третьому розділі наведено результати навчання та комплексного оцінювання точності моделей машинного навчання для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми за різних частот навантаження. Показано, що застосування групового розбиття даних та групової крос-валідації GroupKFold забезпечує коректне оцінювання узагальнювальної здатності моделей і запобігає витоків інформації між циклами навантаження. На підставі одержаних результатів можна сформулювати такі висновки:

- Підтверджено відсутність аномальних даних за результатами трьох взаємодоповнювальних підходів: глобального правила  $\pm 3\sigma$ , критерію на основі міжквартильного розмаху IQR та локального rolling z-score у ковзному вікні. Це свідчить про статистичну однорідність експериментальних даних у глобальному та локальному сенсах і про їхню придатність для подальшого використання.

- Встановлено, що ансамблева модель VotingRegressor після автоматизованого підбору гіперпараметрів базових алгоритмів методом GridSearchCV забезпечує дуже високу точність на тестових даних у межах

навчального діапазону циклів 100–250. За всіма частотами отримано малі значення MSE та MAE і високі значення коефіцієнта детермінації ( $R^2 \approx 0,998 - 0,999$ ), що підтверджує здатність ансамблю відтворювати нелінійну форму петлі гістерезису. Проаналізовано вагові коефіцієнти базових моделей, сформовані за принципом  $1/\text{mean}(\text{MSE})$ , та показано, що розподіл ваг є адаптивним і змінюється залежно від частоти навантаження.

– Доведено ефективність ансамблю `StackingRegressor` із мета-моделлю `ElasticNet`. Налаштування гіперпараметрів базових моделей і параметрів регуляризації  $\alpha$  та  $l1\_ratio$  мета-моделі виконано на основі `GridSearchCV` із груповою схемою валідації. Отримані результати свідчать про високу узгодженість прогнозів із експериментальними даними для всіх частот, при цьому для низьких і середніх частот (0,1–1 Гц) досягається максимальна точність ( $R^2 \geq 0,999$ ), а для 10 Гц спостерігається незначне зниження точності ( $R^2 = 0,9869$ ). Нормалізація ваг `ElasticNet` дала можливість інтерпретувати внесок кожної базової моделі та підтвердила адаптивний характер стекінгу, з перерозподілом ваг залежно від частоти.

– З'ясовано, що рекурентні нейронні мережі `SimpleRNN`, `LSTM` та `GRU`, налаштовані методом `Hyperband`, показують дуже високі показники точності для всіх частот навантаження. Криві навчання підтверджують стабільну збіжність без ознак перенавчання завдяки застосуванню `Dropout`, адаптивного керування швидкістю навчання та механізму `EarlyStopping`. За результатами порівняння встановлено, що архітектури `GRU` та `LSTM` у середньому забезпечують дещо менші значення похибок порівняно з `SimpleRNN`, що узгоджується з їх здатністю ефективніше моделювати довготривалі залежності в послідовних даних.

– Доведено ефективність `TCN`-архітектури для моделювання гістерезисної поведінки `SMA`. Підібрані конфігурації `TCN` (кількість стеків, фільтрів, розміри ядер, `Dropout`) забезпечили низькі значення MSE та MAE і високі значення  $R^2$  (переважно близькі до 1,0) для кожної частоти. Показано, що причинні дилатовані згортки дають змогу охоплювати різні часові масштаби без

втрати часової роздільної здатності, що є важливим для коректного прогнозування петлі гістерезису.

Загалом, результати третього розділу підтверджують, що побудовані моделі машинного навчання здатні з високою точністю відтворювати залежність “напруження–деформація” в межах навчального діапазону циклів. Аналіз графіків узгодженості експериментальних і передбачених значень деформації, а також графіків залишків свідчить про відсутність значних відхилень у прогнозах і переважно випадковий характер похибок. Отримані моделі використано для подальшого дослідження їхньої екстраполяційної здатності в задачі прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам’яттю форми.

## РОЗДІЛ 4. ПРОГНОЗУВАННЯ ТА ПОЯСНЕННЯ РОБОТИ МОДЕЛЕЙ МАШИННОГО НАВЧАННЯ

Після побудови, навчання та оцінювання точності моделей машинного навчання в межах навчального діапазону даних виникає необхідність перевірити їх здатність прогнозувати гістерезисну поведінку сплавів з пам'яттю форми за межами циклів, використаних під час навчання та тестування. Така перевірка є важливою, оскільки в реальних умовах експлуатації елементи зі сплавів з пам'яттю форми працюють у режимі багаторазового циклічного навантаження, що супроводжується поступовим накопиченням функціональної втоми, зміною форми гістерезисних петель і механічних властивостей матеріалу.

У цьому розділі представлено результати екстраполяційного прогнозування гістерезисної поведінки SMA на віддалених циклах навантаження-розвантаження, що не входили до навчального діапазону даних. Основну увагу приділено аналізу узагальнювальної та екстраполяційної здатності побудованих моделей, оцінюванню точності прогнозування за метриками MSE, MAE,  $R^2$  та MAPE, а також візуальному порівнянню експериментальних і прогнозованих значень деформації та петель гістерезису. Досліджено результати прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми із застосуванням ансамблевих моделей VotingRegressor і StackingRegressor, рекурентних нейронних мереж SimpleRNN, LSTM і GRU, а також темпоральної згорткової мережі TCN. Для кожної групи моделей проаналізовано зміну точності прогнозування зі збільшенням номера циклу навантаження та залежність результатів від частоти циклічного навантаження. Важливою складовою розділу є інтерпретація отриманих прогнозів засобами пояснюваного штучного інтелекту. Для ансамблевих моделей і TCN застосовано метод SHAP, а для рекурентних нейронних мереж - метод Integrated Gradients. Це дало змогу оцінити внесок вхідних ознак, зокрема напруження, номера циклу та індикатора етапу навантаження-розвантаження, у формування прогнозованої деформації, а також оцінити фізичну узгодженість побудованих моделей.

Проведений порівняльний аналіз екстраполяційної здатності досліджених моделей дав змогу визначити найбільш ефективні методи машинного навчання для довгострокового прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми за умов циклічного навантаження.

#### **4.1. Результати застосування моделі VotingRegressor**

##### **4.1.1. Аналіз узагальнювальної та екстраполяційної здатності моделі**

Побудована ансамблева модель типу VotingRegressor забезпечила коректне відтворення складної гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми в широкому діапазоні частот циклічного навантаження [56]. З метою оцінювання здатності запропонованих ансамблевих Voting-моделей до узагальнення знань за межами навчальної та тестової вибірок проведено тестування на циклах навантаження, які не входили до початкового діапазону даних, а саме: 251, 260, 300, 350, 400, 450 та 500-му циклах.

Таке тестування спрямоване на перевірку екстраполяційної спроможності моделей, тобто їх здатності правильно прогнозувати гістерезисну поведінку SMA за умов подальшого накопичення втомних ефектів і зміни механічних властивостей матеріалу в процесі навантаження. Залучення номера циклу як незалежної вхідної змінної дало змогу врахувати узагальнений вплив історії циклічного навантаження та дослідити межі застосовності моделей у режимі екстраполяційного прогнозування за межами навчального діапазону даних.

Значення показників MSE, MAE,  $R^2$  та MAPE для семи досліджуваних частот циклічного навантаження наведено в додатку Г. Результати свідчать про високу здатність моделей до узагальнення в межах помірному виходу за діапазон навчальних циклів та про закономірне зниження точності прогнозування зі зростанням номера циклу навантаження.

Для всіх досліджуваних частот у найближчих до навчального діапазону циклах (251 та 260) спостерігається надзвичайно висока точність прогнозування:

значення коефіцієнта детермінації  $R^2$  перевищують 0,99, а середні похибки MAE та MAPE залишаються на низькому рівні. Це підтверджує, що ансамблева модель правильно відтворює гістерезисну поведінку SMA одразу після виходу за межі навчальної вибірки. Зі збільшенням номера циклу до 300–350 спостерігається поступове зростання значень MSE та MAE, однак коефіцієнт детермінації для більшості частот залишається високим ( $R^2 > 0,95$ ), що вказує на збереження адекватної форми гістерезисних петель. На цьому етапі модель демонструє стабільні результати екстраполяційного прогнозування за умов помірного накопичення втомних ефектів.

Для віддалених циклів 400–500 спостерігається вплив зміни механічних властивостей матеріалу внаслідок циклічної втоми. Основні тенденції цих змін частково відтворюються моделлю на основі закономірностей, виявлених у навчальних даних, однак точність прогнозування залишається обмеженою структурою моделі. Це призводить до зростання абсолютних та відносних похибок і зниження  $R^2$ , особливо для крайніх режимів навантаження. Найбільш різке погіршення показників спостерігається для низької частоти 0,1 Гц, де на 500-му циклі значення  $R^2$  зменшується до 0,255, що свідчить про обмежену здатність моделі прогнозувати гістерезисну поведінку SMA в умовах низькочастотного навантаження.

Водночас для середніх частот (0,5–3 Гц) ансамблева Voting-модель демонструє найкращу точність екстраполяції. Навіть на 500-му циклі коефіцієнт детермінації зберігається на рівні 0,84–0,96, а значення MAPE не перевищують 11 %. Для високих частот (5 та 10 Гц) зниження точності відбувається швидше, що пов'язано з підвищеною динамічністю процесу та зростанням ролі швидкісних ефектів, не повністю охоплених у тренувальному діапазоні з огляду на обмеження, накладені структурою моделі. Отримані результати свідчать, що запропонована ансамблева Voting-модель здатна виконувати екстраполяційне прогнозування гістерезисної поведінки SMA в обмеженому діапазоні подальших циклів навантаження-розвантаження, а отримані прогнози узгоджуються з фізичними уявленнями про зміну деформації матеріалу в умовах циклічного

навантаження. Разом з тим, зі значним віддаленням від навчального діапазону спостерігається закономірне зниження точності, що визначає практичні межі застосовності моделі та підкреслює доцільність використання моделей, орієнтованих на явне врахування часової еволюції та накопичення втомних ефектів.

На рисунку 4.1 наведено графіки узгодженості експериментальних та прогнозованих значень деформації для 251-го, 260-го та 350-го циклів навантаження, отримані за допомогою ансамблевої Voting-моделі для частоти 3 Гц.

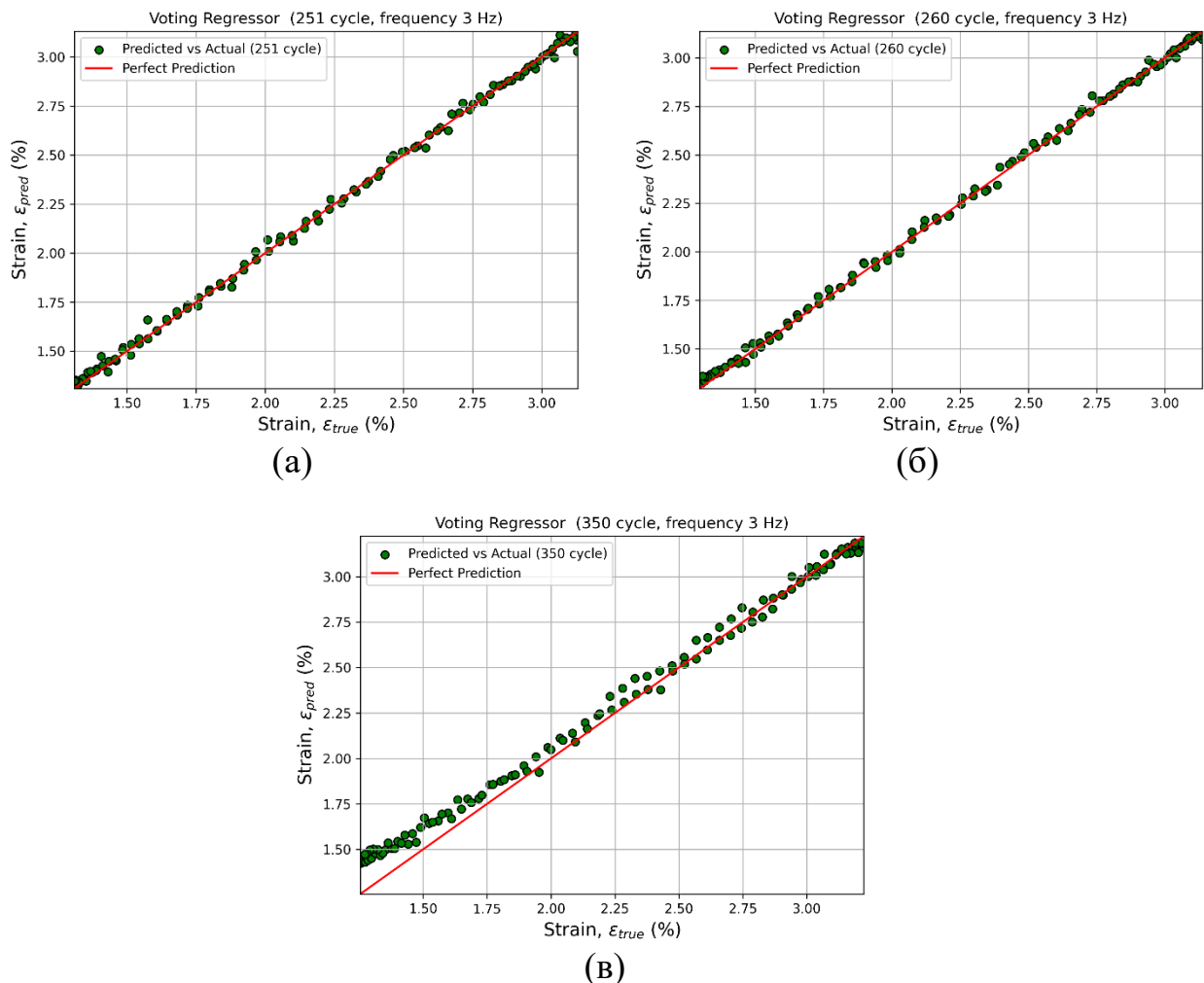


Рис. 4.1. Узгодженість експериментальних і прогнозованих значень деформації для 251-го (а), 260-го (б) та 350-го (в) циклів навантаження, отриманих ансамблевою Voting-моделлю для частоти 3 Гц

Як видно з рисунка 3.19, для 251-го та 260-го циклів навантаження спостерігається майже ідеальна відповідність між експериментальними та прогнозованими значеннями деформації. Точки розташовані вздовж бісектриси першого координатного кута, що відповідає лінії ідеального прогнозу. Це підтверджує високу точність ансамблевої Voting-моделі безпосередньо після виходу за межі навчального діапазону та свідчить про її здатність до коректного узагальнення в умовах близької екстраполяції.

Для 350-го циклу зберігається загальна лінійна залежність між експериментальними та прогнозованими значеннями деформації, однак спостерігається деяке зростання розсіювання точок відносно лінії ідеального прогнозу. Це відображає поступове накопичення втомних ефектів і зміну механічних властивостей матеріалу, які модель відтворює в межах обмежень, накладених її структурою. Водночас навіть за цих умов Voting-модель правильно відтворює загальний тренд гістерезисної поведінки SMA та зберігає високу узгодженість прогнозу з експериментом.

#### **4.1.2. Прогнозування гістерезисної поведінки**

Одне із ключових завдань цього етапу дослідження – оцінити здатність ансамблевої моделі прогнозувати петлі гістерезису ( $\sigma$ - $\epsilon$ ), що відповідають фазовим перетворенням між мартенситом та аустенітом у SMA. На рисунку 4.2 наведено порівняння експериментальних і прогнозованих кривих гістерезису для 251-го, 260-го та 350-го циклів навантаження, отриманих із використанням ансамблевої Voting-моделі при частоті циклічного навантаження 3 Гц.

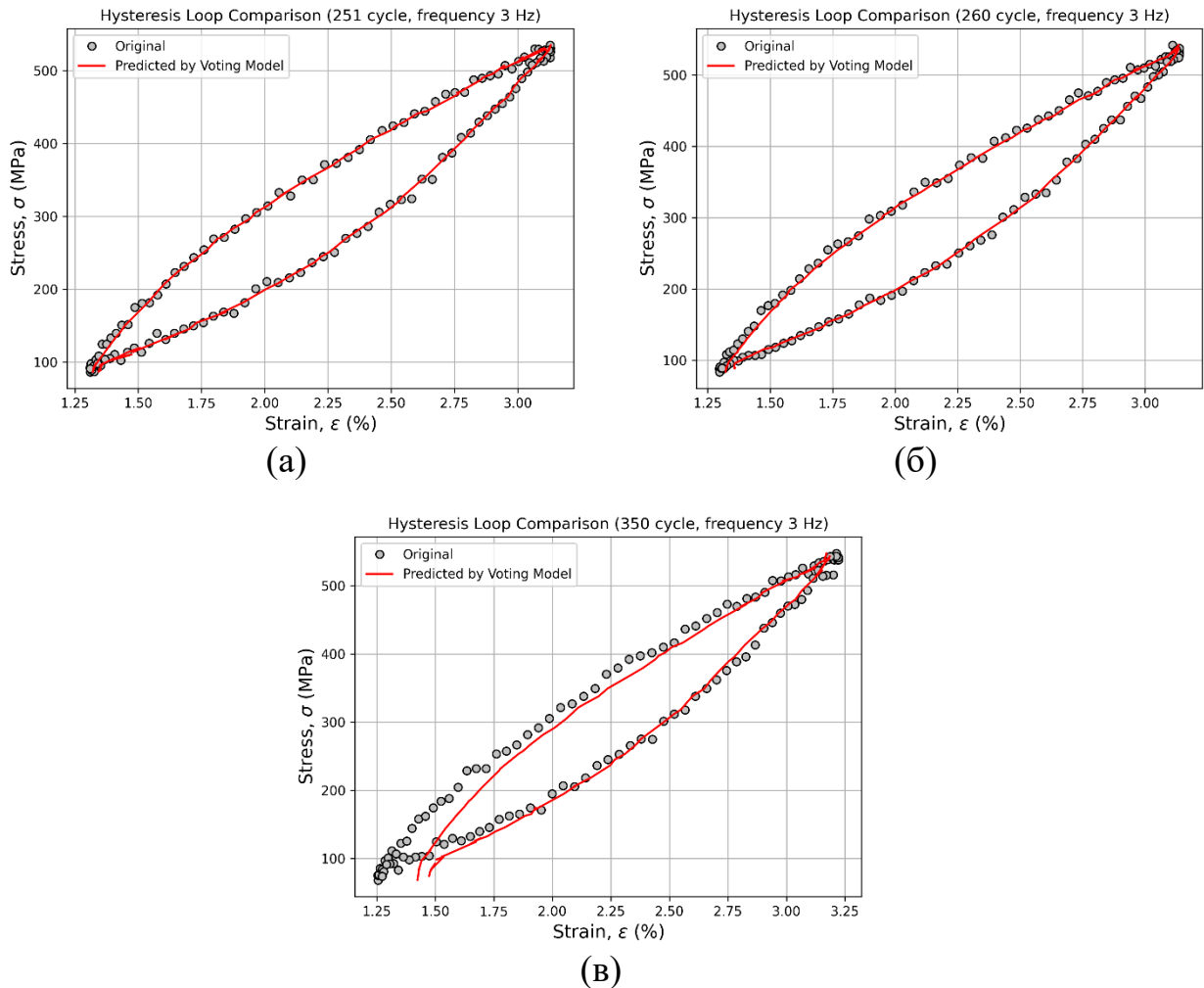


Рис. 4.2. Порівняння експериментальних і прогнозованих петель гістерезису  $\sigma$ – $\epsilon$  для 251-го (а), 260-го (б) та 350-го (в) циклів навантаження, отриманих ансамблевою Voting-моделлю для частоти 3 Гц

Як видно з рисунка 4.2, для 251-го та 260-го циклів ансамблева Voting-модель забезпечує високу узгодженість між експериментальними та прогнозованими петлями гістерезису. Модель правильно відтворює як форму петель, так і характерні ділянки навантаження та розвантаження, що відповідають фазовим перетворенням між мартенситом і аустенітом. Ширина гістерезисної петлі та положення характерних точок добре узгоджуються з експериментальними даними, що свідчить про фізичну адекватність прогнозу. Для 350-го циклу зберігається правильна загальна форма гістерезисної петлі,

однак спостерігаються локальні відхилення між експериментальними та прогнозованими кривими, насамперед у початковій ділянці навантаження. Такі розбіжності пов'язані з подальшим накопиченням втомних ефектів і еволюцією механічних властивостей матеріалу, які модель відтворює в межах обмежень, накладених її структурою.

Загалом результати, наведені на рисунку 4.2, підтверджують здатність ансамблевої Voting-моделі не лише точно прогнозувати окремі значення деформації, а й відтворювати цілісну гістерезисну поведінку SMA, включно з нелінійними ефектами та фазовими переходами, у режимі близької та помірної екстраполяції.

Отримання прогнозованої петлі гістерезису дає можливість обчислити її площу, яка відповідає енергії, що розсіюється в процесі циклічного навантаження. Хоча відтворення величини розсіюваної енергії  $E_{diss}$  є важливим для оцінки функціональної втоми та довговічності SMA-компонентів, визначальними показниками якості моделі залишаються класичні метрики регресії (MAE, MSE,  $R^2$ , MAPE). Це зумовлено тим, що навіть за близьких значень площ експериментальної та прогнозованої петель гістерезису можуть мати відхилення у відтворенні кривої  $\sigma$ - $\epsilon$ , які безпосередньо не відображаються у значенні  $E_{diss}$ . У зв'язку з цим комплексна оцінка точності моделі повинна поєднувати кількісні показники з якісним аналізом, що включає візуальне порівняння експериментальних і прогнозованих петель гістерезису, а також аналіз графіків узгодженості експериментальних і прогнозованих значень деформації. Такий підхід дає змогу виявити локальні похибки та підтвердити фізичну коректність отриманих результатів.

Хоча детальні графічні результати наведено лише для частоти 3 Гц, аналогічні експериментальні і прогнозовані петелі гістерезису, а також графіки узгодженості експериментальних і прогнозованих значень деформації отримано й для інших частот та демонструють схожі закономірності.

### 4.1.3. Локальна та глобальна інтерпретація результатів методом SHAP

Для інтерпретації роботи ансамблевої Voting-моделі застосовано метод SHAP, який дає змогу кількісно оцінити внесок кожної вхідної ознаки у прогнозоване значення деформації [56]. Використання SHAP забезпечило прозору та узгоджену інтерпретацію результатів машинного навчання як на глобальному рівні (вплив ознак у середньому по вибірці або окремому циклу), так і на локальному рівні (внесок ознак для окремого вимірювання).

Застосування SHAP-аналізу є особливо доцільним у задачах прогнозування гістерезисної поведінки SMA, оскільки він дає змогу зіставити залежності, виявлені моделлю, з фізичними уявленнями про досліджуваний процес, зокрема з впливом напруження, номера циклу та напрямку навантаження-розвантаження на величину деформації. Це сприяє підвищенню довіри до отриманих прогнозів і дає можливість оцінити їхню фізичну узгодженість.

На рисунку 4.3 наведено результати глобального аналізу важливості ознак для ансамблевої Voting-моделі, отримані на тестовому наборі даних у діапазоні 100–250 циклів.

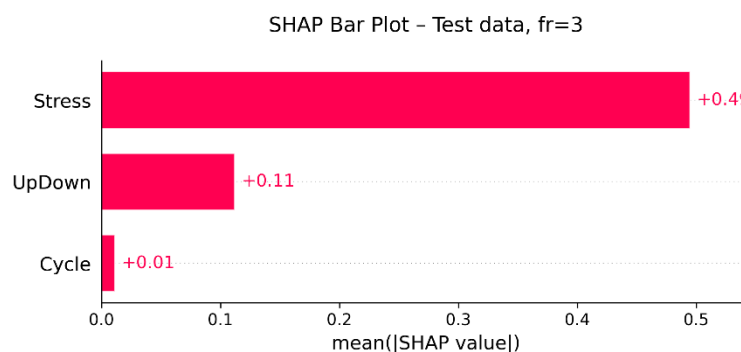


Рис. 4.3. Глобальна важливість ознак в тестових даних у діапазоні 100–250 циклів за частоти циклічного навантаження 3 Гц

Найбільший внесок у формування прогнозу забезпечує ознака Stress, середнє абсолютне значення SHAP для якої становить близько 0,49. Це свідчить

про те, що в моделі саме рівень прикладеного напруження є головним чинником, який визначає величину деформації та відображає фізичну природу процесу. Другим за значущістю є параметр UpDown із середнім внеском 0,11, що підтверджує його роль у розрізненні етапів навантаження і розвантаження, характерних для петель гістерезису. Натомість внесок ознаки Cycle у досліджуваному діапазоні є найменшим (приблизно 0,01), що свідчить про незначний вплив номера циклу на формування прогнозу в межах 100–250 циклів.

На рисунку 4.4 подано порівняльний аналіз важливості ознак на основі SHAP для 251-го, 300-го, 400-го та 500-го циклів для частоти циклічного навантаження 3 Гц, що дало можливість простежити зміну ролі ознак зі зростанням номера циклу.

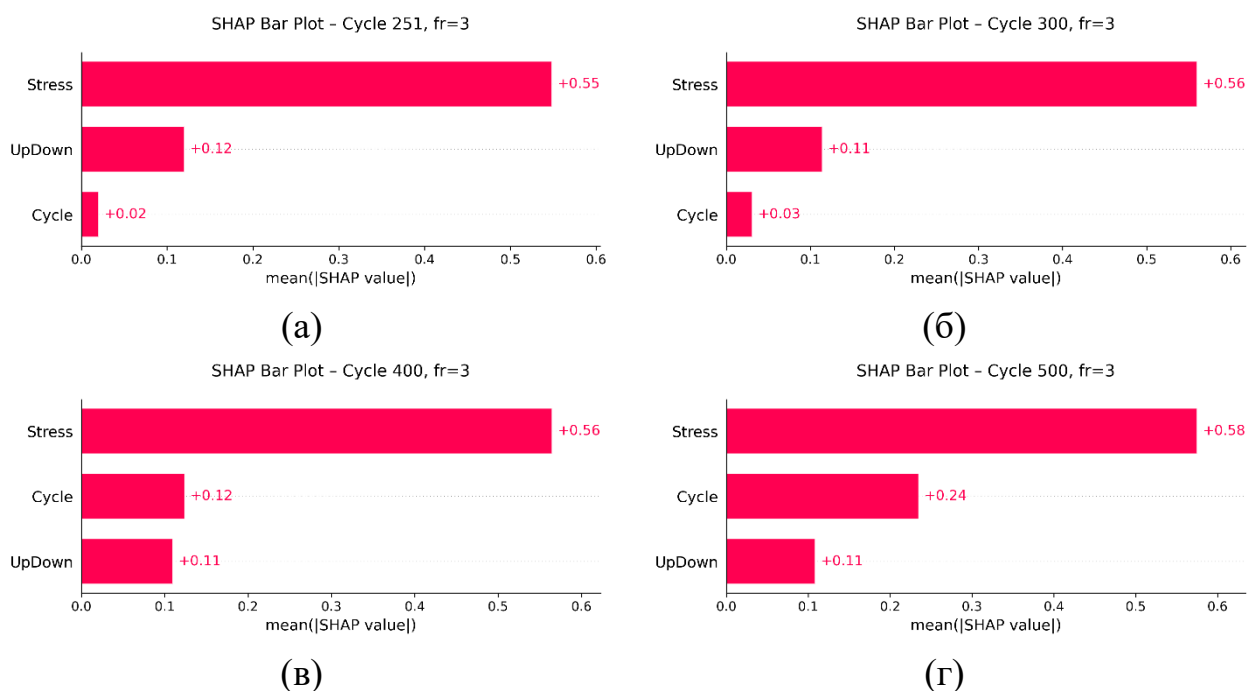


Рис. 4.4. Глобальна важливість ознак для 251-го (а), 300-го (б), 400-го (в) та 500-го (г) циклів навантаження за частоти 3 Гц

Як видно з рисунка 4.4, для 251-го та 300-го циклів навантаження структура важливості ознак практично не змінюється порівняно з глобальним SHAP-аналізом. Домінуючий внесок у прогноз забезпечує ознака Stress, середнє абсолютне значення SHAP для якої становить приблизно 0,55–0,56. Другорядну

роль відіграє параметр UpDown з внеском на рівні близько 0,11–0,12, тоді як вплив ознаки Cycle залишається мінімальним ( $\approx 0,02$ – $0,03$ ). Це свідчить про те, що в моделі в межах близької екстраполяції значення деформації визначається насамперед поточним рівнем напруження та напрямком навантаження, тоді як накопичені втомні ефекти ще не відіграють суттєвої ролі.

Для 400-го циклу спостерігається помітна зміна структури локальної важливості ознак. Хоча параметр Stress зберігає домінуючий вплив ( $\approx 0,56$ ), внесок ознаки Cycle зростає до значень, порівнянних із внеском параметра UpDown (близько 0,12). Така тенденція свідчить про поступове посилення ролі номера циклу як індикатора накопичених змін у матеріалі та проявів функціональної втоми у формуванні прогнозованої деформації.

Найбільш виражені зміни спостерігаються для 500-го циклу навантаження. У цьому випадку внесок ознаки Cycle істотно зростає (до  $\approx 0,24$ ), стаючи другим за значущістю чинником після Stress, тоді як внесок параметра UpDown залишається відносно стабільним ( $\approx 0,11$ ). Це свідчить про те, що на віддалених циклах номер циклу починає відігравати вагомішу роль у формуванні прогнозованої деформації, що узгоджується з проявами зміни механічних властивостей матеріалу внаслідок накопичення циклічної втоми.

Загалом результати локального SHAP-аналізу, наведені на рисунку 4.4, свідчать про фізичну узгодженість ансамблевої Voting-моделі. Зі зростанням номера циклу змінюється структура важливості вхідних ознак, зокрема зростає внесок ознаки Cycle у формування прогнозованої деформації. Це додатково підтверджує інтерпретованість моделі та свідчить про її здатність враховувати прояви функціональної втоми SMA під час циклічного навантаження.

На рисунку 4.5 представлено приклад локального пояснення роботи ансамблевої моделі для вимірювання № 50 з 400-го циклу.

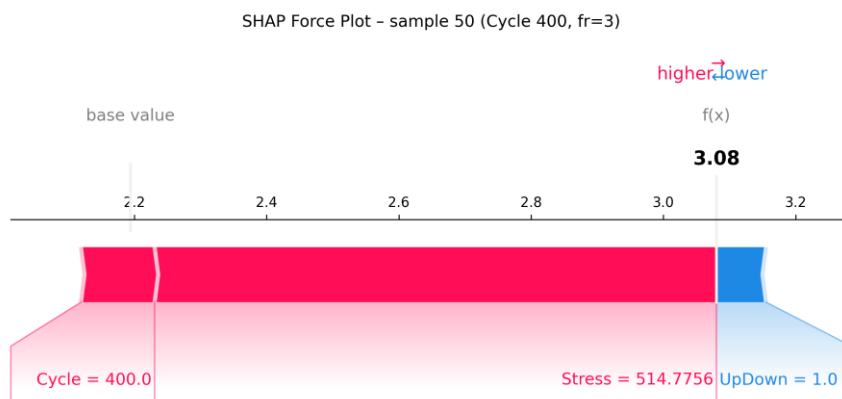


Рис. 4.5. Локальне SHAP-пояснення прогнозу ансамблевої Voting-моделі для вимірювання № 50 з 400-го циклу навантаження за частоти 3 Гц

Локальне SHAP-пояснення ілюструє процес формування прогнозованого значення деформації для окремого вимірювання шляхом послідовного додавання внесків входних ознак до базового значення моделі. Домінуючий позитивний внесок у прогноз забезпечує ознака Stress, що відповідає високому рівню прикладеного напруження та зумовлює зсув прогнозу в бік більших значень деформації. Ознака Cycle також підсилює внесок Stress, відображаючи вплив накопичених втомних ефектів на деформацію матеріалу на віддалених циклах навантаження. Натомість параметр UpDown, який характеризує напрямок навантаження, має від'ємний внесок у даному вимірюванні, що відповідає асиметрії поведінки матеріалу на етапах навантаження та розвантаження. Сукупна дія всіх ознак зумовлює зміщення прогнозу від базового значення до остаточного значення  $f(x)$ , що свідчить про інтерпретовану структуру формування прогнозу ансамблевою моделлю та дає змогу оцінити його фізичну узгодженість.

## 4.2. Результати застосування моделі **StackingRegressor**

### 4.2.1. Аналіз узагальнювальної та екстраполяційної здатності моделі

З метою оцінювання здатності запропонованих ансамблевих моделей на основі **StackingRegressor** до узагальнення знань за межами діапазону навчальних даних проведено тестування на окремих циклах навантаження, які не входили до початкового тестового діапазону даних [58,59]. Значення основних показників точності регресійного прогнозування для семи досліджуваних частот циклічного навантаження наведено в додатку Д.

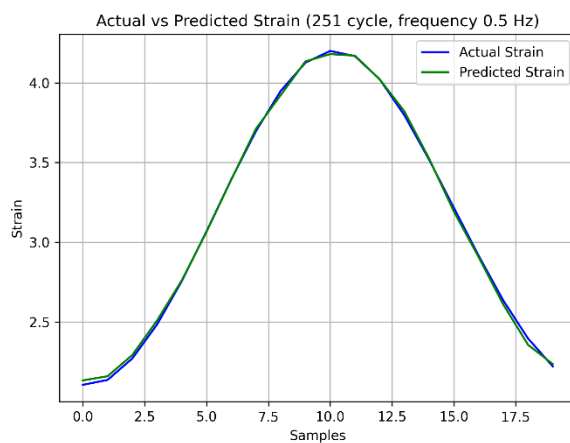
Отримані значення метрик точності для ансамблевих **Stacking**-моделей при екстраполяційному прогнозуванні на 251, 260, 300, 350, 400, 450 та 500-му циклах та для семи частот циклічного навантаження, наведених у таблицях Д.1–Д.7, дають змогу здійснити комплексну оцінку узагальнювальної здатності моделей з урахуванням як номеру циклу, так і частоти навантаження.

Для низьких частот циклічного навантаження (0,1 та 0,3 Гц) модель показує високу точність прогнозування на циклах, близьких до навчального діапазону (251 та 260), що підтверджується дуже малими значеннями **MSE** та **MAE**, а також коефіцієнтом детермінації  $R^2$ , близьким до одиниці. Проте зі збільшенням номера циклу спостерігається значне погіршення якості прогнозування, особливо для частоти 0,1 Гц, де на 500-му циклі  $R^2$  знижується до 0,71, а значення **MAE** та **MAPE** зростають більш ніж у десять разів порівняно з початковими екстраполяційними циклами. Для середніх частот (0,5 та 1 Гц) ансамблева **Stacking**-модель демонструє найбільш стабільні екстраполяційні властивості. Навіть для віддалених циклів (400–500) значення коефіцієнта детермінації залишаються на рівні  $R^2 > 0,95$ , а абсолютні та відносні похибки зростають поступово. Для підвищених частот циклічного навантаження (3 та 5 Гц) також спостерігається задовільна узгодженість прогнозованих і експериментальних значень на циклах до 300–350, після чого якість прогнозування поступово знижується. При цьому навіть на 500-му циклі

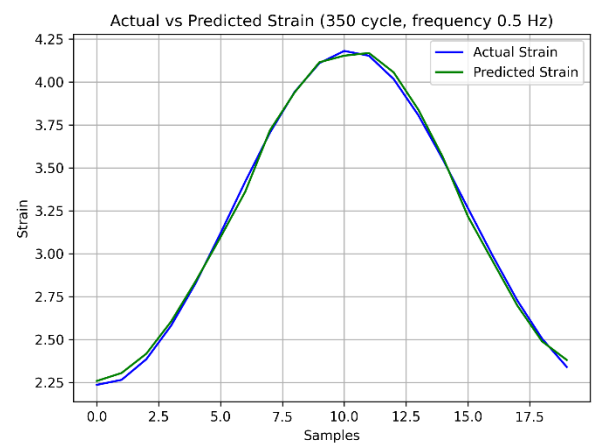
значення  $R^2$  перевищують 0,94, що підтверджує здатність моделі зберігати адекватний рівень узгодженості в умовах зростання динамічності процесу деформування. Найбільш складні умови для екстраполяційного прогнозування реалізуються при частоті 10 Гц. Для цієї частоти вже на 300–350-му циклах спостерігається помітне зниження коефіцієнта детермінації, а на 500-му циклі  $R^2$  зменшується до 0,73 при одночасному зростанні MAE та MAPE. Така тенденція свідчить про обмеження застосовності побудованої Stacking-моделі в умовах високочастотного навантаження.

Загалом аналіз метрик точності свідчить, що ансамблева Stacking-модель характеризується високою здатністю до узагальнення та екстраполяційного прогнозування в широкому діапазоні частот і номерів циклів. Водночас поступове зниження точності прогнозування для віддалених циклів і високих частот є очікуваним, оскільки відображає обмеження екстраполяційної здатності моделі за умов накопичення втомних ефектів і зміни властивостей матеріалу. Це підтверджує доцільність застосування Stacking-підходу для прогнозування гістерезисної поведінки SMA, а також окреслює межі його застосовності в задачах екстраполяційного прогнозування.

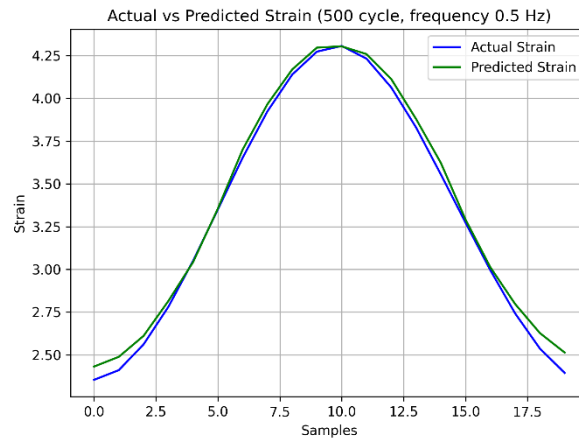
На рисунку 4.6 наведено графіки узгодженості експериментальних та прогнозованих значень деформації для 251-го, 350-го та 500-го циклів навантаження, отримані за допомогою ансамблевої Stacking-моделі для частоти 0,5 Гц.



(a)



(б)



(В)

Рис. 4.6. Узгодженість експериментальних і прогнозованих значень деформації для 251-го (а), 350-го (б) та 500-го (в) циклів навантаження, отриманих ансамблевою Stacking-моделлю для частоти 0,5 Гц

Представлені результати дають можливість виконати якісний аналіз екстраполяційної здатності моделі та порівняти його з кількісними показниками точності. Для 251-го циклу, який є найближчим до навчального діапазону, спостерігається майже повна узгодженість експериментальної та прогнозованої кривих деформації на всіх етапах навантаження і розвантаження. Модель правильно відтворює як зростання деформації до максимального значення, так і подальше зниження, що свідчить про адекватне відтворення форми гістерезисної петлі та узгоджується з високими значеннями коефіцієнта детермінації ( $R^2 \approx 0,999$ ). Для 350-го циклу також зберігається висока ступінь узгодженості між експериментальними та прогнозованими даними. Незначні відхилення фіксуються переважно в околі максимуму деформації (ділянках переходу між фазами навантаження і розвантаження), однак загальна форма кривої, положення пікових значень і симетрія процесу відтворюються з високою точністю. Це підтверджує здатність Stacking-моделі до стабільного узагальнення за умов помірної екстраполяції. Для 500-го циклу, який значно віддалений від навчального інтервалу, спостерігається помітніше зростання розбіжностей між

експериментальною та прогнозованою деформацією, особливо на початкових і кінцевих ділянках циклу. Водночас модель зберігає коректне відтворення загальної форми кривої та положення максимальних значень деформації. Такий характер похибок є фізично обґрунтованим і пов'язаним з накопиченням внутрішніх ефектів та зміною механічних властивостей матеріалу, які ускладнюють точне прогнозування для далеких екстраполяційних циклів.

Загалом візуальний аналіз графіків узгодженості підтверджує результати кількісного оцінювання точності та демонструє, що ансамблева Stacking-модель здатна адекватно відтворювати гістерезисну поведінку SMA як у межах діапазону навчальних даних, так і в режимі екстраполяційного прогнозування.

#### **4.2.2. Прогнозування гістерезисної поведінки**

Побудованими ансамблевими Stacking-моделями відтворено гістерезисну поведінку сплаву з пам'яттю форми під час циклічного навантаження. На основі вхідних параметрів (напруження матеріалу  $\sigma$ , номера циклу навантаження–розвантаження  $N$  та індикатора етапу процесу (навантаження/розвантаження)) модель здійснює прогноз миттєвого значення деформації матеріалу  $\epsilon$ . Така постановка задачі дає можливість відтворювати повну петлю гістерезису в координатах  $\sigma$ – $\epsilon$  та аналізувати її еволюцію в умовах циклічного навантаження.

На рисунку 4.7 наведено порівняння експериментальних і прогнозованих ансамблевою Stacking-моделлю петель гістерезису для 251-го, 350-го та 500-го циклів при частоті навантаження 0,5 Гц.

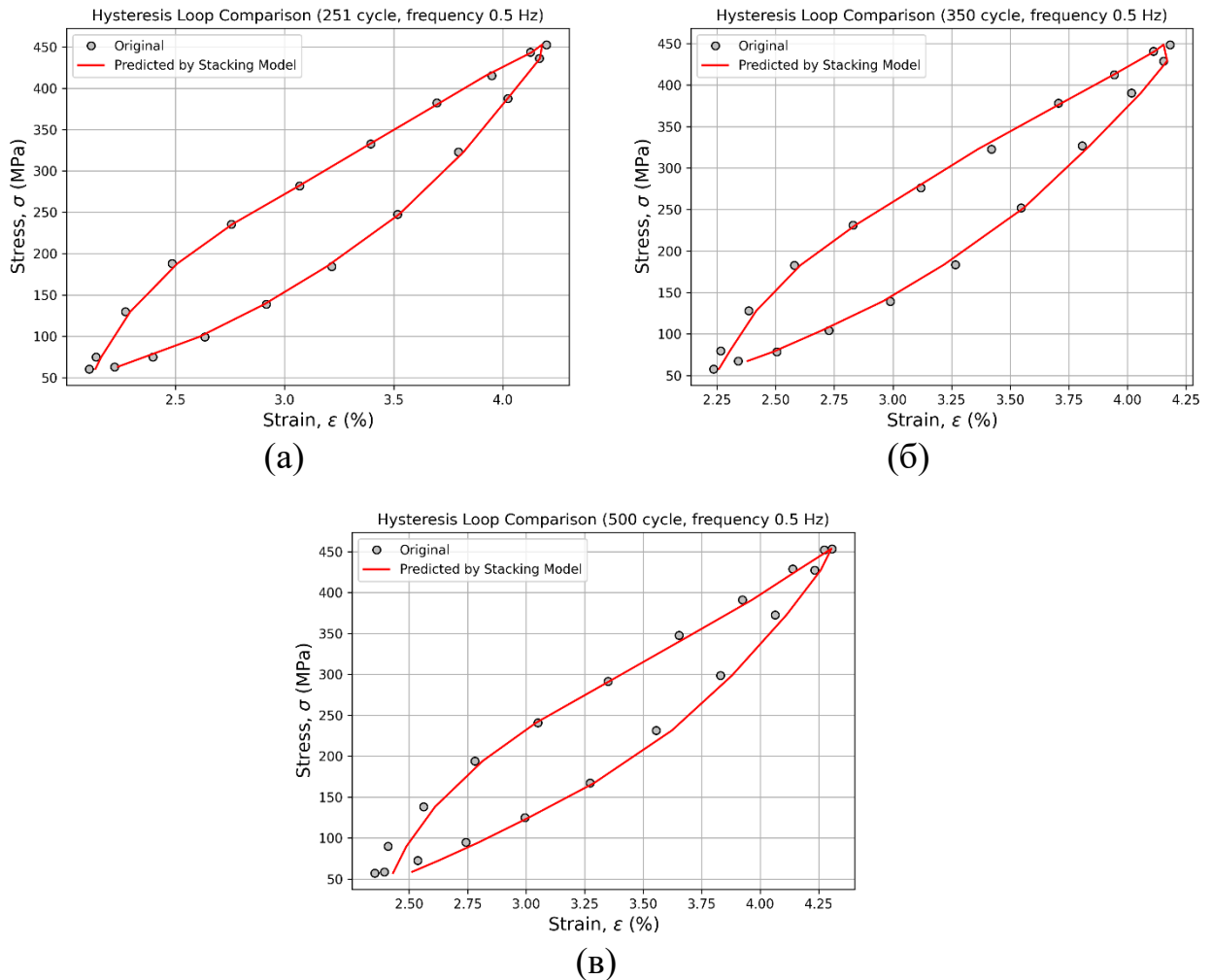


Рис. 4.7. Порівняння експериментальних і прогнозованих петель гістерезису  $\sigma$ – $\epsilon$  для 251-го (а), 350-го (б) та 500-го (в) циклів навантаження, отриманих ансамблевою Stacking -моделлю для частоти 0,5 Гц

Для 251-го циклу, який є найближчим до навчального діапазону, спостерігається майже повна відповідність прогнозованої та експериментальної петель. Модель правильно відтворює як форму петлі, так і характерні значення напружень і деформацій на етапах навантаження та розвантаження, що свідчить про точний опис фазових перетворень і узгоджується з високими значеннями показників точності. Для 350-го циклу також зберігається висока якість відтворення гістерезисної поведінки. Незначні розбіжності між експериментальною та прогнозованою петлями спостерігаються переважно в

області середніх деформацій і на переходах між гілками навантаження та розвантаження. Водночас загальна форма петлі, її нахил та положення характерних точок відтворюються правильно, що підтверджує здатність Stacking-моделі до стабільного узагальнення за умов помірної екстраполяції. Для 500-го циклу, який істотно віддалений від навчального інтервалу, спостерігається зростання відхилень між прогнозованою та експериментальною петлями, зокрема на початкових і кінцевих ділянках циклу. Разом із тим, модель зберігає правильну топологічну структуру гістерезисної петлі (замкненість і розходження гілок) та забезпечує її геометричну відповідність експериментальній кривій. Таке зростання похибок є очікуваним для віддалених циклів.

Загалом результати прогнозування гістерезисних петель свідчать, що ансамблева Stacking-модель здатна з високою точністю відтворювати миттєві значення деформації та загальну форму гістерезисної петлі в координатах  $\sigma$ – $\epsilon$ . Це робить запропонований підхід придатним для аналізу зміни гістерезисної поведінки матеріалу та подальшого оцінювання похідних характеристик, зокрема площі петлі гістерезису, яка відповідає енергії, розсіяній у процесі циклічного навантаження.

#### **4.2.3. Локальна та глобальна інтерпретація результатів методом SHAP**

Для інтерпретації роботи ансамблевої Stacking-моделі застосовано метод SHAP, який дає можливість кількісно оцінити внесок кожної вхідної ознаки у прогнозоване значення деформації. Аналіз виконано з використанням алгоритму KernelExplainer, що забезпечує універсальність застосування до нелінійних моделей і ансамблів [58]. З метою зменшення обчислювальної складності фонову вибірку (background data) обмежено підмножиною з 400 вимірювань, сформованих із навчальних даних. Оцінювання здійснено для набору ознак Stress, Cycle та UpDown.

На рисунку 4.8 наведено результати глобального аналізу важливості ознак для ансамблевої Stacking-моделі, отримані на тестовому наборі даних у діапазоні 100–250 циклів для частоти циклічного навантаження 0,5 Гц.

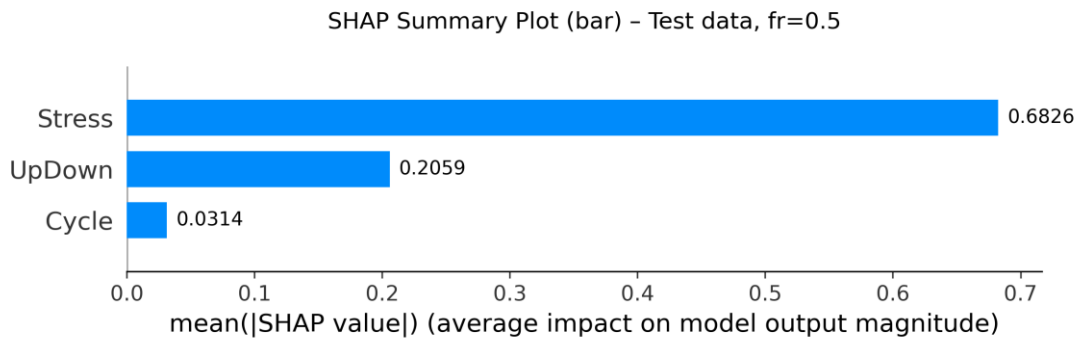
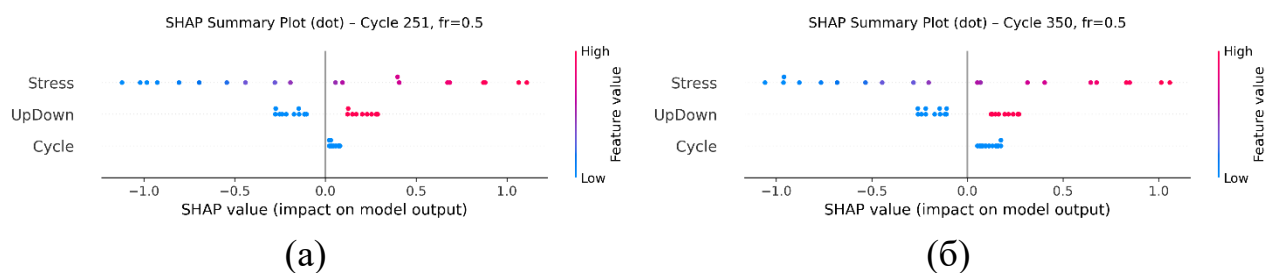
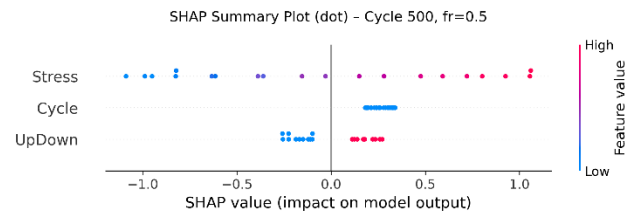


Рис. 4.8. Глобальна важливість ознак для ансамблевої Stacking-моделі на тестовому наборі даних у діапазоні циклів 100–250 за частоти циклічного навантаження 0,5 Гц

Отримані SHAP-результати підтверджують, що ансамблева Stacking-модель формує прогнози на основі фізично змістовних залежностей між напруженням, фазовим навантаження-розвантаження та історією навантаження.

На рисунку 4.9 наведено SHAP-summary (точкові) діаграми для 251-го, 350-го та 500-го циклів навантаження для частоти 0,5 Гц, які відображають розподіл локальних внесків окремих ознак у прогноз деформації. Представлені діаграми дають можливість простежити зміну ролі вхідних параметрів у моделі в процесі накопичення циклічної втоми.





(в)

Рис. 4.9. SHAP-summary (точкові) діаграми для 251-го (а), 350-го (б) та 500-го (в) циклів навантаження за частоти 0,5 Гц

Для 251-го циклу домінуючим чинником залишається напруження (Stress), для якого спостерігається широкий діапазон SHAP-значень як додатного, так і від'ємного знаку. Це свідчить про визначальний вплив рівня прикладеного навантаження на миттєве значення деформації, що є фізично очікуваним для SMA. Ознака UpDown також показує значний, але менш інтенсивний вплив, відображаючи різницю між гілками навантаження та розвантаження в межах гістерезисної петлі. Вплив параметра Cycle у цьому діапазоні є мінімальним і зосередженим поблизу нульових SHAP-значень, що узгоджується з незначним проявом накопичених змін у матеріалі на першому циклі після навчального діапазону. Для 350-го циклу зберігається провідна роль ознаки Stress, однак спостерігається помірне зростання внеску параметра Cycle. Розподіл SHAP-значень для цієї ознаки зміщується в додатну область, що свідчить про поступове посилення ролі номера циклу як індикатора накопичених змін у матеріалі. Це узгоджується з фізичними уявленнями про накопичення мікроструктурних змін і проявів функціональної втоми зі збільшенням кількості циклів навантаження-розвантаження. Для 500-го циклу тенденція до зростання ролі параметра Cycle стає ще більш вираженою. Його SHAP-внесок демонструє систематичний позитивний вплив на прогнозовану деформацію, що узгоджується з посиленням проявів функціональної втоми матеріалу на віддалених циклах навантаження-розвантаження. Водночас ознака Stress зберігає домінуючу позицію, що свідчить про визначальну роль механічного навантаження у формуванні прогнозу. Вплив UpDown залишається відносно стабільним.

Таким чином, аналіз SHAP-summary діаграм показує фізично узгоджену зміну впливу вхідних ознак зі зростанням номера циклу. Модель поступово переходить від домінування миттєвого навантаження до більшого врахування історії циклічного деформування, що узгоджується з проявами функціональної втоми у сплавах з пам'яттю форми. Отримані результати підтверджують інтерпретованість ансамблевої Stacking-моделі та свідчать про узгодженість її прогнозів із фізичними уявленнями про формування гістерезисної поведінки SMA.

На рисунку 4.10 представлено приклад локального пояснення прогнозу ансамблевої Stacking-моделі для вимірювання № 19 з 300-го циклу навантаження за частоти 0,5 Гц, отриманий за допомогою SHAP force-діаграми. Діаграма ілюструє, яким чином внески окремих вхідних ознак формують підсумкове прогнозоване значення деформації, відштовхуючись від базового значення моделі.

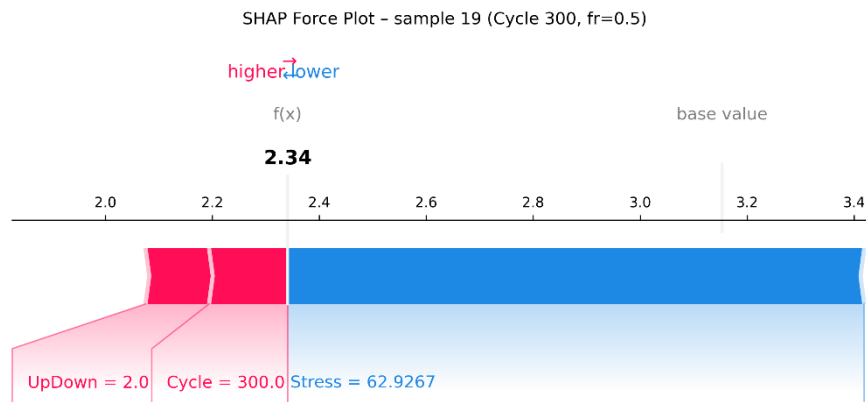


Рис. 4.10. Локальне SHAP-пояснення прогнозу ансамблевої Stacking-моделі для вимірювання № 19 з 300-го циклу навантаження за частоти 0,5 Гц

Як видно з рисунка 4.10, параметр Stress має домінуючий негативний SHAP-внесок, зміщуючи прогнозоване значення деформації у бік зменшення відносно базового рівня. Це є фізично обґрунтованим для даного вимірювання, оскільки низький рівень прикладеного напруження відповідає меншій миттєвій деформації матеріалу (етап розвантаження). Натомість параметри UpDown та

Cycle роблять додатний внесок у прогноз, частково компенсуючи вплив напруження. Позитивний внесок UpDown відображає фазу розвантаження та асиметрію гістерезисної поведінки, тоді як внесок Cycle характеризує вплив накопичених змін у матеріалі, пов'язаних із циклічним навантаженням. У результаті сукупної дії зазначених факторів модель формує прогноз деформації, що узгоджується з фізичними уявленнями про процес деформування SMA та відповідає експериментальним спостереженням. Представлений приклад підтверджує, що ансамблева Stacking-модель не лише забезпечує високу точність прогнозування, а й дає змогу інтерпретувати окремі прогнози з погляду фізичного змісту вхідних параметрів.

### **4.3. Результати застосування рекурентних нейронних мереж**

#### **4.3.1. Аналіз узагальнювальної та екстраполяційної здатності моделей**

Для оцінювання здатності розроблених рекурентних нейронних мереж узагальнювати виявлені залежності за межами навчального та тестового діапазонів виконано тестування на циклах навантаження-розвантаження 251, 260, 300, 350, 400, 450 та 500, які не входили до діапазону навчальних даних. Таке тестування мало на меті перевірку екстраполяційної спроможності моделей, тобто їх здатності прогнозувати гістерезисну поведінку сплаву при подальшому накопиченні втомних ефектів [44].

Значення показників MSE, MAE,  $R^2$  та MAPE для трьох архітектур і семи частот навантаження наведено в додатку Е. Отримані результати свідчать про високу точність прогнозування в області, найближчій до навчальної вибірки (251 та 300 цикли), та про поступове зростання похибок зі збільшенням номера циклу. Підвищення похибок під час екстраполяції на віддалені цикли (>300) не є прямим недоліком архітектури нейронних мереж, а є наслідком фізично обумовленої деградації матеріалу, пов'язаної з накопиченням втомних ефектів, які виходять за межі інформації, доступної моделі на етапі навчання.

Для частоти 0,1 Гц (таблиця Е.1) усі моделі точно відтворювали петлі гістерезису до 300 циклу. Починаючи з 350 циклу, точність SimpleRNN і GRU різко знижувалася, тоді як LSTM утримувала прийнятну точність ( $R^2 = 0,9244$ ,  $MAE \approx 0,1672$  для 400 циклу) і показала найвищу здатність до екстраполяції, залишаючись коректною до 500 циклу. Для частоти 0,1 Гц процеси деформування відбуваються повільніше, що призводить до найбільш вираженої гістерезисної поведінки матеріалу. Гістерезис за своєю природою є процесом із “пам’яттю”, де поточний стан системи залежить від усієї попередньої історії навантаження. Зі збільшенням кількості циклів (після 350-го) накопичена похибка в моделях, що погано працюють з довготривалими залежностями, стає критичною. SimpleRNN має найпростішу структуру і найбільш вразлива до проблеми зникнення градієнта. При великій кількості циклів (довга послідовність даних) мережа “забуває” інформацію з ранніх етапів. Хоча GRU ефективніше керує потоками даних за допомогою update gate та reset gate, вона має спрощену архітектуру, де стан прихованого шару та пам’ять об’єднані. При складній, сильно вираженій гістерезисній поведінці на віддалених циклах (після 350-го) GRU не здатна розділити короткострокові коливання та довгострокову деградацію матеріалу. LSTM спеціально розроблено для вирішення проблем довгострокових залежностей завдяки наявності окремого стану комірки (cell state), який відіграє роль “конвеєра” пам’яті. Механізм forget gate дає можливість LSTM вибірково відкидати несуттєву інформацію, зберігаючи при цьому ключові ознаки зміни деформації протягом сотень циклів. Саме наявність окремого стану комірки (який відсутній у SimpleRNN та GRU) дає можливість LSTM підтримувати стабільний градієнт протягом тривалого часу, що є вирішальним для точного прогнозування стабільної петлі гістерезису при низькочастотному навантаженні.

За частоти 0,3 Гц (таблиця Е.2) усі архітектури зберігали високу точність прогнозування у всьому діапазоні. Найменші похибки показала модель LSTM, яка стала оптимальною для цієї частоти. Для частоти 0,5 Гц (таблиця Е.3) точність залишалася стабільно високою до 450 циклу. На 500-му циклі LSTM

продемонструвала найкращі результати ( $R^2 = 0,9912$ , MAE = 0,0572). Отже, LSTM є найефективнішою для цієї частоти. За частоти 1 Гц (таблиця Е.4) усі моделі показали відмінну узгодженість із експериментальними даними до 400 циклу. Із подальшим збільшенням циклів точність дещо зменшувалася, однак LSTM зберегла найвищі показники ( $R^2 = 0,9976$ , MAE = 0,0282 для 500 циклу). Для частоти 3 Гц (таблиця Е.5) усі моделі демонстрували високу точність прогнозу, проте LSTM забезпечила найменші похибки та найстабільнішу збіжність ( $R^2 = 0,9867$ , MAE = 0,0629 для 500 циклу). Модель GRU мала подібну точність, але дещо більшу варіацію похибки на далеких циклах. Таким чином, найкращою для 3 Гц є LSTM. Для частоти 5 Гц (таблиця Е.6) найкращі результати для 500-го циклу отримано за допомогою моделі GRU ( $R^2 = 0,9805$ , MAE = 0,0614). Водночас модель LSTM також продемонструвала достатньо високі показники точності прогнозування ( $R^2 = 0,9510$ , MAE = 0,1137), що свідчить про її здатність до екстраполяційного прогнозування за цієї частоти навантаження. При найвищій частоті 10 Гц (таблиця Е.7) усі моделі утримували високу точність у межах перших екстрапольованих циклів (251–350), однак на віддалених циклах точність знижувалася. Найстабільніші результати продемонструвала модель LSTM ( $R^2 = 0,9979$ , MAE = 0,0153, MAPE = 0,8 % для 500 циклу).

Узагальнюючи результати для всіх частот, можна зробити такі висновки:

- LSTM показала найвищу стабільність і точність екстраполяції для частот 0,1–3 Гц та 10 Гц;
- GRU виявилася оптимальною для частоти 5 Гц;
- SimpleRNN забезпечує прийнятну точність лише в межах навчального діапазону, однак втрачає узгодженість при далекій екстраполяції (понад 350 цикл).

Таким чином, моделі LSTM та GRU підтвердили високу узагальнювальну здатність і екстраполяційну надійність при прогнозуванні гістерезисної поведінки SMA під циклічним навантаженням, що робить їх придатними для довгострокового прогнозування.

На рисунку 4.11 наведено графіки узгодженості експериментальних та прогнозованих значень деформації для 251-го, 300-го, 400-го та 500-го циклів навантаження, отримані за допомогою LSTM-моделі для частоти 0,3 Гц.

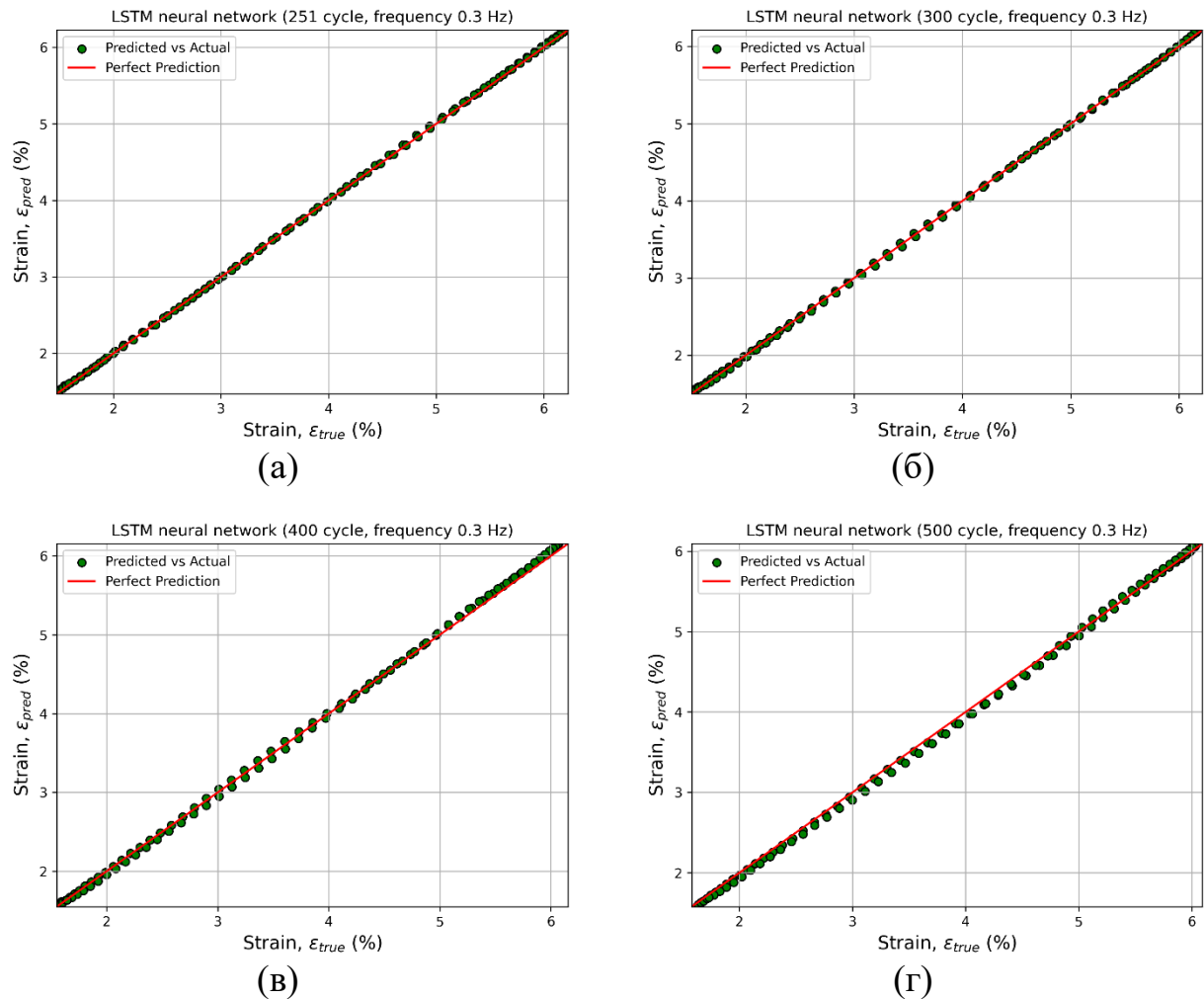


Рис. 4.11. Узгодженість експериментальних і прогнозованих значень деформації для 251-го (а), 300-го (б), 400-го (в) та 500-го (г) циклів навантаження, отриманих за допомогою LSTM-моделі для частоти 0,3 Гц

Аналіз графіків узгодженості свідчить про практично лінійну залежність між експериментальними та прогнозованими значеннями деформації, що підтверджується розташуванням точок уздовж лінії ідеального прогнозу. Для 251-го та 300-го циклів спостерігається майже повне накладання результатів, що

характеризує високу точність моделі в області, близькій до навчального діапазону. Навіть для віддалених циклів (400 та 500) відхилення залишаються незначними та не мають вираженого систематичного характеру, що свідчить про збереження узгодженості та точності прогнозу. Аналогічні графіки побудовано для решти частот навантаження. Для всіх моделей спостерігається висока ступінь узгодженості експериментальних і прогнозованих значень у межах циклів, близьких до навчального діапазону, що підтверджується концентрацією точок уздовж лінії ідеального прогнозу. Із збільшенням номера циклу відхилення поступово зростають. Такий характер розподілу свідчить про збереження узгодженості прогнозу та підтверджує здатність рекурентних нейронних мереж адекватно відтворювати зміну гістерезисної поведінки сплаву за умов подальшого циклічного навантаження.

#### **4.3.2. Прогнозування гістерезисної поведінки**

Для всіх досліджених частот навантаження та для кожної з розглянутих архітектур рекурентних нейронних мереж побудовано експериментальні та прогнозовані гістерезисні петлі. Таке графічне представлення дало змогу здійснити візуальне порівняння геометрії прогнозованих петель із відповідними експериментальними залежностями, а також оцінити здатність моделей правильно відтворювати фазові переходи між мартенситною та аустенітною фазами і динаміку накопичення втомних ефектів у процесі циклічного навантаження.

На рисунках 4.12 та 4.13 наведено приклад порівняння експериментальних та прогнозованих гістерезисних петель, побудованих за допомогою моделі LSTM для циклів 251, 260, 300, 350, 400, 450 та 500 для частоти навантаження 0,3 Гц.

Для циклів 251 та 260 спостерігається практично повне накладання прогнозованої та експериментальної кривих по всій траєкторії навантаження та розвантаження. У межах 300–350 циклів форма петель залишається правильно

відтвореною, з незначними локальними відхиленнями в областях максимальних напружень, що не призводять до суттєвого спотворення геометрії петлі.

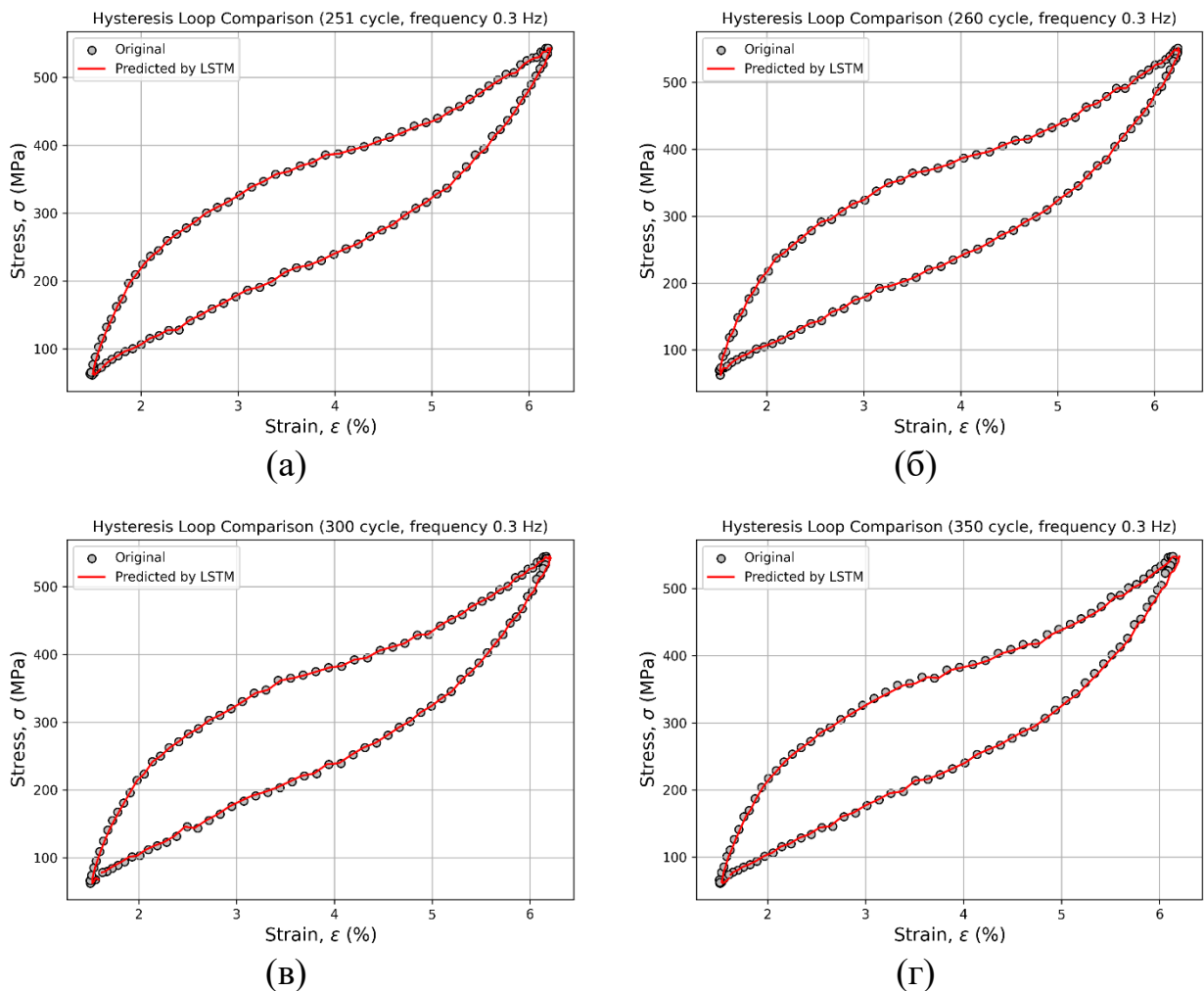


Рис. 4.12. Порівняння експериментальних і прогнозованих гістерезисних петель для 251-го (а), 260-го (б), 300-го (в) та 350-го (г) циклів навантаження, отриманих за допомогою LSTM-моделі для частоти 0,3 Гц

Для віддалених циклів (400–500) спостерігається поступове зростання різниці між експериментальними та прогнозованими значеннями, однак модель зберігає здатність адекватно відтворювати ширину петлі, нахил гілок навантаження та розвантаження.



### 4.3.3. Локальна та глобальна інтерпретація результатів методом Integrated Gradients

У межах даного дослідження метод IG застосовано для аналізу моделей SimpleRNN, LSTM та GRU з метою інтерпретації їхніх прогнозів та кількісної оцінки внеску кожної вхідної ознаки у результат [44]. Метод дав змогу визначити величину впливу параметрів Stress, Cycle, UpDown на прогнозоване значення деформації з урахуванням часової структури послідовності.

Проведено аналіз як на локальному рівні (для окремого часового кроку (вимірювання) в межах одного циклу), так і на глобальному рівні (для всієї тестової вибірки та окремих циклів навантаження). Для узагальнення результатів у масштабі всієї вибірки застосовано інтегральну міру впливу ознак, що визначалася як сума абсолютних значень міри впливу, обчисленої методом IG, по всіх часових кроках кожного циклу. Отримані інтегральні значення надалі усереднювали по всіх циклах, що дало можливість оцінити середню інтегральну силу впливу кожної ознаки на один цикл навантаження. Такий підхід характеризує сумарний вплив ознаки на вихід моделі протягом усього циклу, а не лише її миттєвий внесок в окремі точки прогнозування. Нормування інтегральних значень до відсоткових часток забезпечило можливість коректного порівняння структури впливів між різними частотами навантаження та різними моделями, що узгоджується з практикою використання агрегованих показників впливу в сучасних дослідженнях пояснюваного штучного інтелекту для часових рядів.

Для окремого циклу розраховували величину Total Importance, що дорівнювала сумі абсолютних значень міри впливу ознак, обчислених методом IG, по всіх часових кроках у межах одного циклу. Цей показник характеризує інтегральний (накопичений) вплив кожної ознаки на сумарний прогноз деформації протягом усього циклу навантаження–розвантаження. Використання Total Importance є доцільним для аналізу зміни ролі окремих фізичних параметрів

зі збільшенням номера циклу та дає можливість простежити зміну структури впливів у процесі накопичення функціональної втоми матеріалу.

Для окремого часового кроку (вимірювання) в межах одного циклу навантаження визначено інтегральну міру впливу ознак на прогнозоване значення деформації. За таку міру взяли суму абсолютних значень величин впливу, обчислених методом IG, по всіх часових кроках вхідної послідовності, що передують моменту прогнозування. Таким чином, для вибраного вимірювання  $t_0$  показник Total Importance характеризує накопичений вплив відповідної ознаки з урахуванням попередньої зміни параметрів у межах цього циклу, яка враховується рекурентною мережею через її внутрішній стан.

На рисунку 4.14 наведено глобальний розподіл середньої інтегральної важливості вхідних ознак LSTM-моделі, обчислений методом IG для частоти 0,3 Гц шляхом усереднення інтегральних значень по всіх циклах, що входять до тестової вибірки.

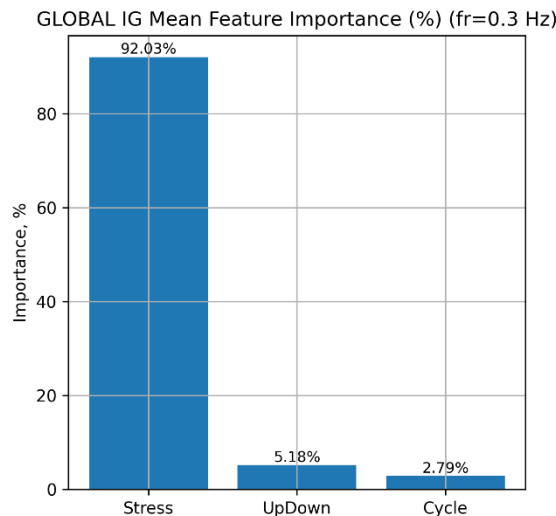


Рис. 4.14. Глобальний розподіл середньої інтегральної важливості вхідних ознак LSTM-моделі, визначений методом IG за частоти навантаження 0,3 Гц

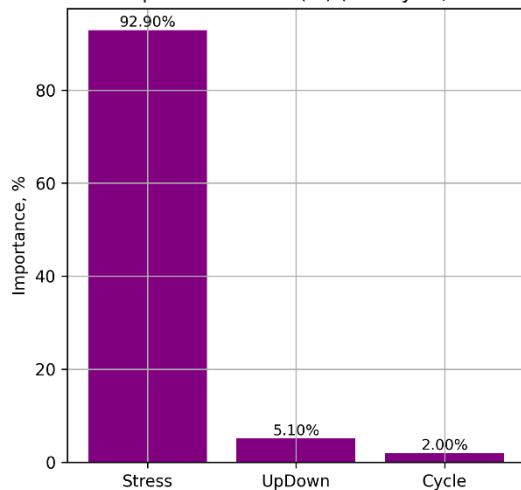
Відповідно до отриманих результатів, домінуючий внесок у прогноз деформації здійснює параметр Stress ( $\approx 92,03\%$ ), що відображає його визначальну роль у формуванні прогнозованої деформації матеріалу. Ознака

UpDown ( $\approx 5,18\%$ ) забезпечує коректне розмежування гілок навантаження та розвантаження і впливає на форму петлі гістерезису, тоді як параметр Cycle ( $\approx 2,79\%$ ) характеризує зміну властивостей матеріалу, пов'язану з накопиченням втомних ефектів.

Таким чином, глобальна структура інтегральних впливів узгоджується з фізичними уявленнями про процес деформування SMA. Основна частка прогнозу визначається прикладеним напруженням, тоді як інші параметри відображають фазу процесу навантаження-розвантаження та зміну властивостей матеріалу, пов'язану з накопиченням функціональної втоми.

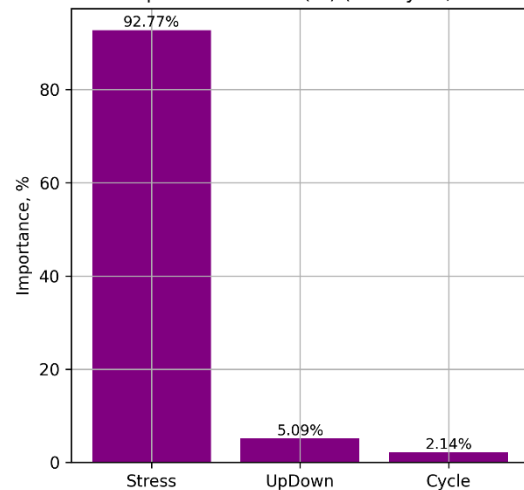
На рисунках 4.15 та 4.16 наведено результати глобального аналізу важливості вхідних ознак, отримані методом IG для окремих циклів навантаження (251, 260, 300, 350, 400, 450 та 500) за частоти 0,3 Гц для LSTM-моделі. Глобальна важливість в межах одного циклу характеризує накопичений внесок кожної ознаки.

Feature Importance via IG (%) (251 cycle, fr=0.3 Hz)



(a)

Feature Importance via IG (%) (260 cycle, fr=0.3 Hz)



(б)

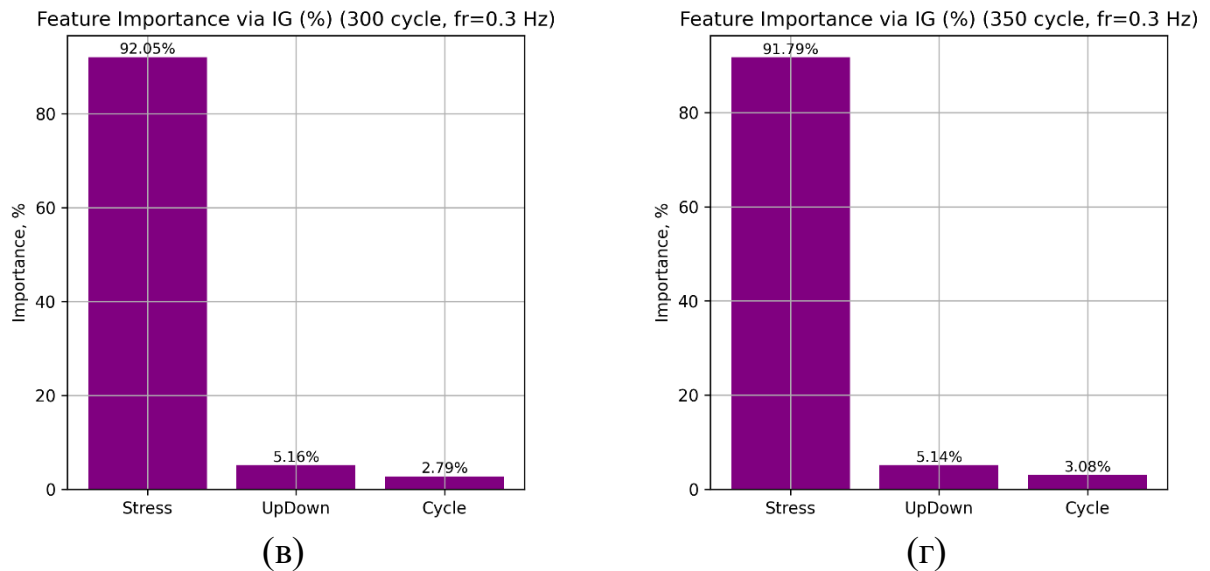


Рис. 4.15. Глобальний розподіл сумарної інтегральної важливості вхідних ознак LSTM-моделі для частоти 0,3 Гц для 251-го (а), 260-го (б), 300-го (в) та 350-го (г) циклів навантаження

Отримані результати демонструють стабільну структуру впливів вхідних ознак у досліджуваному діапазоні циклів. У всіх випадках домінуючий внесок у формування прогнозованої деформації має параметр Stress ( $\approx 91,8\text{--}92,9\%$ ), що підтверджує визначальну роль прикладеного напруження у формуванні гістерезисної поведінки матеріалу. Ознака UpDown характеризується відносно сталим внеском на рівні близько 5 %, забезпечуючи коректне розмежування гілок навантаження та розвантаження. Параметр Cycle має найменшу частку ( $\approx 2,0\text{--}3,1\%$ ), однак спостерігається його поступове зростання зі збільшенням номера циклу від 2,00 % для 251-го до 3,08 % для 350-го циклу. Така тенденція вказує на зростання внеску номера циклу як індикатора накопичених змін у матеріалі та узгоджується з фізичними уявленнями про прояви функціональної втоми під час циклічного навантаження.

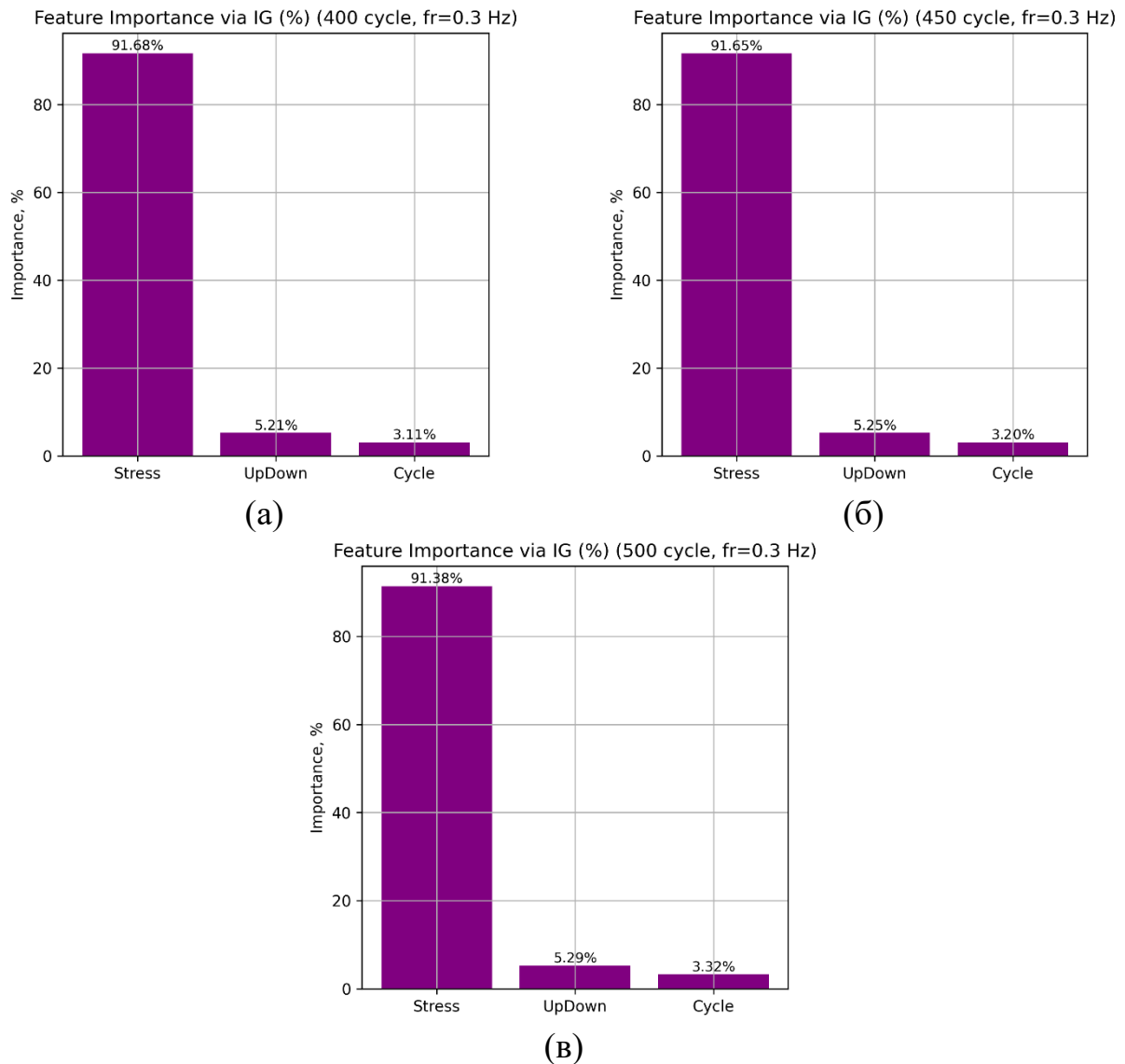


Рис. 4.16. Глобальний розподіл сумарної інтегральної важливості вхідних ознак LSTM-моделі для частоти 0,3 Гц для 400-го (а), 450-го (б), та 500-го (г) циклів навантаження

На віддалених циклах структура впливів вхідних ознак на прогноз моделі також залишається фізично узгодженою. Основний вклад формує прикладене напруження, тоді як параметр Cycle поступово набуває більшої значущості, відображаючи зміну деформації матеріалу в умовах циклічного навантаження.

На рисунках 4.17 та 4.18 наведено результати локального аналізу важливості вхідних ознак для вимірювання №70, отримані методом IG для окремих циклів навантаження (251, 260, 300, 350, 400, 450 та 500) за частоти 0,3 Гц для LSTM-моделі. Значення важливості подано у відсотках та обчислено як

нормовану суму абсолютних значень міри впливу по всіх часових кроках для конкретного моменту прогнозування.

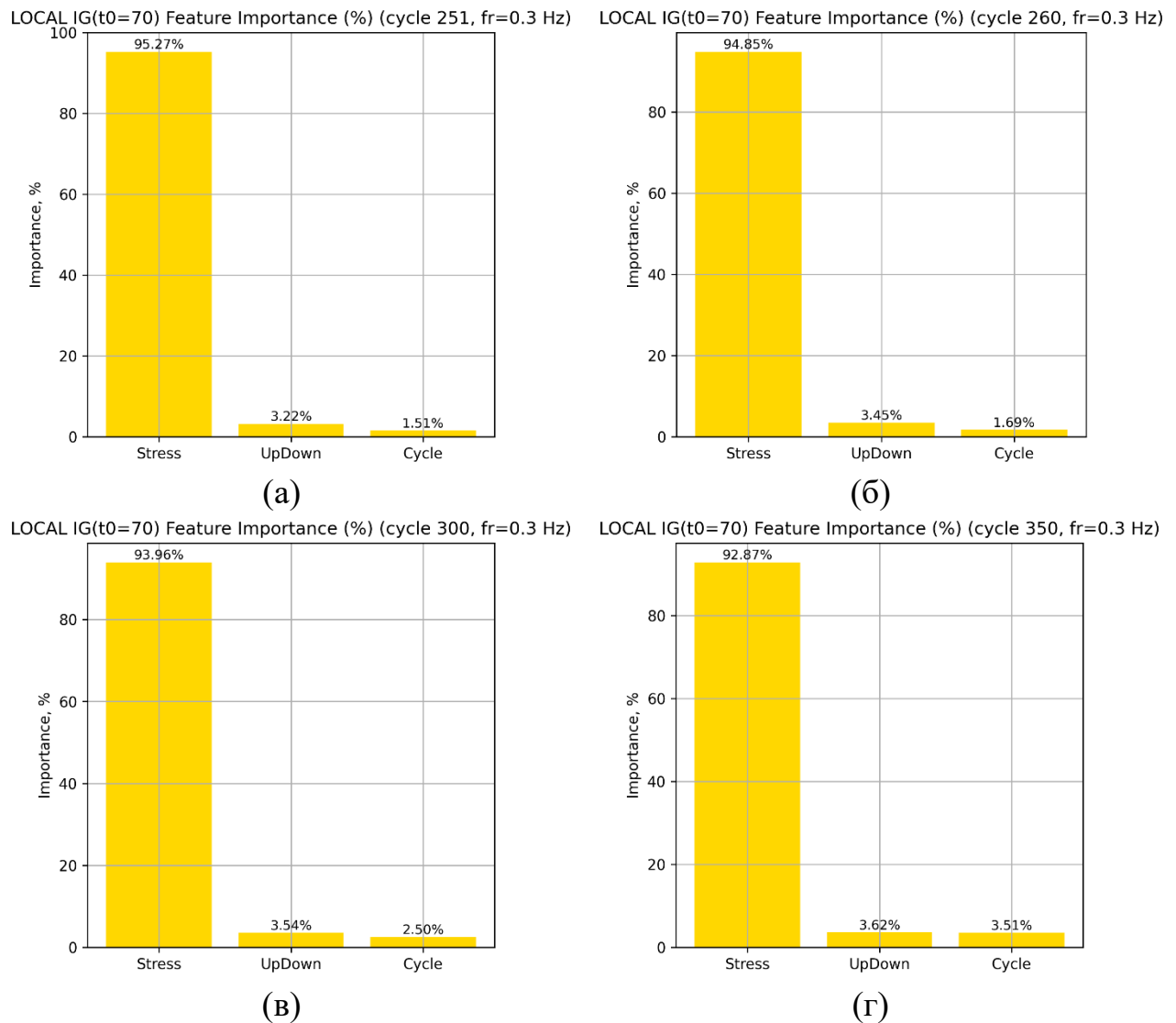


Рис. 4.17. Локальний розподіл сумарної інтегральної важливості вхідних ознак для вимірювання №70 у LSTM-моделі для частоти 0,3 Гц для 251-го (а), 260-го (б), 300-го (в) та 350-го (г) циклів навантаження

Аналіз наведених результатів показує, що для конкретного вимірювання ( $t_0 = 70$ ) домінуючий внесок у прогнозоване значення деформації належить параметру Stress (понад 92–95 %), що відображає визначальну роль рівня напруження у формуванні локального прогнозу. Водночас спостерігається

поступове зростання частки параметра Cycle зі збільшенням номера циклу. Ознака UpDown зберігає відносно невелику, однак стабільну частку впливу, забезпечуючи коректне врахування фази навантаження або розвантаження.

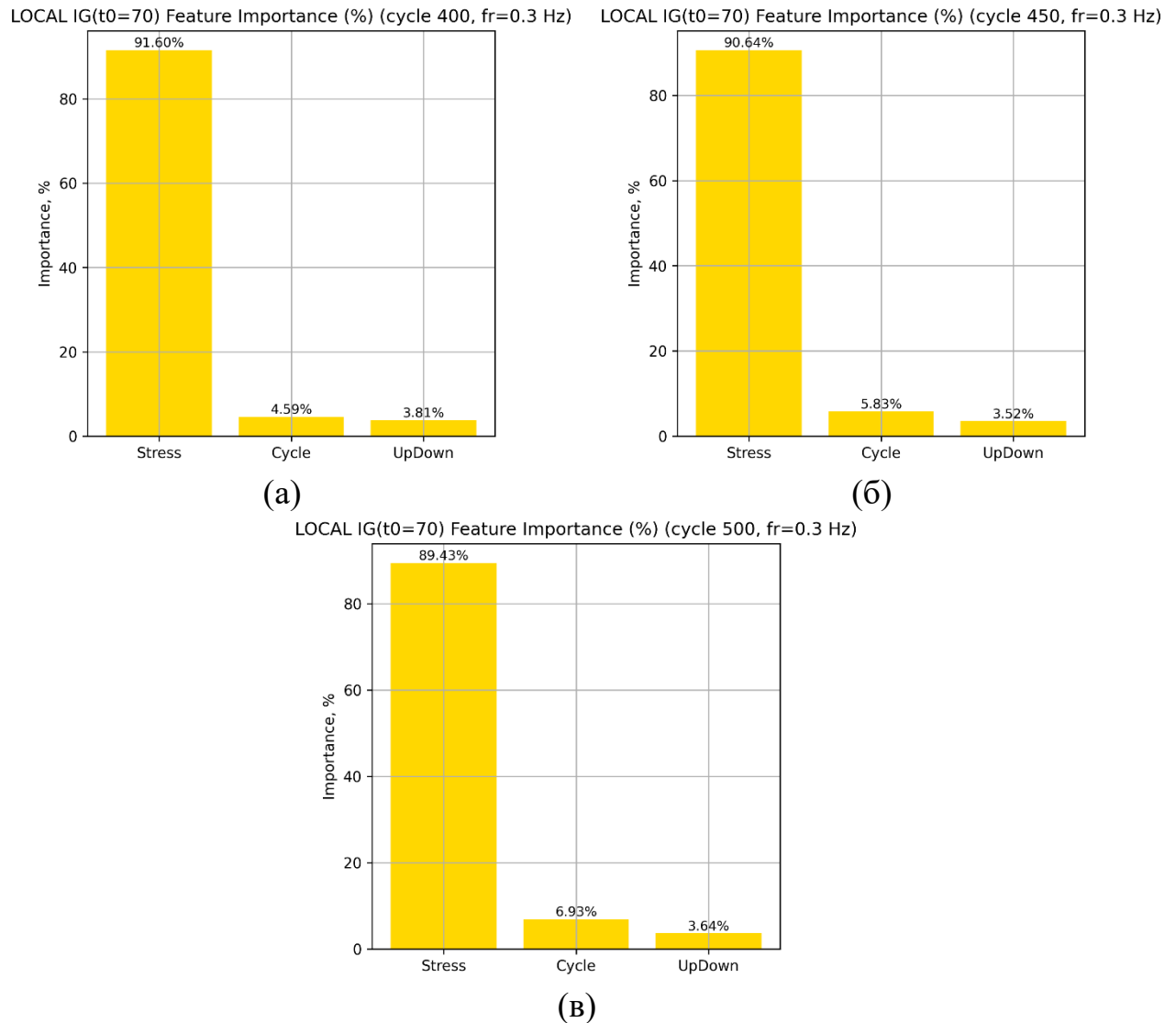


Рис. 4.18. Локальний розподіл сумарної інтегральної важливості входніх ознак для вимірювання №70 у LSTM-моделі для частоти 0,3 Гц для 400-го (а), 450-го (б), та 500-го (г) циклів навантаження

Аналіз результатів для віддалених циклів (400–500) демонструє збереження домінуючої ролі параметра Stress, частка якого поступово зменшується з 91,60 % для 400-го циклу до 89,43 % для 500-го циклу. Одночасно спостерігається зростання внеску параметра Cycle (від 4,59 % до 6,93 %), що

свідчить про посилення ролі номера циклу у формуванні прогнозованої деформації та узгоджується з проявами функціональної втоми матеріалу зі збільшенням кількості циклів навантаження-розвантаження. Частка ознаки UpDown залишається відносно стабільною (близько 3,5–3,8 %), забезпечуючи коректне врахування фази навантаження–розвантаження.

#### **4.4. Результати застосування темпоральної згорткової мережі**

##### **4.4.1. Аналіз узагальнювальної та екстраполяційної здатності моделі**

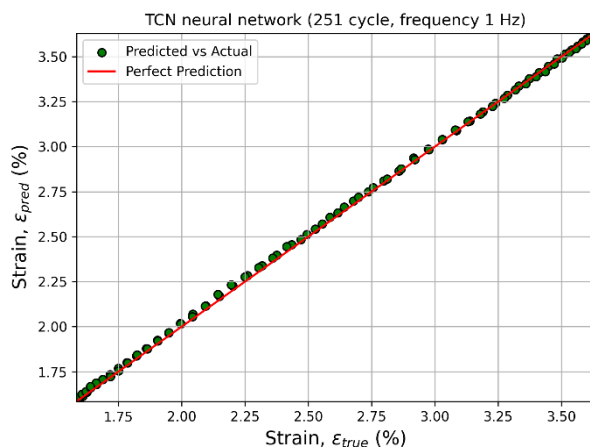
Для оцінювання здатності побудованих TCN моделей узагальнювати закономірності гістерезисної поведінки SMA за межами тренувального та тестового діапазону проведено тестування на циклах навантаження, які не входили до складу жодної з вибірок, використаних під час навчання та тестування [70]. До цього набору увійшли цикли 251, 260, 300, 350, 400, 450 та 500. Таке тестування дало змогу проаналізувати екстраполяційну спроможність TCN-моделей до прогнозування гістерезисної поведінки сплаву. Оцінювання проводилося шляхом порівняння прогнозованих і експериментальних петель гістерезису та розрахунку відповідних метрик точності (додаток Ж).

Аналіз результатів показав, що узагальнювальна здатність TCN-моделі значно залежить від частоти навантаження та віддаленості циклу від діапазону навчальних даних.

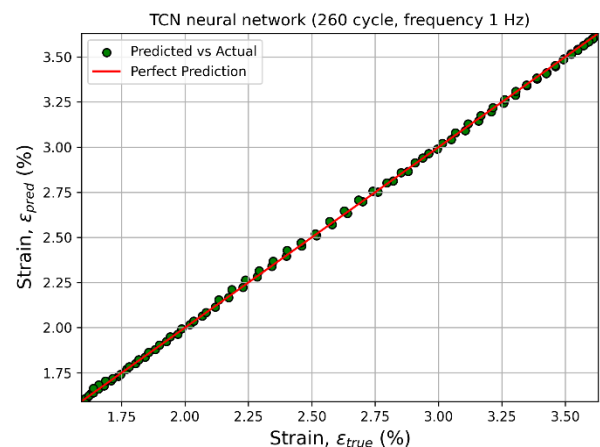
Для частот 0,3–1 Гц модель показує найкращу екстраполяційну спроможність. Зокрема, для частоти 1 Гц навіть для 500-го циклу зберігаються дуже високі показники точності ( $R^2 = 0,9936$ ; MAPE = 0,0155), що свідчить про стабільне відтворення форми гістерезисних петель та коректне прогнозування деформації. Аналогічно, для 0,3 Гц коефіцієнт детермінації для 500-го циклу становить 0,9910, що підтверджує високу точність моделі TCN. Для 0,5 Гц спостерігається поступове зниження  $R^2$  із 0,9992 (251-й цикл) до 0,9385 (500-й цикл), однак точність залишається задовільною навіть на віддалених циклах.

Натомість для 0,1 Гц відбувається різке погіршення показників із віддаленням циклу. Значення  $R^2$  знижується до 0,2300 для 500-го циклу, що вказує на обмежену здатність моделі до екстраполяційного прогнозування зміни деформації матеріалу за умов низькочастотного навантаження. Для високих частот 3–10 Гц спостерігається нелінійний характер деградації точності. Для 3 Гц модель зберігає високу точність до 350–400 циклів, однак для 500-го циклу  $R^2$  знижується до 0,9062. Найбільш складним виявився режим 10 Гц, де для 500-го циклу  $R^2$  становить 0,1797, а MAPE зростає до 0,1619, що свідчить про значні відхилення від експериментальних даних. Загалом простежується закономірна тенденція, де зі збільшенням номера циклу зростають MSE, MAE та MAPE, а  $R^2$  зменшується, що відображає накопичення втомних ефектів і зміну параметрів фазових перетворень у сплаві, які модель не може відтворити. Водночас у діапазоні середніх частот (0,3–1 Гц) TCN-архітектура демонструє високу точність при екстраполяції та здатність правильно відтворювати нелінійну гістерезисну поведінку. Отримані результати підтверджують, що TCN ефективно моделює часові закономірності гістерезисної поведінки SMA, проте її екстраполяційна спроможність зменшується за умов низьких або високих частот навантаження та значного віддалення від навчального діапазону циклів.

На рисунку 4.19 показано порівняння прогнозованих і експериментальних значень деформації для циклів 260, 350 та 450 для частоти 1 Гц у вигляді діаграм розсіювання з лінією ідеального прогнозу.



(a)



(б)

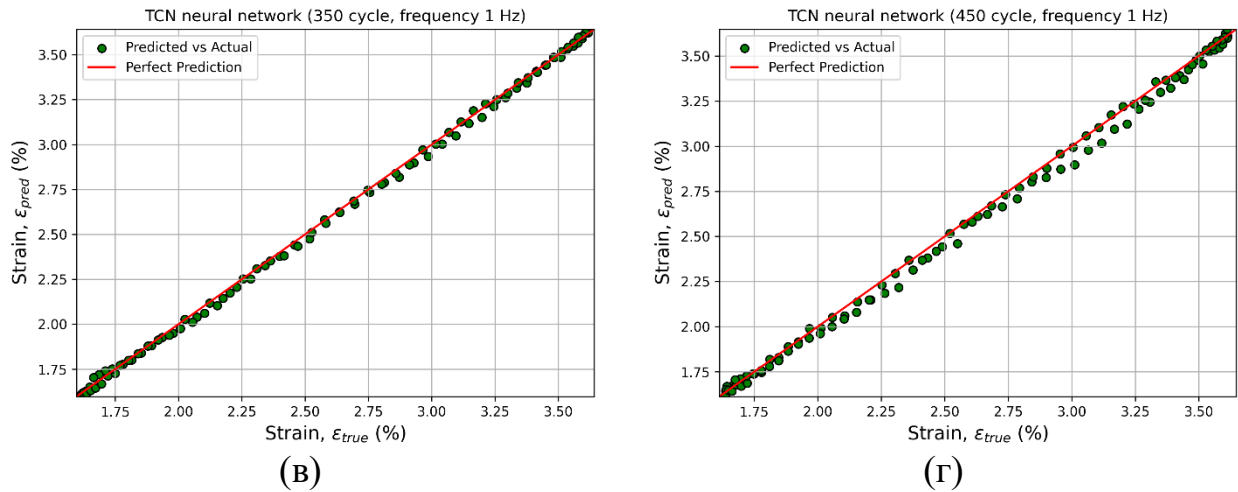


Рис. 4.19. Узгодженість експериментальних і прогнозованих значень деформації для 251-го (а), 260-го (б), 350-го (в) та 450-го (г) циклів навантаження, отриманих за допомогою TCN-моделі для частоти 1 Гц

Результати для циклу 251 та 260 показують майже повне накладання точок на лінію ідеального передбачення, що свідчить про дуже високу точність моделі на ранніх циклах тестування. Результат для циклу 350 показує, що кореляція між прогнозованими та реальними значеннями залишається високою, хоча спостерігаються незначні відхилення, пов'язані з початковими проявами втомних процесів, які модель не може ідеально спрогнозувати. Для циклу 450 характерне дещо більше відхилення від лінії ідеального прогнозу, що відповідає зміні форми петлі напруження–деформації на пізніх стадіях.

Результати свідчать, що TCN-модель здатна відтворювати гістерезисну поведінку сплаву на додаткових циклах із прийнятною точністю. Поступове збільшення похибки зі зростанням номера циклу є очікуваним і узгоджується зі складністю екстраполяційного прогнозування за умов накопичення функціональної втоми матеріалу.

#### 4.4.2. Прогнозування гістерезисної поведінки

Темпоральна згорткова мережа обробляє впорядковані послідовності, що дає змогу враховувати залежності між попередніми та поточними значеннями напруження, номером циклу та фазою навантаження-розвантаження. Завдяки використанню дилатованих згортків із причинною структурою (causal convolutions) модель зберігає часовий порядок даних і не використовує майбутню інформацію під час прогнозування. Це є важливим для коректного відтворення часових залежностей у гістерезисній поведінці матеріалу.

На рисунку 4.20 та 4.21 показано порівняння експериментальних та прогнозованих TCN-моделлю петель гістерезису для циклів 251, 260, 350 та 450 за частоти 1 Гц.

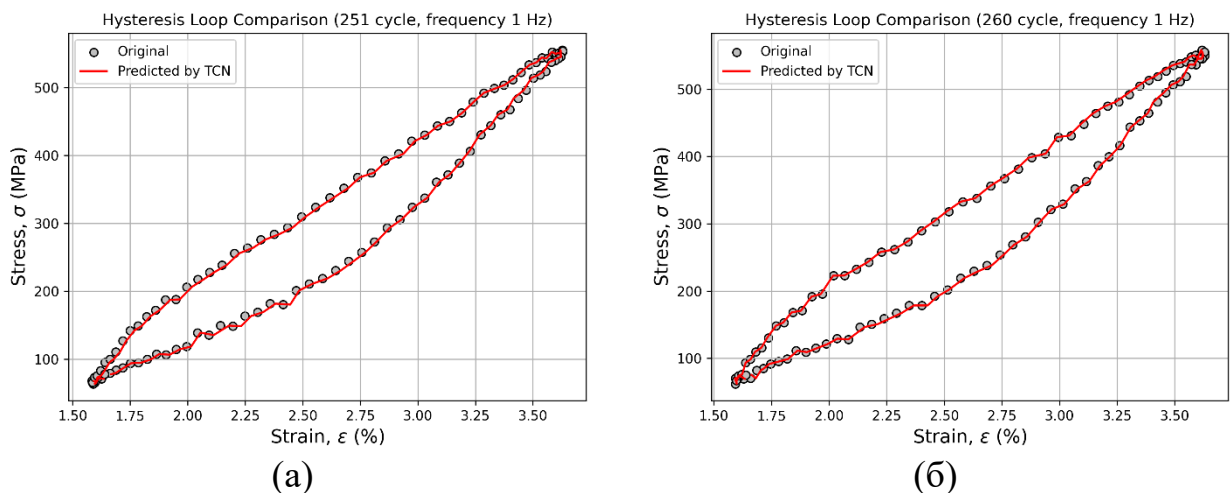


Рис. 4.20. Порівняння експериментальних і прогнозованих гістерезисних петель для 251-го (а) та 260-го (б) циклів навантаження, отриманих за допомогою TCN-моделі за частоти 1 Гц.

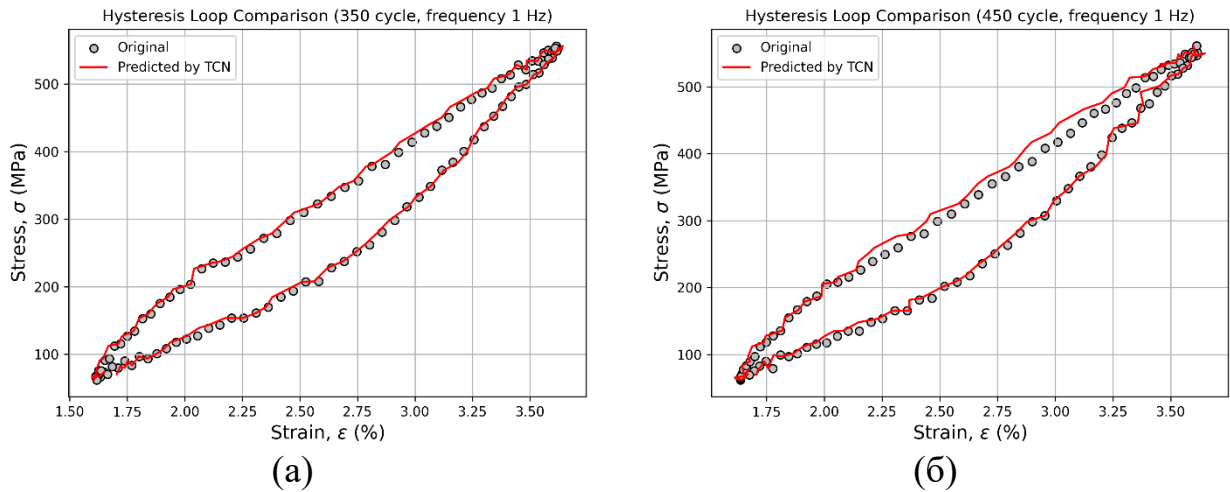


Рис. 4.21. Порівняння експериментальних і прогнозованих гістерезисних петель для 350-го (а) та 450-го (б) циклів навантаження, отриманих за допомогою TCN-моделі за частоти 1 Гц.

Аналіз графіків свідчить, що для циклів 251 та 260 модель практично повністю відтворює форму гістерезисної петлі як на етапі навантаження, так і розвантаження. Узгодженість між кривими підтверджується високими значеннями  $R^2$  (додаток Ж). Для більш віддалених циклів (350 та 450) спостерігається поступове зростання похибок прогнозування. Найбільш помітні розбіжності проявляються у верхній частині петлі при максимальних напруженнях та на ділянках переходу між фазами. Водночас навіть для 450-го циклу модель зберігає правильну форму петлі, відтворює її ширину та загальний рівень деформації, що свідчить про здатність TCN адекватно описувати зміну гістерезисної поведінки сплаву в умовах тривалого циклічного навантаження.

Отримані результати підтверджують, що TCN мережа ефективно прогнозує гістерезисну поведінку SMA як у межах навчального інтервалу, так і при екстраполяції на віддалені цикли, зберігаючи фізично узгоджену структуру залежності між напруженням і деформацією.

Хоча детальні графічні результати наведено лише для репрезентативного випадку за частоти 1 Гц, аналогічні порівняння прогнозованих і

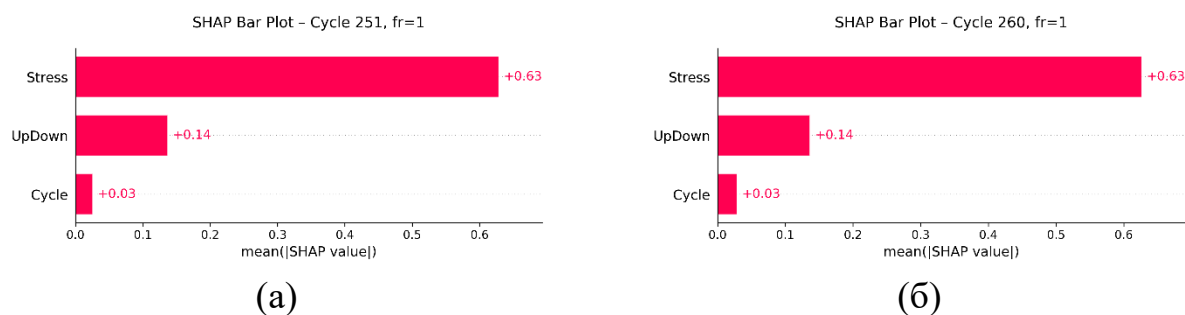
експериментальних значень деформації, а також відповідних гістерезисних петель отримано й для інших частот. Вони демонструють схожі закономірності.

#### 4.4.3. Локальна та глобальна інтерпретація результатів методом SHAP

Для інтерпретації роботи моделей застосовано метод SHAP. Аналіз виконано із застосуванням KernelExplainer, для якого background-дані формували на основі підмножини навчальних циклів, що забезпечує коректне відображення локальних та глобальних внесків ознак [70]. Оцінювання проводили для трьох вхідних ознак (Stress, Cycle та UpDown).

Глобальний SHAP-аналіз дає можливість інтерпретувати модель не на рівні окремих точок, а у масштабі всієї вибірки (окремого циклу), характеризуючи те, наскільки стабільно і послідовно вплив тієї чи іншої ознаки проявляється у всіх спостереженнях. Це забезпечує глибше розуміння того, які вхідні ознаки модель вважає ключовими для відтворення гістерезисної поведінки SMA, як змінюється їхня важливість зі зростанням номера циклу та як структура впливів узгоджується з проявами накопичення функціональної втоми матеріалу.

На рисунку 4.22 показано порівняльний аналіз середніх абсолютних внесків ознак, отриманий методом SHAP для циклів 251, 260, 350 та 450 для частоти навантаження 1 Гц.



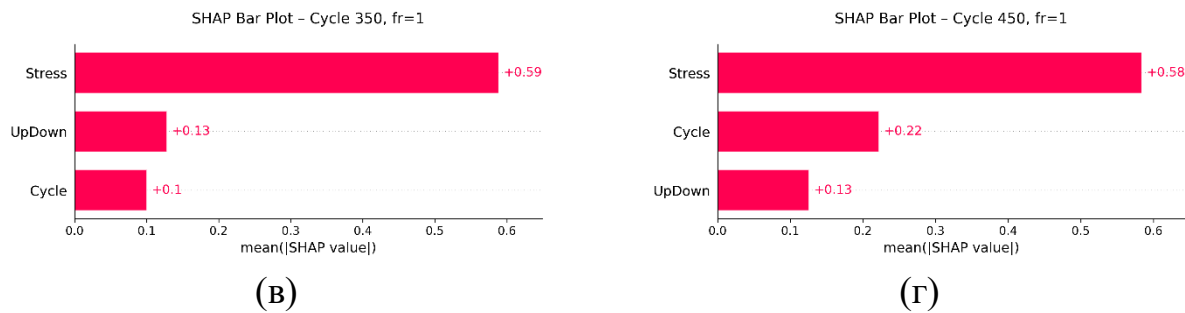


Рис. 4.22. Глобальна важливість ознак для 251-го (а), 260-го (б), 350-го (б) та 450-го (в) циклів навантаження для частоти 1 Гц

Результати SHAP-аналізу показують чітку й фізично обґрунтовану структуру важливості ознак. Параметр Stress виступає домінуючим чинником для всіх досліджених циклів, що узгоджується з ключовою роллю напруження у формуванні деформації сплаву. Параметр UpDown зберігає стабільний та помірний вплив, відображаючи зміну напрямку навантаження в межах циклу. Натомість внесок параметра Cycle поступово збільшується зі зростанням номера циклу, що вказує на підвищення його значущості у формуванні прогнозованої деформації та узгоджується з накопиченням ефектів функціональної втоми матеріалу.

На рисунку 4.23 показано SHAP-summary діаграми для циклів 251, 260, 350 та 450 для частоти навантаження 1 Гц.

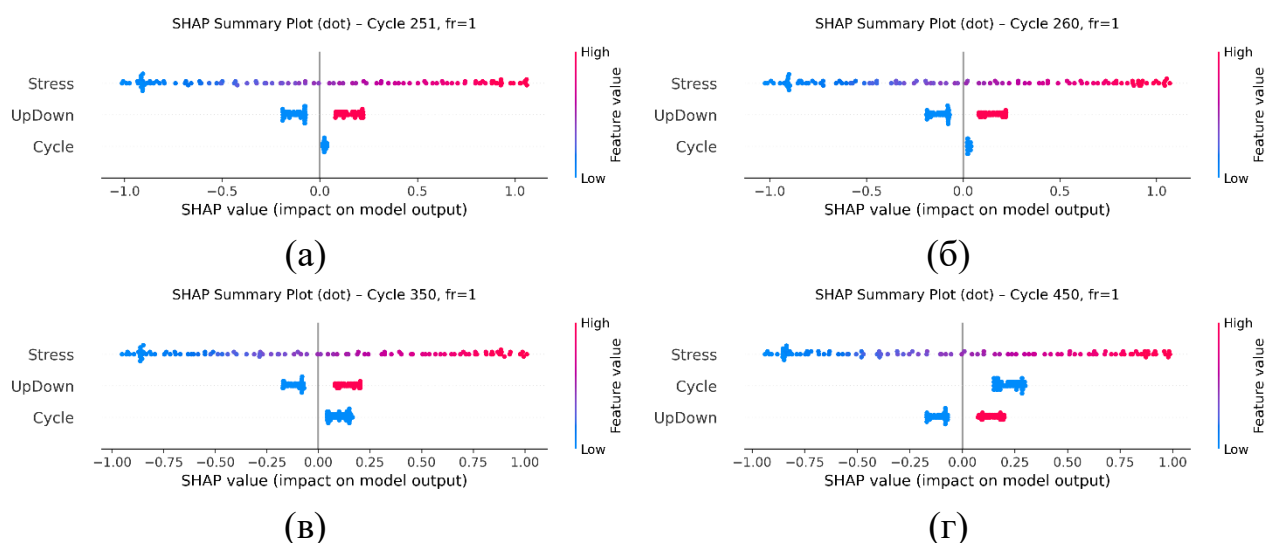


Рис. 4.23. SHAP-summary (точкові) діаграми для 251-го (а), 260-го (б), 350-го (б) та 450-го (в) циклів навантаження для частоти 1 Гц

На всіх чотирьох діаграмах домінуючим чинником залишається параметр Stress, що підтверджується широким діапазоном його SHAP-значень та значною їх варіативністю як у позитивній (червоні точки), так і в негативній (сині точки) області. Високі значення Stress збільшують прогнозоване значення деформації (червоні точки в правій частині графіка), тоді як низькі значення Stress зменшують. Така закономірність є фізично логічною, оскільки напруження є головним чинником формування деформації SMA в межах циклу навантаження. Вплив параметра UpDown, який позначає напрямок навантаження або розвантаження, зберігає відносну стабільність у всіх чотирьох циклах. Його SHAP-значення залишаються компактно зосередженими навколо нуля, але чітко розділяються залежно від фази циклу. Низькі значення відповідають етапу навантаження, високі – етапу розвантаження. Це свідчить про правильне розпізнавання моделлю різних фаз гістерезисної петлі.

Найбільш виразні зміни спостерігаються для параметра Cycle. Для 251 та 260 циклів (рис. 4.23а та 4.23б) його вплив є мінімальним і сконцентрований навколо нульової області. Натомість на циклах 350 (рис. 4.23в) та 450 (рис. 4.23г) значення SHAP для Cycle зростають, що свідчить про посилення ролі номера циклу у формуванні прогнозованої деформації та узгоджується з проявами накопичення функціональної втоми матеріалу.

На рисунку 4.24 наведено узагальнені SHAP-heatmap діаграми для циклів 251, 260, 350 та 450 при частоті 1 Гц, що дають змогу простежити динаміку внесків ознак у прогноз моделі TCN уздовж усього часового ряду для кожного вимірювання.

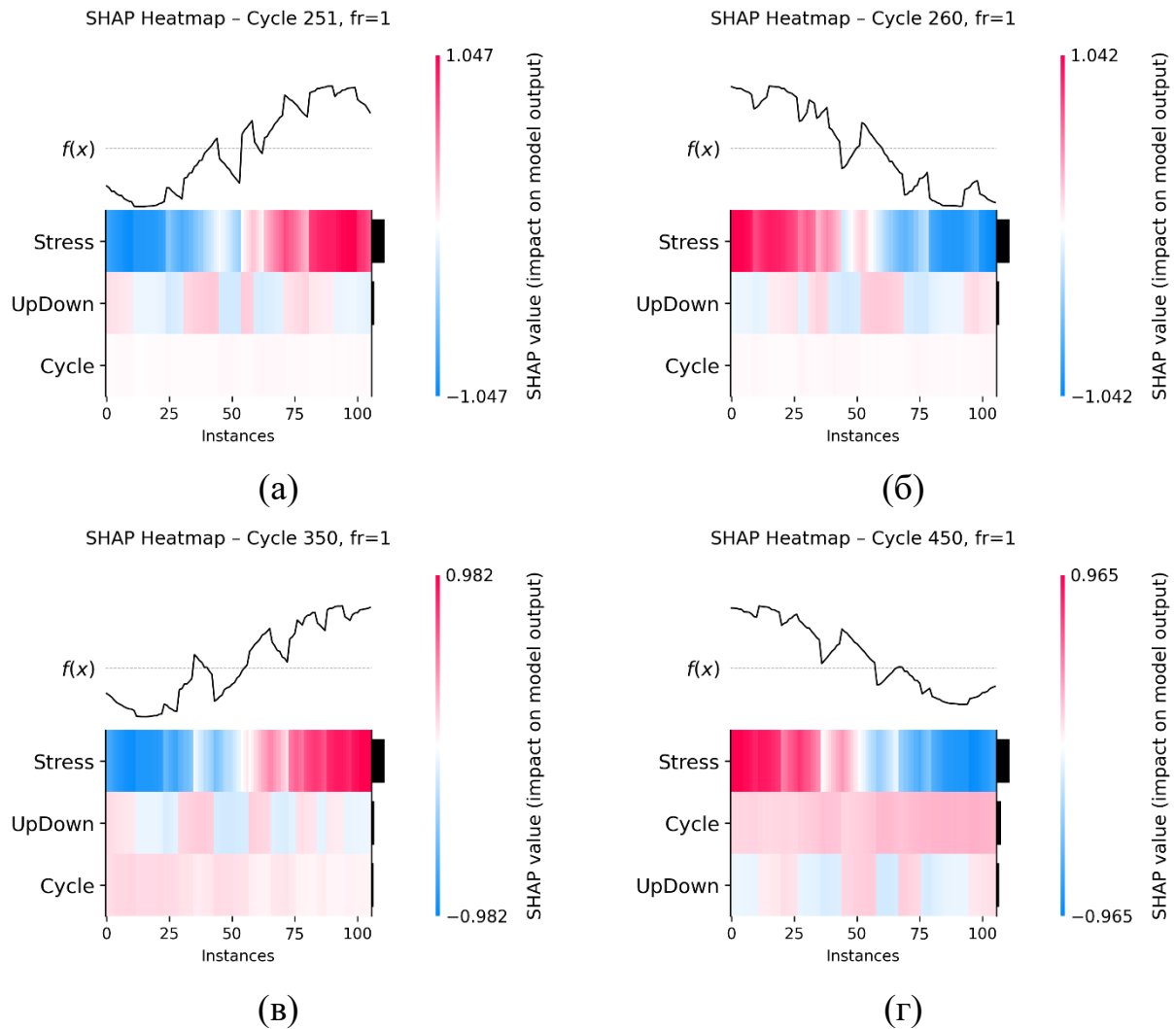


Рис. 4.24. Узагальнені SHAP-heatmap діаграми TCN-моделі для 251-го (а), 260-го (б), 350-го (в) та 450-го (г) циклів навантаження для частоти 1 Гц

У верхній частині рисунків наведено вихід моделі  $f(x)$ , який слугує орієнтиром для співставлення змін прогнозованої деформації з відповідними варіаціями SHAP-значень уздовж часової послідовності.

На рисунках 4.24а та 4.24б, що відповідають циклам 251 і 260, спостерігається чітко виражене домінування ознаки Stress, яка формує найбільші за абсолютною величиною як позитивні, так і негативні внески у передбачення моделі. Позитивні SHAP-впливи (червоні сегменти) ознаки Stress відповідають зростанню прогнозованої деформації, тоді як негативні значення (сині сегменти) зумовлюють її зменшення.

Ознака UpDown демонструє характерну структуру внесків, що відображає зміну фаз навантаження та розвантаження. Вплив параметра Cycle на цьому етапі залишається позитивним, однак відносно невеликим за амплітудою, що узгоджується з обмеженими проявами накопичення функціональної втоми в безпосередній близькості до навчального діапазону.

На рисунку 4.24в (цикл 350) та рисунку 4.24г (цикл 450) ознака Stress і надалі залишається ключовим чинником формування прогнозу, визначаючи найбільші позитивні та негативні внески. Ознака UpDown зберігає стабільний помірний вплив. Натомість внесок ознаки Cycle стає більш вираженим зі зростанням номера циклу. Це свідчить про посилення її ролі у формуванні прогнозу та узгоджується з проявами накопичення функціональної втоми матеріалу. Така динаміка підтверджує фізичну узгодженість виявленої структури впливів і доцільність використання номера циклу як незалежної вхідної змінної для екстраполяційного прогнозування гістерезисної поведінки SMA.

Для детального розуміння того, як саме окремі вхідні ознаки впливають на прогноз моделі в кожному окремому вимірюванні, проведено локальний SHAP-аналіз окремого зразка. На відміну від глобальних методів інтерпретації, що оцінюють усереднений вплив ознак на весь набір даних (весь цикл), локальний аналіз дає можливість дослідити внесок кожної ознаки для конкретного вимірювання, відображаючи механізми прийняття рішень моделлю на мікрорівні. Такий підхід дає можливість простежити зміну впливів ознак уздовж часової послідовності циклу навантаження та встановити, які величини спричиняють збільшення або зменшення прогнозованої деформації в окремі моменти.

На рисунку 4.25 показано локальні SHAP-waterfall діаграми для одного вибраного вимірювання (№50) на циклах 251, 260, 350 та 450 при частоті 1 Hz, які показують внесок кожної ознаки у формування передбаченого значення деформації.

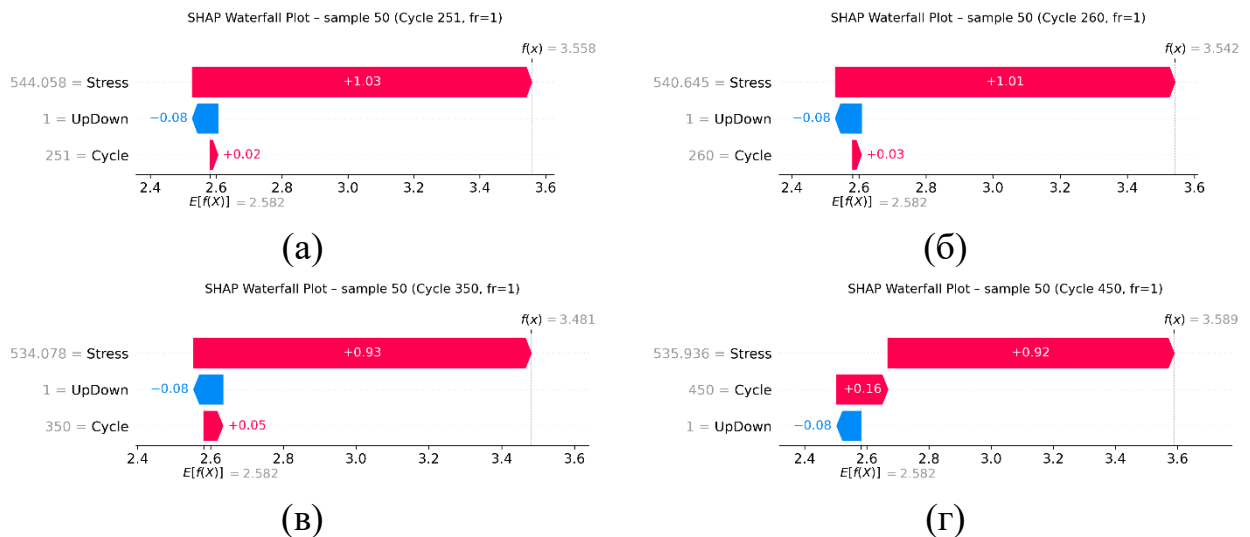


Рис. 4.25. Локальні SHAP waterfall-діаграми для TCN-моделі (вимірювання №50, частота 1 Гц) для 251-го (а), 260-го (б), 350-го (б) та 450-го (в) циклів навантаження

Аналіз локальних SHAP waterfall-діаграм для циклів 251, 260, 350 та 450 демонструє стабільну і фізично узгоджену структуру внесків ознак у прогноз TCN-моделі на рівні окремого вимірювання. У всіх випадках перехід від базового значення  $E[f(X)]$  до індивідуального прогнозу  $f(x)$  відбувається переважно внаслідок домінуючого позитивного внеску ознаки Stress, яка забезпечує найбільше зміщення прогнозу в напрямі збільшення деформації. Абсолютна величина її внеску залишається найбільшою серед усіх ознак, що підтверджує визначальну роль напруження у формуванні гістерезисної поведінки SMA.

Ознака UpDown у всіх циклах формує відносно невеликий негативний внесок ( $-0,08$ ), що відображає вплив поточної фази навантаження на локальне значення деформації. Її роль є стабільною та не демонструє істотної зміни зі зростанням номера циклу, що узгоджується з її функцією індикатора напрямку навантаження.

Натомість внесок ознаки Cycle демонструє чітку тенденцію до зростання зі збільшенням номера циклу. Для циклів 251 та 260 його вплив є мінімальним і становить лише незначне позитивне зміщення прогнозу, що відповідає

близькості до навчального інтервалу. У циклі 350 внесок параметра Cycle стає більш відчутним, а для циклу 450 він суттєво зростає. Така динаміка свідчить про посилення ролі номера циклу як індикатора накопичених змін у матеріалі та узгоджується з проявами функціональної втоми під час циклічного навантаження.

Таким чином, аналіз локальних SHAP-пояснень свідчить, що структура внесків ознак у прогноз TCN-моделі є фізично узгодженою: напруження зберігає домінуючу роль, напрям навантаження-розвантаження має стабільний вплив, а значущість номера циклу зростає зі збільшенням віддаленості від навчального діапазону. Це підтверджує фізичну інтерпретованість моделі та свідчить про її здатність враховувати прояви накопичення функціональної втоми під час прогнозування гістерезисної поведінки SMA.

#### **4.5. Порівняльний аналіз екстраполяційної здатності моделей**

Для порівняння екстраполяційних можливостей побудованих моделей виконано порівняння якості прогнозування на циклах 251, 350 і 500, тобто за межами навчального діапазону 100–250 циклів. Аналіз здійснювали за метриками MAE, MAPE, MSE та  $R^2$  для моделей GRU, LSTM, SimpleRNN, TCN, VotingRegressor і StackingRegressor та семи частот навантаження. Відповідні результати наведено на рисунках 4.26–4.37.

Порівняння за метрикою MAE (рис. 4.26–4.28) показує, що на циклі 251 усі моделі загалом зберігають високу точність прогнозування, а абсолютні похибки для більшості частот залишаються низькими. Для частот 0,3–1,0 Гц абсолютні похибки є порівняно малими майже для всіх моделей, що вказує на добру здатність до ближньої екстраполяції. Водночас уже на цьому циклі спостерігається погіршення точності. При частоті 0,1 Гц вищі значення MAE має TCN, а на частотах 3,0–10,0 Гц суттєво більші похибки демонструє StackingRegressor. Отже, навіть найближчий до навчального інтервалу цикл

виявляє нерівномірність екстраполяційної здатності моделей залежно від частоти.

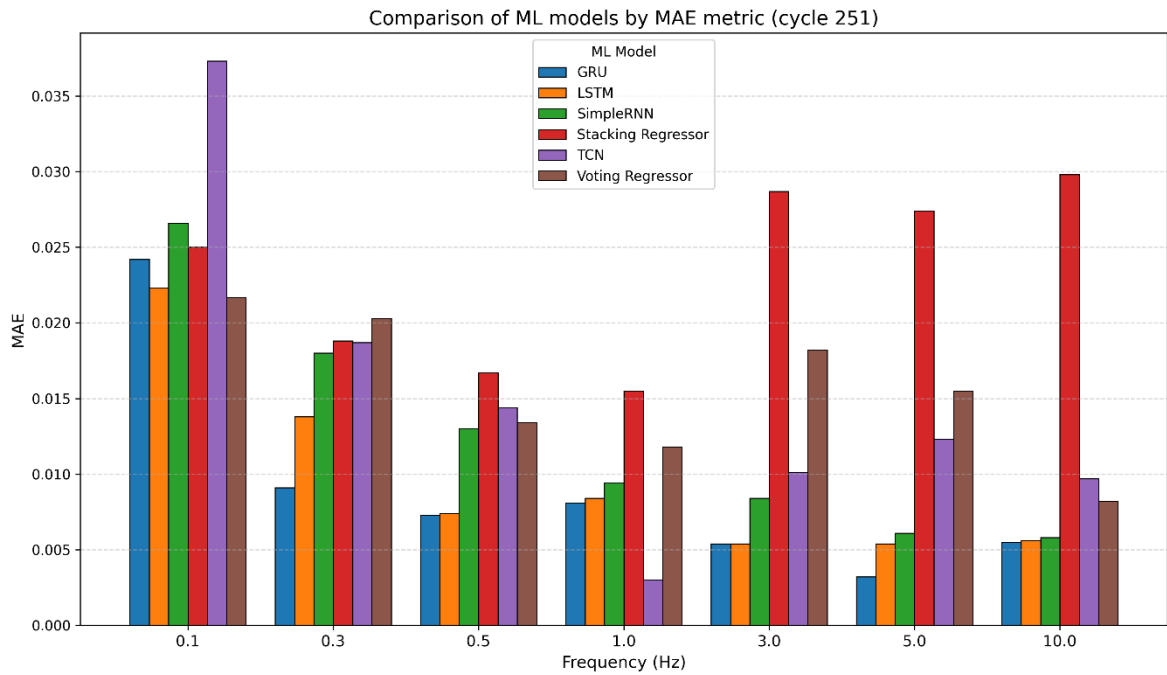


Рис. 4.26. Порівняння моделей машинного навчання за метрикою MAE на 251 циклі

На циклі 350 (рис. 4.27) зростання MAE стає значно виразнішим.

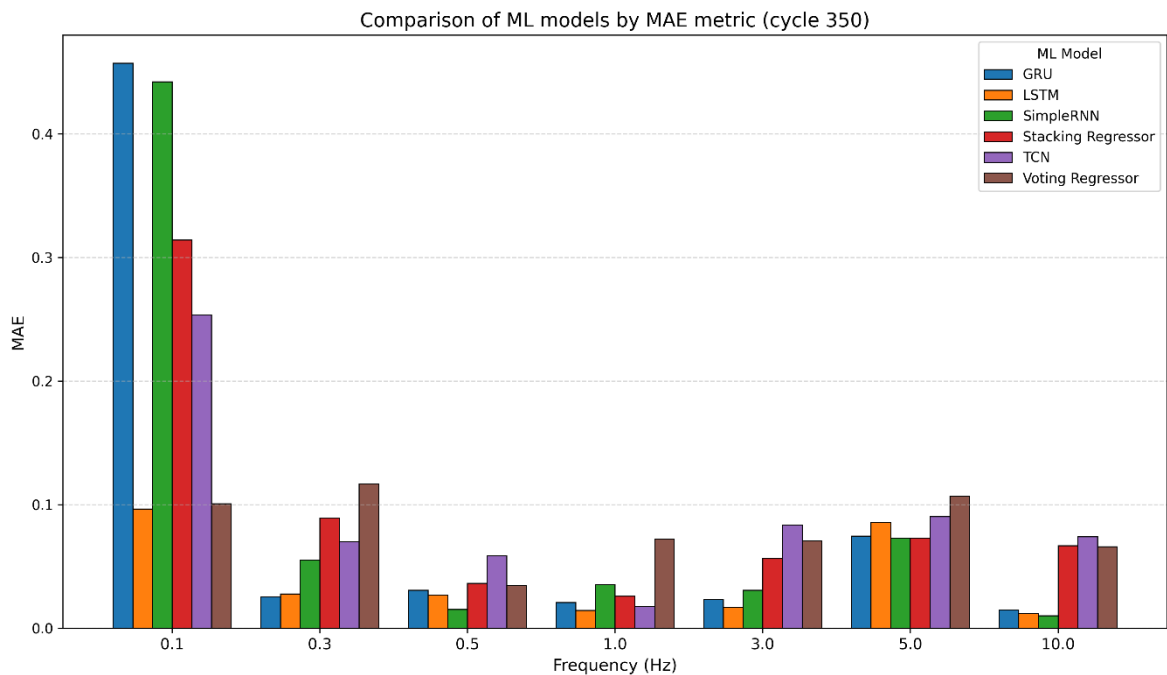


Рис. 4.27. Порівняння моделей машинного навчання за метрикою MAE на 350 циклі.

Найбільш різке погіршення спостерігається на частоті 0,1 Гц, де для GRU і SimpleRNN абсолютна похибка зростає на порядок порівняно з циклом 251 та для StackingRegressor і TCN також фіксується суттєве збільшення. LSTM і VotingRegressor на цій частоті поведуться стабільніше, однак також демонструють помітне зростання похибки. Для частот 0,3–10,0 Гц більшість моделей ще зберігає відносно низькі значення MAE.

На циклі 500 (рис. 4.28) тенденція до накопичення похибки посилюється.

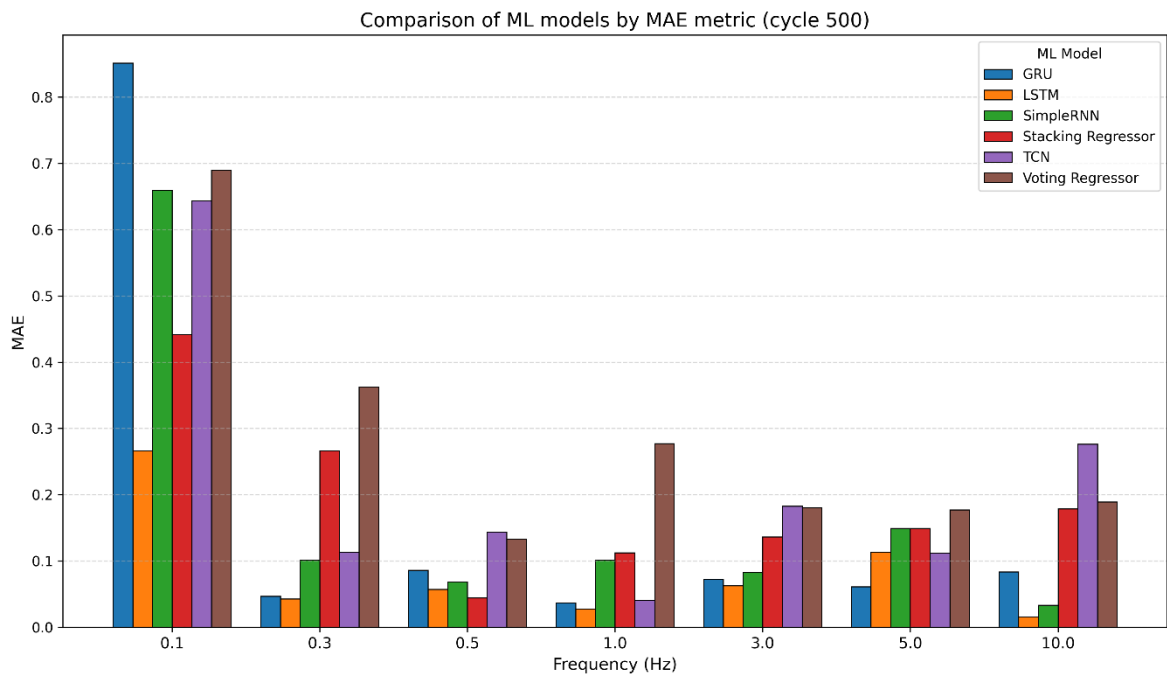


Рис. 4.28. Порівняння моделей машинного навчання за метрикою MAE на 500 циклі

Найскладнішою для екстраполяції виявляється частота 0,1 Гц, де всі моделі демонструють суттєве зростання MAE, причому найгірші результати спостерігаються у GRU, VotingRegressor, SimpleRNN і TCN. Для частоти 0,3 Гц абсолютна похибка також зростає, особливо у VotingRegressor і StackingRegressor. У діапазоні 0,5–1,0 Гц модель LSTM зберігає прийнятну точність. На високих частотах 3,0–10,0 Гц різке зростання MAE мають TCN, StackingRegressor і VotingRegressor, тоді як LSTM демонструє стабільну точність. Таким чином, зі збільшенням номера циклу абсолютна похибка зростає

майже для всіх моделей, але величина цього зростання істотно залежить від типу моделі та частоти навантаження.

Подібні закономірності підтверджує аналіз відносної похибки MAPE, наведений на рисунках 4.29–4.31.

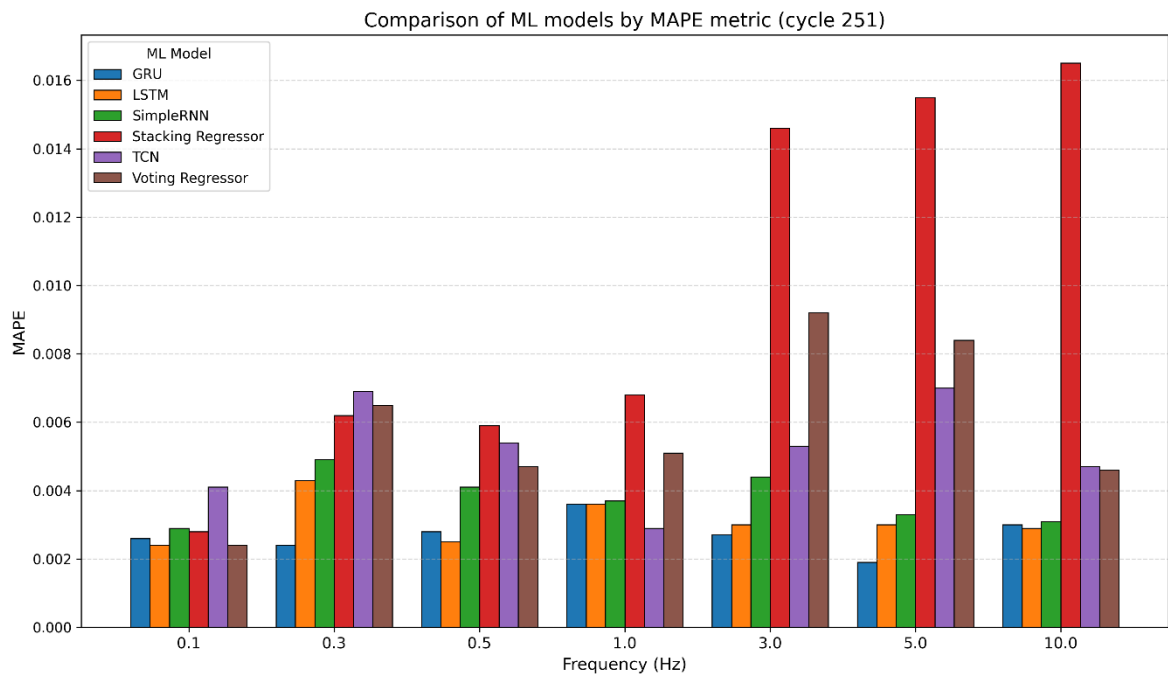


Рис. 4.29. Порівняння моделей машинного навчання за метрикою MAPE на 251 циклі

На циклі 251 значення MAPE для більшості моделей залишаються невеликими, що свідчить про достатню точність екстраполяції на найближчому до навчального інтервалу циклі. Проте вже тут StackingRegressor має підвищені значення MAPE на частотах 3,0–10,0 Гц, а TCN – на 0,1 і 0,3 Гц. На циклі 350 MAPE помітно зростає насамперед на 0,1 Гц, а також на високих частотах 5,0 і 10,0 Гц.

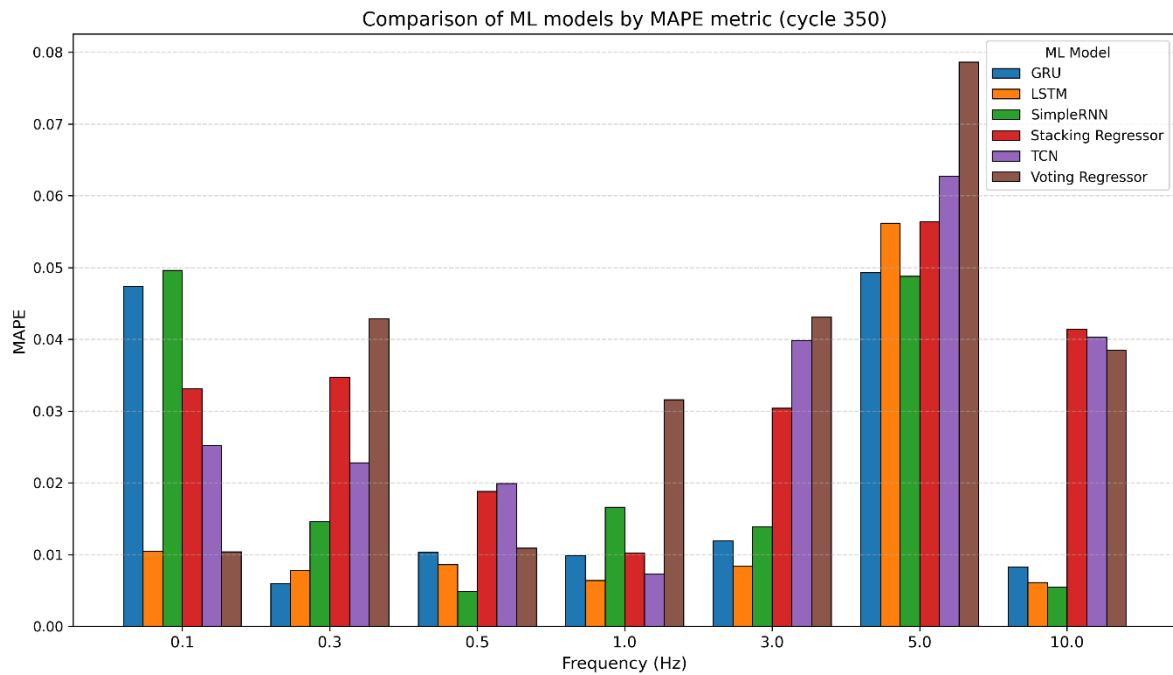


Рис. 4.30. Порівняння моделей машинного навчання за метрикою MAPE на 350 циклі

На циклі 500 спостерігається подальше збільшення відносної похибки майже для всіх моделей.

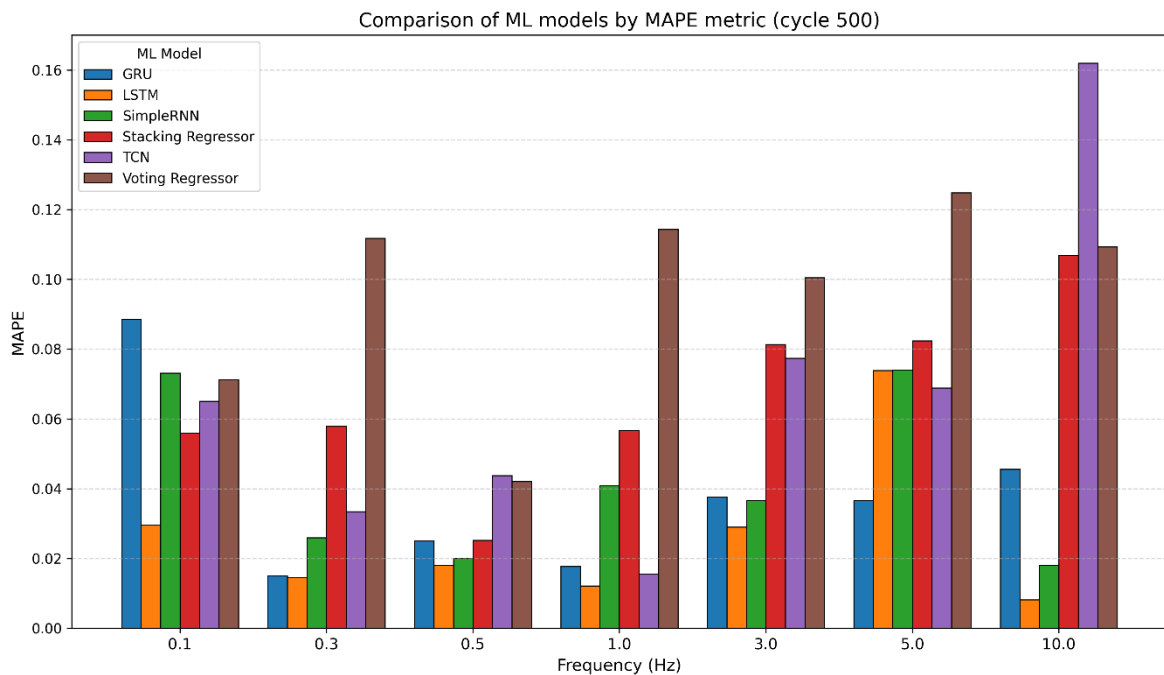


Рис. 4.31. Порівняння моделей машинного навчання за метрикою MAPE на 500 циклі

Особливо це характерно для TCN, VotingRegressor і StackingRegressor, тоді як LSTM знову демонструє найстабільнішу динаміку. Отже, не лише абсолютна, а й відносна похибка прогнозування зростає зі збільшенням віддаленості від навчального діапазону, що підтверджує поступове зниження екстраполяційної здатності моделей.

Аналіз метрики MSE на рисунках 4.32–4.34 дає змогу оцінити, наскільки зростає внесок великих локальних відхилень прогнозу. На циклі 251 значення MSE для більшості моделей залишаються малими, хоча вже помітні окремі погіршення точності. Найбільше значення на 0,1 Гц має TCN, а StackingRegressor демонструє підвищені значення на частотах 3,0–10,0 Гц.

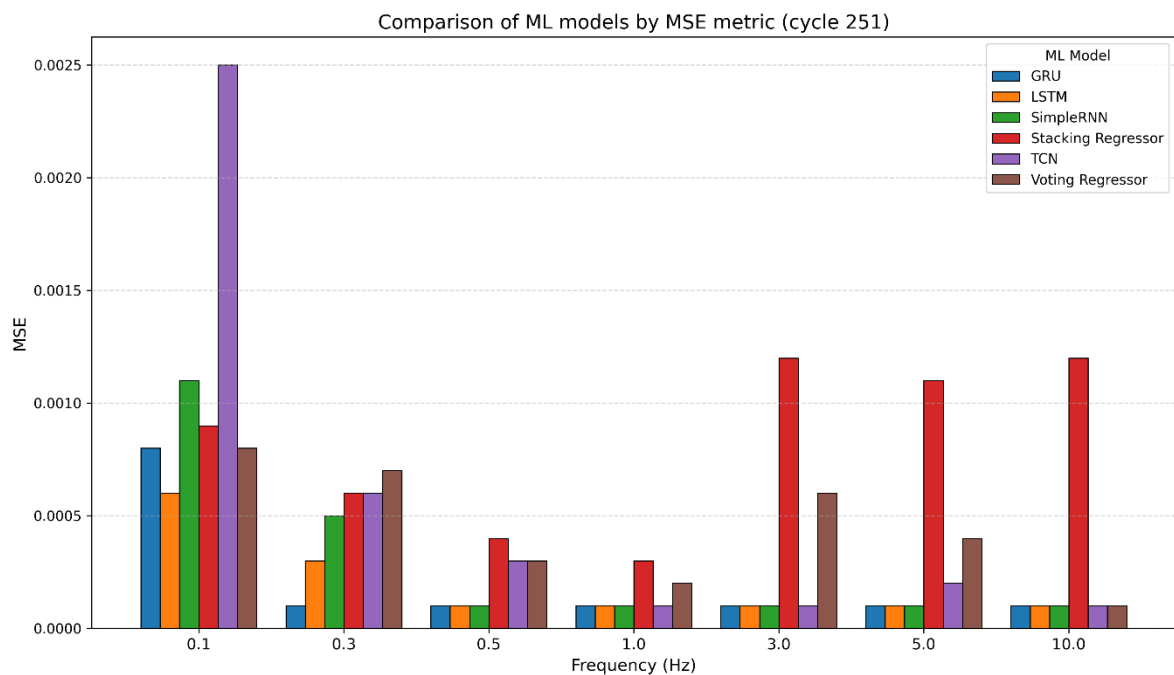


Рис. 4.32. Порівняння моделей машинного навчання за метрикою MSE на 251 циклі

На циклі 350 картина погіршується, особливо на 0,1 Гц, де MSE різко зростає у GRU, SimpleRNN, TCN і StackingRegressor.

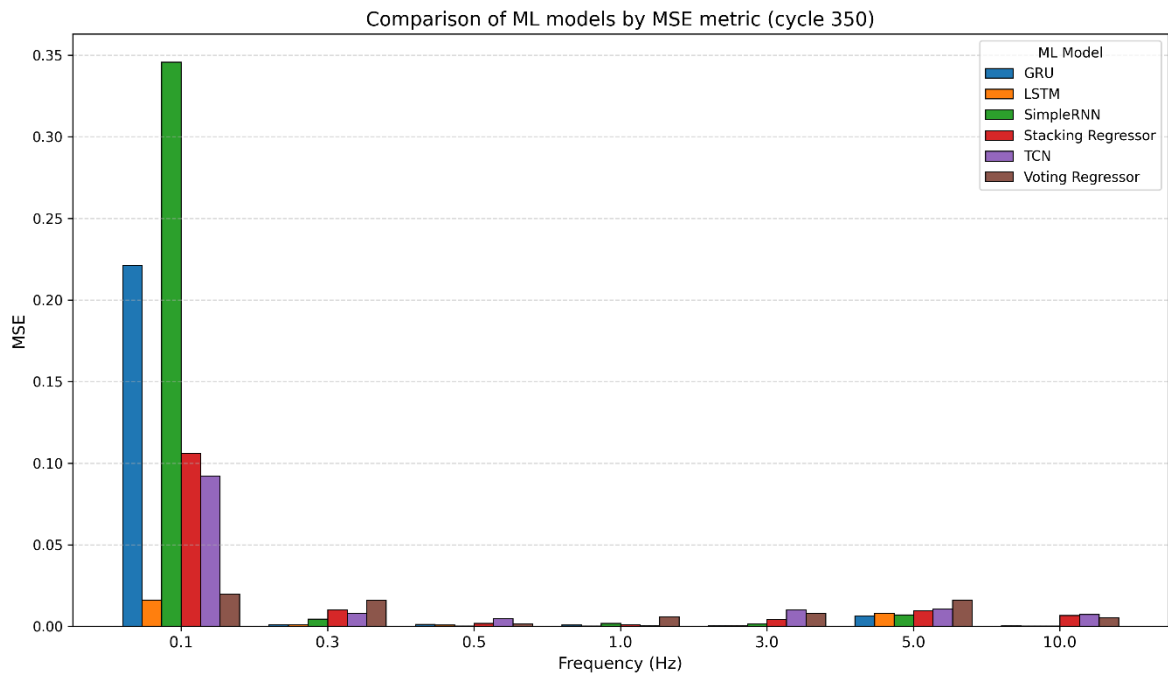


Рис. 4.33. Порівняння моделей машинного навчання за метрикою MSE на 350 циклі

Це означає, що зі збільшенням номера циклу виникають не лише більші середні похибки, а й суттєві локальні розбіжності між експериментальними та прогнозованими значеннями деформації.

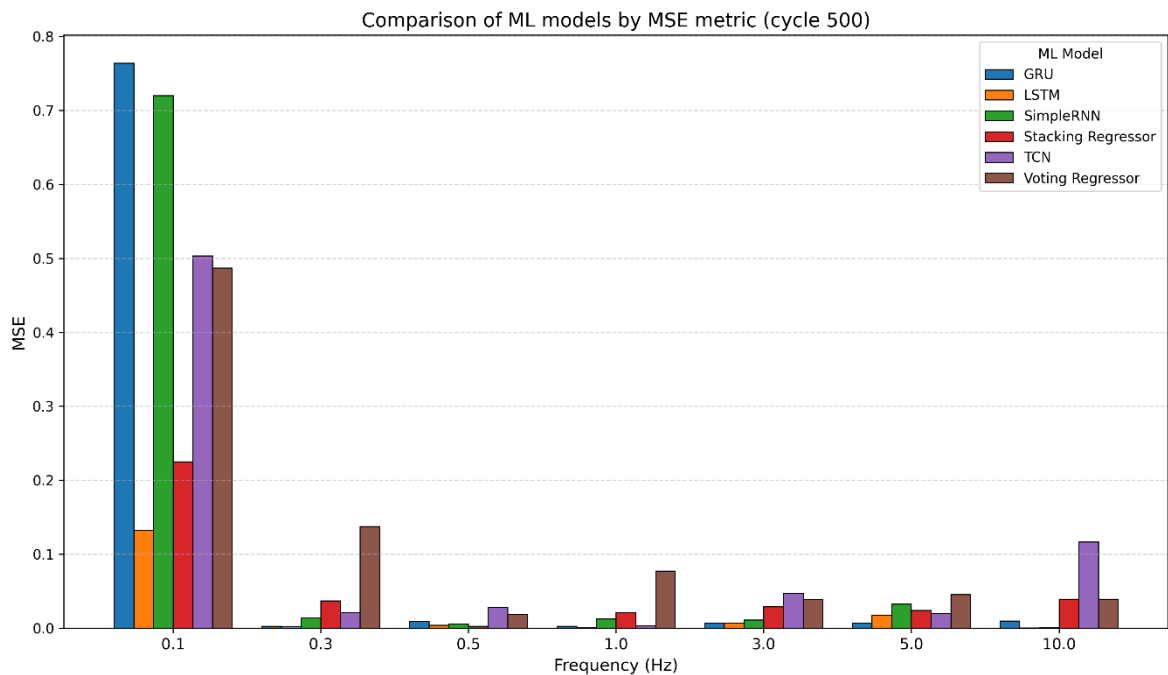


Рис. 4.34. Порівняння моделей машинного навчання за метрикою MSE на 500 циклі

На циклі 500 MSE досягає максимальних значень, знову насамперед для 0,1 Гц. Високі значення також фіксуються для окремих моделей на частотах 0,3, 1,0, 3,0 і 10,0 Гц. Таким чином, з приростом циклу посилюється нестабільність прогнозування, а поява великих одиничних помилок стає більш імовірною.

Найбільш узагальнену оцінку екстраполяційної здатності дає коефіцієнт детермінації  $R^2$ , значення якого наведено на рисунках 4.35–4.37.

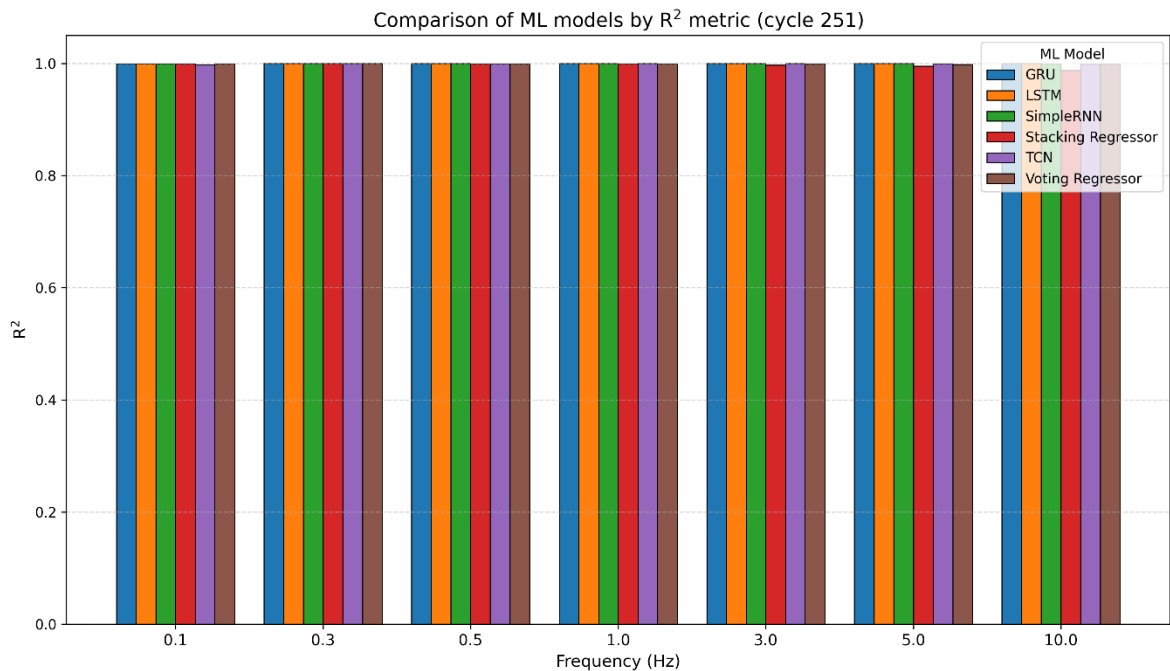


Рис. 4.35. Порівняння значень коефіцієнта детермінації  $R^2$  на 251 циклі

На циклі 251 усі моделі мають значення  $R^2$ , близькі до одиниці, що свідчить про дуже високу якість прогнозування на найближчому екстраполяційному циклі. На циклі 350 значення  $R^2$  загалом залишаються високими для частот 0,3–10,0 Гц, однак на 0,1 Гц спостерігається різке зниження пояснювальної здатності моделей GRU і SimpleRNN. Для LSTM, TCN, VotingRegressor і StackingRegressor на цій частоті погіршення також є помітним, але менш критичним.

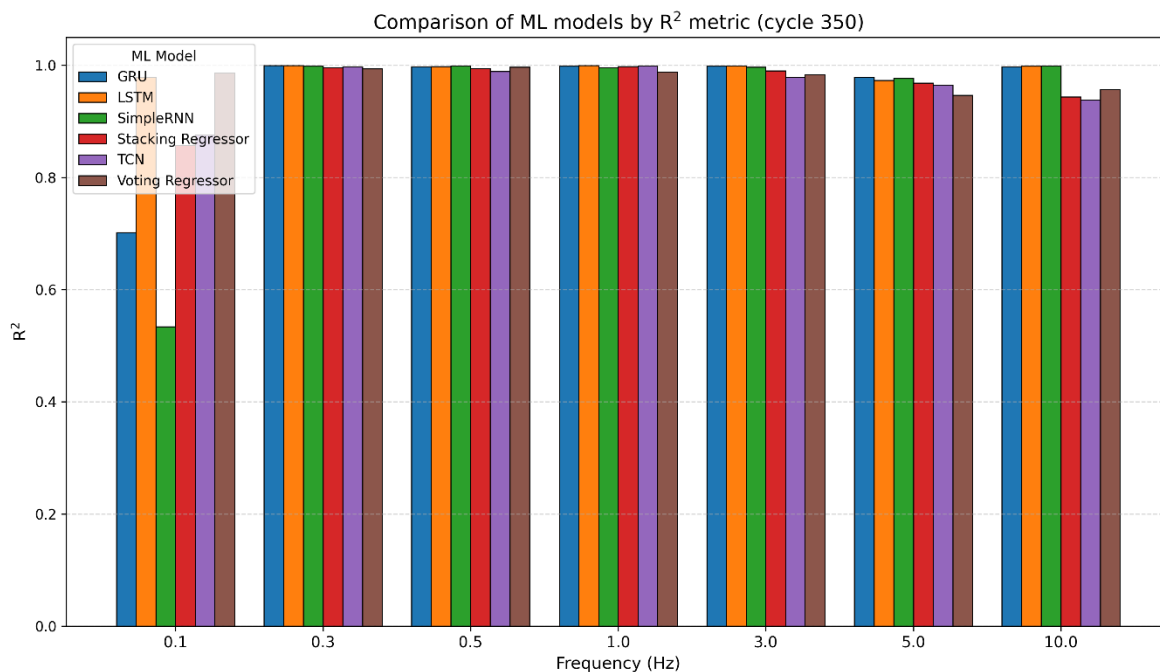


Рис. 4.36. Порівняння значень коефіцієнта детермінації  $R^2$  на 350 циклі

На циклі 500 деградація стає найбільш вираженою.

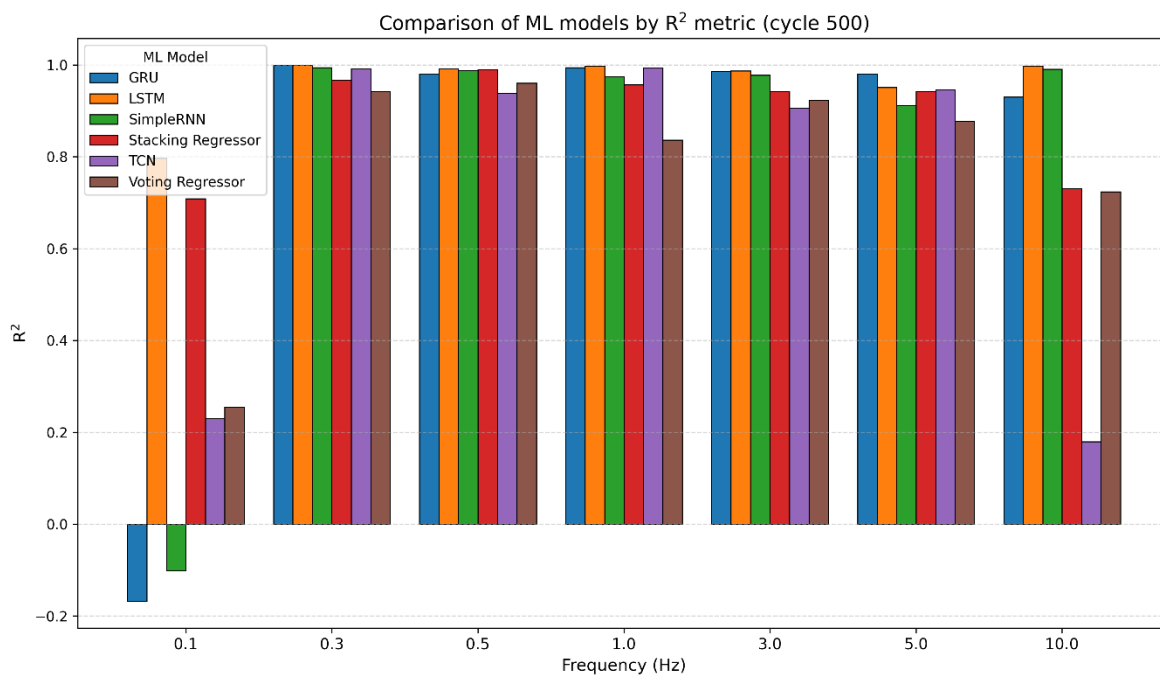


Рис. 4.37. Порівняння значень коефіцієнта детермінації  $R^2$  на 500 циклі

Для частоти 0,1 Гц у моделей GRU та SimpleRNN значення  $R^2$  стає від'ємним, що свідчить про повну втрату спроможності до екстраполяції. Значне

зниження  $R^2$  спостерігається також у TCN, VotingRegressor і StackingRegressor. Крім того, на 10,0 Гц TCN демонструє різке падіння  $R^2$ , а у StackingRegressor і VotingRegressor простежується помітне зменшення узгодженості прогнозу з експериментом. Натомість LSTM зберігає високі значення  $R^2$  на всіх частотах навіть на циклі 500, що свідчить про її найкращу здатність до екстраполяції.

Загалом, аналіз показує, що зі збільшенням номера прогнозованого циклу від 251 до 350 і далі до 500 для всіх моделей характерне закономірне зростання MAE, MAPE та MSE і відповідне зниження  $R^2$ . Проте інтенсивність цієї деградації є різною. Найскладнішою для всіх моделей є екстраполяція за низької частоти 0,1 Гц, де похибки зростають найшвидше, а коефіцієнт детермінації знижується найсуттєвіше. Це може бути пов'язано з більш вираженою нелінійністю та зміною форми гістерезисних петель у процесі накопичення циклічної втоми, що ускладнює їх відтворення моделями на віддалених циклах. Найбільш сприятливими для екстраполяції є частоти 0,3–1,0 Гц, де більшість моделей довше зберігає низькі похибки та високі значення  $R^2$ . У зоні високих частот 5,0–10,0 Гц результати також погіршуються зі зростанням циклу, але ступінь цього погіршення залежить від архітектури моделі.

Порівняння моделей дає можливість зробити висновок, що найкращу загальну екстраполяційну здатність продемонструвала модель LSTM. Для неї характерне найменше зростання похибок при переході від циклу 251 до циклів 350 і 500, а значення  $R^2$  залишаються стабільно високими майже в усьому досліджуваному діапазоні частот. Модель GRU забезпечує високу точність на ближній екстраполяції, однак виявляється вкрай чутливою до зростання циклу на частоті 0,1 Гц. Подібна тенденція, хоча й менш різка на окремих частотах, характерна і для SimpleRNN. Модель TCN демонструє добрі результати в частині частотних режимів, але її поведінка є менш стабільною, особливо на циклі 500 при 0,1 і 10,0 Гц. VotingRegressor і StackingRegressor показують прийнятну точність на циклі 251, проте зі збільшенням номера циклу для них характерне істотніше зростання похибок на високих частотах та в окремих режимах середніх частот.

Отже, проведений порівняльний аналіз підтвердив, що екстраполяційні можливості моделей істотно залежать як від віддаленості прогнозованого циклу від навчального інтервалу, так і від частоти циклічного навантаження. Найбільш точною виявилася модель LSTM, яка забезпечує найкращий баланс між низькими значеннями MAE, MAPE, MSE та високими значеннями  $R^2$ . Найменш точними, особливо для частоти 0,1 Гц, є GRU та SimpleRNN. Це дає підстави розглядати LSTM як найбільш придатну модель для довгострокового прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми за межами навчальної вибірки.

#### 4.6. Висновки до розділу 4

У четвертому розділі представлено результати прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми на основі побудованих ансамблевих моделей (VotingRegressor і StackingRegressor) та моделей глибокого навчання (SimpleRNN, LSTM, GRU і TCN), а також результати інтерпретації одержаних прогнозів із використанням методів пояснюваного штучного інтелекту SHAP та Integrated Gradients. Проведено комплексну оцінку точності побудованих моделей за метриками MSE, MAE,  $R^2$  та MAPE і виконано додаткове тестування на циклах 251, 260, 300, 350, 400, 450 і 500 для перевірки їх екстраполяційної здатності поза навчальним діапазоном 100–250 циклів. На підставі одержаних результатів можна сформулювати такі висновки:

– Встановлено, що ансамблева Voting-модель забезпечує високу точність та коректне відтворення форми петель гістерезису в режимі близької та помірної екстраполяції. Для 251-го та 260-го циклів спостерігається висока узгодженість експериментальних і прогнозованих значень деформації, тоді як зі збільшенням номера циклу точність прогнозування закономірно знижується, що може бути пов'язано зі зміною механічних властивостей матеріалу внаслідок накопичення функціональної втоми. Найкращу стабільність екстраполяції Voting-модель демонструє для середніх частот (0,5–3 Гц), тоді як за частоти 0,1

Гц на віддалених циклах спостерігається різке погіршення показників, що вказує на практичні межі застосовності моделі в умовах повільних процесів деформування.

– З'ясовано, що ансамблева Stacking-модель загалом характеризується високою узгодженістю прогнозів з експериментальними даними у широкому діапазоні частот і номерів циклів та стабільно відтворює петлі гістерезису навіть для віддалених циклів. Найбільш надійні екстраполяційні властивості Stacking-моделі проявляються для середніх частот (0,5–1 Гц), тоді як за високочастотного навантаження (10 Гц) фіксується зменшення точності.

– Встановлено, що рекурентні нейронні мережі LSTM і GRU забезпечують найвищу узагальнювальну здатність при екстраполяції на віддалені цикли, тоді як SimpleRNN є менш точною. Перевага LSTM найбільш виражена у режимах, де критичним є врахування тривалої історії навантаження (особливо при низьких частотах), що пояснюється наявністю механізмів керування пам'яттю (cell state та gates). Отримані результати підтверджують доцільність застосування LSTM-мережі для довгострокового прогнозування еволюції гістерезисної поведінки SMA.

– З'ясовано, що TCN-модель ефективно прогнозує деформацію матеріалу та забезпечує високу точність у діапазоні середніх частот 0,3–1 Гц, зберігаючи загальну форму гістерезисних петель під час екстраполяції до 450-го та 500-го циклів. Водночас встановлено, що екстраполяційна спроможність TCN зменшується в умовах навантаження з частотою 0,1 Гц та дуже високих частот, де спостерігаються значні відхилення прогнозів від експерименту на віддалених циклах тестування.

– Засобами пояснюваного штучного інтелекту встановлено фізичну узгодженість структури впливів вхідних ознак у побудованих моделях. За результатами SHAP-аналізу для ансамблевих підходів і TCN-моделі домінуючим чинником формування прогнозу є параметр Stress, тоді як ознака UpDown стабільно характеризує відмінності між гілками навантаження та розвантаження. Встановлено закономірне зростання внеску ознаки Cycle зі збільшенням номера

циклу, що свідчить про здатність моделей враховувати прояви функціональної втоми матеріалу. Для рекурентних моделей метод Integrated Gradients також показав фізично узгоджену структуру впливу вхідних ознак: визначальний внесок у прогнозовану деформацію має напруження, тоді як внесок номера циклу є меншим, але закономірно зростає на віддалених циклах, що узгоджується з накопиченням функціональної втоми матеріалу.

Загалом результати четвертого розділу підтверджують, що побудовані моделі машинного навчання здатні забезпечувати точне та фізично узгоджене прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми в умовах екстраполяції.

## ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі розв'язано науково-практичну задачу побудови, оцінювання та порівняльного аналізу моделей машинного навчання для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми в умовах циклічного навантаження, а також інтерпретації отриманих прогнозів засобами пояснюваного штучного інтелекту. Одержані результати забезпечують можливість прогнозування гістерезисної поведінки матеріалу як у межах навчального діапазону циклів, так і в режимі екстраполяції на віддалені цикли навантаження, що має важливе значення для оцінювання функціональної втоми, довговічності та експлуатаційної надійності елементів зі сплавів з пам'яттю форми.

Основні наукові й практичні результати роботи полягають у наступному:

1. Проведено аналіз фізичних основ гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми, зокрема особливостей мартенситно-аустенітних фазових перетворень, ефекту пам'яті форми, надпружності, впливу циклічного навантаження та функціональної втоми на зміну залежності “напруження–деформація”. Встановлено, що гістерезисна поведінка таких матеріалів визначається складною нелінійною залежністю між напруженням, деформацією, історією навантаження, частотою циклу та накопиченням функціональної втоми. На цій основі обґрунтовано доцільність використання напруження, номера циклу та індикатора фази навантаження-розвантаження як вхідних змінних під час побудови моделей прогнозування деформації.

2. Проаналізовано сучасний стан досліджень у галузі моделювання властивостей сплавів з пам'яттю форми методами машинного навчання та пояснюваного штучного інтелекту. Показано, що традиційні чисельні методи забезпечують фізично обґрунтований опис властивостей матеріалу, проте характеризуються складністю параметризації, чутливістю до вибору параметрів і значними обчислювальними витратами, що обмежує ефективність прогнозування зміни гістерезисних петель за великої кількості циклів.

Обґрунтовано доцільність застосування моделей машинного навчання для прогнозування гістерезисної поведінки SMA.

3. Виконано попередню обробку, статистичний аналіз і контроль якості експериментальних даних, отриманих під час випробувань NiTi-дроту з пам'яттю форми на малоциклову втому за різних частот циклічного навантаження. Підтверджено відсутність статистично значущих аномалій у вибірці.

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

5. Удосконалено метод оцінювання моделей прогнозування гістерезисної поведінки SMA шляхом застосування групового принципу розбиття даних за номером циклу. Застосування такого підходу дало змогу уникнути витоку інформації між навчальною, валідаційною та тестовою вибірками, а також забезпечити об'єктивне оцінювання узагальнювальної та екстраполяційної здатності побудованих моделей.

6. Удосконалено метод побудови ансамблевої Voting-моделі шляхом визначення ваг базових алгоритмів на основі величини, обернено пропорційної до середнього значення середньоквадратичної похибки, отриманої під час групової крос-валідації. Це забезпечило адаптивний розподіл внеску базових моделей відповідно до їхньої точності та зменшило вплив менш ефективних алгоритмів на підсумковий прогноз.

7. Розроблено та досліджено ансамблеві моделі машинного навчання VotingRegressor і StackingRegressor для прогнозування деформації сплавів з пам'яттю форми.

8. Розроблено та досліджено неймережеві моделі SimpleRNN, LSTM, GRU та TCN для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми. Доведено, що використання рекурентних і темпоральних архітектур є

доцільним, оскільки такі моделі здатні враховувати залежність прогнозованої деформації від попередньої історії навантаження, номера циклу та фази навантаження-розвантаження.

9. Проведено порівняльний аналіз точності ансамблевих і нейромережових моделей у межах навчального діапазону циклів та в режимі екстраполяції. Встановлено, що всі побудовані моделі забезпечують високу точність у межах навчального діапазону циклів, а найкращу здатність до екстраполяційного прогнозування показала модель LSTM.

10. Розроблено програмну систему побудови, навчання, тестування, порівняльного аналізу та інтерпретації моделей прогнозування гістерезисної поведінки SMA. Програмна система забезпечує автоматизацію обчислювальних експериментів, відтворюваність отриманих результатів, збереження моделей, формування графіків, розрахунок метрик точності та побудову пояснень прогнозів засобами ХАІ.

11. Проведено глобальну та локальну інтерпретацію прогнозів побудованих моделей із використанням методів SHAP та Integrated Gradients. Встановлено, що найбільший внесок у прогнозовану деформацію має напруження, тоді як фаза навантаження-розвантаження визначає асиметрію гістерезисної петлі, а вплив номера циклу зростає під час прогнозування на віддалених циклах. Отримані результати свідчать про фізичну узгодженість структури впливів вхідних ознак із відомими закономірностями фазових перетворень, гістерезисної поведінки та накопичення функціональної втоми у сплавах з пам'яттю форми.

Одержаними результатами можна скористатися для прогнозування деформації та форми гістерезисних петель сплавів з пам'яттю форми, оцінювання впливу циклічної втоми на функціональні властивості матеріалу, аналізу розсіюваної енергії та демпфувальної здатності SMA-елементів, підтримки прийняття рішень під час проектування актуаторів, демпферів, сенсорних і конструкційних елементів на основі SMA, а також у наукових

дослідженнях і навчальному процесі в галузях матеріалознавства, машинного навчання та пояснюваного штучного інтелекту.

**ПЕРЕЛІК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ**

1. Chaudhary, K., Haribhakta, V. K., & Jadhav, P. V. (2024). A review of shape memory alloys in MEMS devices and biomedical applications. *Materials Today: Proceedings*. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2024.04.105>
2. Abbas, A., Hung, H.-Y., Lin, P.-C., Yang, K.-C., Chen, M.-C., Lin, H.-C., & Han, Y.-Y. (2021). Atomic layer deposited TiO<sub>2</sub> films on an equiatomic NiTi shape memory alloy for biomedical applications. *Journal of Alloys and Compounds*, 886, 161282. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.161282>
3. Sharma, K., & Srinivas, G. (2020). Flying smart: Smart materials used in aviation industry. *Materials Today: Proceedings*, 27, 244–250. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2019.10.115>
4. Künnecke, S. C., Vasista, S., Riemenschneider, J., Keimer, R., & Kintscher, M. (2021). Review of Adaptive Shock Control Systems. *Applied Sciences*, 11(2), 817. <https://doi.org/10.3390/app11020817>
5. Bovesecchi, G., Corasaniti, S., Costanza, G., & Tata, M. E. (2019). A novel self-deployable solar sail system activated by shape memory alloys. *Aerospace*, 6(7), 78. <https://doi.org/10.3390/aerospace6070078>
6. Costanza, G., & Tata, M. E. (2020). Shape memory alloys for aerospace, recent developments, and new applications: A short review. *Materials*, 13(8), 1856. <https://doi.org/10.3390/ma13081856>
7. Niu, X., Yao, X., & Dong, E. (2025). Design and control of bio-inspired joints for legged robots driven by shape memory alloy wires. *Biomimetics*, 10(6), 378. <https://doi.org/10.3390/biomimetics10060378>
8. Sun, L., & Gu, H. (2025). Envelope morphology of an elephant trunk-like robot based on differential cable–sma spring actuation. *Actuators*, 14(2), 100. <https://doi.org/10.3390/act14020100>
9. Schmelter, T., Bade, L., & Kuhlenkötter, B. (2024). A two-finger gripper actuated by shape memory alloy for applications in automation technology with minimized installation space. *Actuators*, 13(10), 425. <https://doi.org/10.3390/act13100425>

10. Wang, X.-Y., Pei, Y.-C., Yao, Z.-Y., Wang, B.-H., & Wu, L. (2024). A multi-functional sensing unit of planar 3DOFs displacements and forces based on superelastic SMA wires. *Sensors and Actuators A: Physical*, 115766. <https://doi.org/10.1016/j.sna.2024.115766>
11. Riccio, A., Sellitto, A., Ameduri, S., Concilio, A., & Arena, M. (2021). Shape memory alloys (SMA) for automotive applications and challenges. In *Shape Memory Alloy Engineering* (pp. 785–808). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-819264-1.00024-8>
12. Turabimana, P., Sohn, J. W., & Choi, S.-B. (2024). Design and control of a shape memory alloy-based idle air control actuator for a mid-size passenger vehicle application. *Applied Sciences*, 14(11), 4784. <https://doi.org/10.3390/app14114784>
13. Zhang, H., Zhao, L., Li, A., & Xu, S. (2024). Design and hysteretic performance analysis of a novel multi-layer self-centering damper with shape memory alloy. *Buildings*, 14(2), 483. <https://doi.org/10.3390/buildings14020483>
14. Pereiro-Barceló, J., Bonet, J. L., Martínez-Jaén, B., & Cabañero-Escudero, B. (2023). Design recommendations for columns made of ultra-high-performance concrete and niti SMA bars. *Buildings*, 13(4), 991. <https://doi.org/10.3390/buildings13040991>
15. Rodinò, S., Rota, G., Chiodo, M., Corigliano, A., & Maletta, C. (2025). Artificial Intelligence Control Methodologies for Shape Memory Alloy Actuators: A Systematic Review and Performance Analysis. *Micromachines*, 16(7), 780. <https://doi.org/10.3390/mi16070780>
16. Tymoshchuk, D., Yasniy, O., Maruschak, P., Iasnii, V., & Didych, I. (2024). Loading Frequency Classification in Shape Memory Alloys: A Machine Learning Approach. *Computers*, 13(12), 339. <https://doi.org/10.3390/computers13120339>
17. Iasnii, V., Krechkovska, H., Budz, V., Student, O., & Lapusta, Y. (2024). Frequency effect on low-cycle fatigue behavior of pseudoelastic NiTi alloy. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*. <https://doi.org/10.1111/ffe.14331>

18. Sidharth, R., Mohammed, A. S. K., & Sehitoglu, H. (2022). Functional fatigue of nitinol shape memory alloy: Effect of loading frequency and source of residual strains. *Shape Memory and Superelasticity*. <https://doi.org/10.1007/s40830-022-00397-8>
19. Hu, J. (2014). Investigation on the Cyclic Response of Superelastic Shape Memory Alloy (SMA) Slit Damper Devices Simulated by Quasi-Static Finite Element (FE) Analyses. *Materials*, 7(2), 1122–1141. <https://doi.org/10.3390/ma7021122>
20. Prahlad, H., & Chopra, I. (2001). Comparative evaluation of shape memory alloy constitutive models with experimental data. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, 12(6), 383–395. <https://doi.org/10.1106/104538902022599>
21. Farhangi, V., Jahangir, H., Eidgahee, D. R., Karimipour, A., Javan, S. A. N., Hasani, H., Fasihhour, N., & Karakouzian, M. (2021). Behaviour investigation of sma-equipped bar hysteretic dampers using machine learning techniques. *Applied Sciences*, 11(21), 10057. <https://doi.org/10.3390/app112110057>
22. Zakerzadeh, M. R., Naseri, S., & Naseri, P. (2024). Modelling hysteresis in shape memory alloys using LSTM recurrent neural network. *Journal of Applied Mathematics*, 2024, 1–14. <https://doi.org/10.1155/2024/1174438>
23. Pei, Y.-C., Wang, B.-H., Wu, J.-T., Wang, C., Guan, J.-H., & Lu, H. (2022). A machine learning empowered shape memory alloy gripper with displacement-force-stiffness self-sensing. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 1–10. <https://doi.org/10.1109/tie.2022.3222655>
24. Gu, L., Yang, K., Ding, H., Xu, Z., Mao, C., Li, P., Yu, Z., Guo, Y., & Ren, L. (2024). Machine learning in additive manufacturing - NiTi alloy's transformation behavior. *Materials & Design*, 113443. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2024.113443>
25. Liu, S., Kappes, B. B., Amin-ahmadi, B., Benafan, O., Zhang, X., & Stebner, A. P. (2021). Physics-informed machine learning for composition – process – property design: Shape memory alloy demonstration. *Applied Materials Today*, 22, 100898. <https://doi.org/10.1016/j.apmt.2020.100898>
26. Catal, A. A., Bedir, E., Yilmaz, R., & Canadinc, D. (2022). Design of a NiTiHf shape memory alloy with an austenite finish temperature beyond 400 °C utilizing

- artificial intelligence. *Journal of Alloys and Compounds*, 904, 164135. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2022.164135>
27. Thiercelin, L., Peltier, L., & Meraghni, F. (2024). Physics-informed machine learning prediction of the martensitic transformation temperature for the design of “NiTi-like” high entropy shape memory alloys. *Computational Materials Science*, 231, 112578. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2023.112578>
28. Lenzen, N., & Altay, O. (2022). Machine learning enhanced dynamic response modelling of superelastic shape memory alloy wires. *Materials*, 15(1), 304. <https://doi.org/10.3390/ma15010304>
29. Swaminathan, G., Adarsh, S. H., Raju, M., Senthilkumar, K., & Muthu Kumar, T. S. (2025). Artificial neural network-based prediction of functional fatigue behaviour of an NiTi shape memory alloy. *Discover Materials*, 5(1). <https://doi.org/10.1007/s43939-025-00396-3>
30. Chen, Y., Li, R., Sun, X., Gao, X., Teng, J., Tian, Y., Meng, F., Shi, J., Wang, S., Geng, L., & Zhang, J. (2025). Investigation of thermal transformation hysteresis of NiTiHf shape memory alloys via machine learning. *Solid State Communications*, 397, 115830. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2025.115830>
31. Machaka, R., & Radingoana, P. M. (2023). Prediction of narrow HT-SMA thermal hysteresis behaviour using explainable machine learning. *Materials Today Communications*, 105806. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2023.105806>
32. Tian, X., Pan, Y., Li, J., Tong, X., Li, H., Zhao, W., Zhang, H., & Tan, C. (2025). Accelerated design of a novel wide thermal hysteresis NiTi-based shape memory alloy based on interpretable information machine learning. *Journal of Alloys and Compounds*, 179334. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2025.179334>
33. He, S., Wang, Y., Zhang, Z., Xiao, F., Zuo, S., Zhou, Y., Cai, X., & Jin, X. (2023a). Interpretable machine learning workflow for evaluation of the transformation temperatures of TiZrHfNiCoCu high entropy shape memory alloys. *Materials & Design*, 225, 111513. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2022.111513>
34. Sridharan, S., Velayutham, R., Behera, S., & Murugesan, J. (2025). Ensemble-Based machine learning prediction of the temperature-induced properties of ti-

- based high-temperature shape memory alloy. *Shape Memory and Superelasticity*.  
<https://doi.org/10.1007/s40830-025-00557-6>
35. Sridharan, S., Velayutham, R., Behera, S., & Murugesan, J. (2025). Machine learning-based temperature-induced phase transformation temperature prediction of Ti-based high-temperature shape memory alloy. *Journal of Materials Engineering and Performance*. <https://doi.org/10.1007/s11665-025-11236-z>
36. Zhang, X., Su, L., & Li, C. (2025). AI-Enhanced materials selection pipeline for high-performance actuators in power and aerospace systems: Predicting thermal hysteresis in high-temperature shape memory alloys. *Journal of Electronic Materials*. <https://doi.org/10.1007/s11664-025-12554-7>
37. Zadeh, S. H., Behbahanian, A., Broucek, J., Fan, M., Vazquez, G., Noroozi, M., Trehern, W., Qian, X., Karaman, I., & Arroyave, R. (2023). An interpretable boosting-based predictive model for transformation temperatures of shape memory alloys. *Computational Materials Science*, 226, 112225. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2023.112225>
38. Sahoo, K., Diwase, S., Singh, M. K., Santhanam, R., & R, R. M. (2026). Materials Informatics approach to design new high-entropy shape memory alloys. *Scripta Materialia*, 271, 117013. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2025.117013>
39. Liu, C., & Su, H. (2024). Machine learning aided prediction of martensite transformation temperature of NiTi-based shape memory alloy. *Materials Today Communications*, 41, 110720. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2024.110720>
40. Tian, X., Tong, X., Li, J., Pan, Y., Li, H., Zhao, W., Zhang, H., & Tan, C. (2024). Interpretable machine learning for simultaneous designing martensitic transformation temperature and thermal hysteresis of high-entropy shape memory alloys. *Materials Today Communications*, 41, 110431. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2024.110431>
41. Iasnii, V., Bykiv, N., Yasniy, O., & Budz, V. (2022). Methodology and some results of studying the influence of frequency on functional properties of pseudoelastic SMA. *Scientific journal of the Ternopil national technical university*, 107(3), 45–50. [https://doi.org/10.33108/visnyk\\_tntu2022.03.045](https://doi.org/10.33108/visnyk_tntu2022.03.045)

42. Iasnii, V. P., & Junga, R. (2018). Phase transformations and mechanical properties of the nitinol alloy with shape memory. *Materials Science*, 54(3), 406–411. <https://doi.org/10.1007/s11003-018-0199-7>
43. Standard test method for tension testing of nickel-titanium superelastic materials. (n.d.). ASTM International | ASTM. <https://store.astm.org/f2516-14.html>
44. Tymoshchuk, D., Yasniy, O., Didych, I., Maruschak, P., & Lutsyk, N. (2025). Recurrent neural networks with integrated gradients explanation for predicting the hysteresis behavior of shape memory alloys. *Sensors*, 26(1), 110. <https://doi.org/10.3390/s26010110>
45. Explained: Sigma. (n.d.). MIT News | Massachusetts Institute of Technology. <https://news.mit.edu/2012/explained-sigma-0209>
46. (IQR formula) the interquartile range method for outliers. (n.d.). ProCogia. <https://procogia.com/interquartile-range-method-for-reliable-data-analysis/>
47. GeeksforGeeks. (2020, May 7). Z-Score in statistics | engineering mathematics - geeksforgeeks. <https://www.geeksforgeeks.org/data-science/z-score-in-statistics/>
48. GroupShuffleSplit. (n.d.). scikit-learn. [https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model\\_selection.GroupShuffleSplit.html](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model_selection.GroupShuffleSplit.html)
49. GroupKFold. (n.d.). scikit-learn. [https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model\\_selection.GroupKFold.html](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model_selection.GroupKFold.html)
50. Out of fold predictions(oof) | kaggle. (n.d.). Kaggle: Your Machine Learning and Data Science Community. <https://www.kaggle.com/discussions/getting-started/177975>
51. GeeksforGeeks. (2023, September 26). What is the oof(out of fold) approach? - geeksforgeeks. <https://www.geeksforgeeks.org/data-science/what-is-the-oofout-of-fold-approach/>
52. Tymoshchuk, D., & Yasniy, O. (2025). Modelling of hysteresis behaviour of nickel-titanium shape memory alloy using artificial neural network. *Measuring and Computing Devices in Technological Processes*, (2), 285–289. <https://doi.org/10.31891/2219-9365-2025-82-40>

53. Yasniy, O., Tymoshchuk, D., Didych, I., Iasnii, V., & Pasternak, I. (2025). Modelling the properties of shape memory alloys using machine learning methods. *Procedia Structural Integrity*, 68, 132–138. <https://doi.org/10.1016/j.prostr.2025.06.033>
54. Yasniy, O., Tymoshchuk, D., Didych, I., Zoloty, R., & Tymoshchuk, V. (2025). Modeling of shape memory alloys hysteresis behavior considering the loading cycle frequency. *Procedia Structural Integrity*, 72, 188–194. <https://doi.org/10.1016/j.prostr.2025.08.091>
55. VotingRegressor. (n.d.). scikit-learn. <https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.ensemble.VotingRegressor.html>
56. Tymoshchuk, D., Yasniy, O., Lapusta, Y., Didych, I., Pasternak, I., & Iasnii, V. (2026). Modeling the hysteresis behavior of SMA by an ensemble voting machine learning model. *Procedia Structural Integrity*, 81, 35–40. <https://doi.org/10.1016/j.prostr.2026.03.007>
57. StackingRegressor. (n.d.). scikit-learn. <https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.ensemble.StackingRegressor.html>
58. Tymoshchuk, D., Yasniy, O., Didych, I., Stanko, A., & Medvid, V. (2026). Prediction of SMA hysteresis behavior by ensemble stacking machine learning model with SHAP-based explanation. *Progress in Engineering Science*, 100237. <https://doi.org/10.1016/j.pes.2026.100237>
59. Tymoshchuk, D., & Yasniy, O. (2025). Information technology for predicting the hysteresis behavior of shape memory alloys based on a stacking ensemble machine learning model. *Scientific Journal of the Ternopil National Technical University*, 119(3), 134–146. [https://doi.org/10.33108/visnyk\\_tntu2025.03.134](https://doi.org/10.33108/visnyk_tntu2025.03.134)
60. Elman, J. L. (1990). Finding structure in time. *Cognitive Science*, 14(2), 179–211. [https://doi.org/10.1207/s15516709cog1402\\_1](https://doi.org/10.1207/s15516709cog1402_1)
61. Recurrent Neural Networks. (n.d.). Dive into Deep. [https://d2l.ai/chapter\\_recurrent-neural-networks/rnn.html](https://d2l.ai/chapter_recurrent-neural-networks/rnn.html)

62. Gers, F. A., Schmidhuber, J., & Cummins, F. (2000). Learning to forget: Continual prediction with LSTM. *Neural Computation*, 12(10), 2451–2471. <https://doi.org/10.1162/089976600300015015>
63. Hochreiter, S., & Schmidhuber, J. (1997). Long Short-Term Memory. *Neural Computation*, 9(8), 1735–1780. <https://doi.org/10.1162/neco.1997.9.8.1735>
64. Long Short-Term Memory (LSTM). (n.d.). Dive into Deep Learning. [https://d2l.ai/chapter\\_recurrent-modern/lstm.html](https://d2l.ai/chapter_recurrent-modern/lstm.html)
65. Cho, K., Van Merriënboer, B., Bahdanau, D., & Bengio, Y. (2014). On the properties of neural machine translation: Encoder-decoder approaches. arXiv preprint arXiv:1409.1259.
66. Chung, J., Gulcehre, C., Cho, K., & Bengio, Y. (2014). Empirical evaluation of gated recurrent neural networks on sequence modeling. arXiv preprint arXiv:1412.3555.
67. Gated Recurrent Units (GRU). (n.d.). Dive into Deep Learning. [https://d2l.ai/chapter\\_recurrent-modern/gru.html](https://d2l.ai/chapter_recurrent-modern/gru.html)
68. Bai, S., Kolter, J. Z., & Koltun, V. (2018). An empirical evaluation of generic convolutional and recurrent networks for sequence modeling. arXiv. arXiv preprint arXiv:1803.01271, 10.
69. GitHub - baichenjia/tensorflow-tcn: Tensorflow eager implementation of temporal convolutional network (TCN). (n.d.). GitHub. <https://github.com/Baichenjia/Tensorflow-TCN>
70. Tymoshchuk, D., Yasniy, O., Didych, I., Maruschak, P., Lapusta, Y. (2026). Prediction of SMA Hysteresis Behavior: A Deep Learning Approach with Explainable AI. *Computers, Materials & Continua*, 87(3), 24. <https://doi.org/10.32604/cmc.2026.077062>
71. Metrics and scoring: Quantifying the quality of predictions. (n.d.). scikit-learn. [https://scikit-learn.org/stable/modules/model\\_evaluation.html#model-evaluation](https://scikit-learn.org/stable/modules/model_evaluation.html#model-evaluation)
72. What is explainable AI (XAI)? (n.d.). IBM. <https://www.ibm.com/think/topics/explainable-ai>
73. SHAP (n.d.). SHAP latest documentation. <https://shap.readthedocs.io/en/latest/>

74. GitHub - shap/shap: A game theoretic approach to explain the output of any machine learning model. (n.d.). GitHub. <https://github.com/shap/shap>
75. Lundberg, S. M., & Lee, S. I. (2017). A unified approach to interpreting model predictions. *Advances in neural information processing systems*, 30.
76. GitHub - ankurtaly/Integrated-Gradients: Attributing predictions made by the Inception network using the Integrated Gradients method. (n.d.). GitHub. <https://github.com/ankurtaly/Integrated-Gradients>
77. Sundararajan, M., Taly, A., & Yan, Q. (2017, July). Axiomatic attribution for deep networks. In *International conference on machine learning* (pp. 3319-3328). PMLR.
78. Introduction to the keras tuner | tensorflow core. (n.d.). TensorFlow. [https://www.tensorflow.org/tutorials/keras/keras\\_tuner](https://www.tensorflow.org/tutorials/keras/keras_tuner)
79. Supervised learning. (n.d.). scikit-learn. [https://scikit-learn.org/stable/supervised\\_learning.html](https://scikit-learn.org/stable/supervised_learning.html)
80. Keras: The High-Level API for TensorFlow | TensorFlow Core. (n.d.). TensorFlow. <https://www.tensorflow.org/guide/keras>
81. NumPy documentation. (n.d.). NumPy. <https://numpy.org/doc/stable/>
82. Pandas documentation. (n.d.). pandas - Python Data Analysis Library. <https://pandas.pydata.org/docs/>
83. Matplotlib - visualization with python. (n.d.). Matplotlib. <https://matplotlib.org/>
84. Statistical data visualization - seaborn documentation. (n.d.). Seaborn. <https://seaborn.pydata.org/>
85. Integrated gradients | TensorFlow Core. (n.d.). TensorFlow. [https://www.tensorflow.org/tutorials/interpretability/integrated\\_gradients](https://www.tensorflow.org/tutorials/interpretability/integrated_gradients)
86. Running Python functions as pipeline jobs - joblib documentation. (n.d.). Joblib. <https://joblib.readthedocs.io/en/stable/>

## ДОДАТКИ

ДОДАТОК А. Список публікацій здобувача за темою дисертації та  
відомості про апробацію результатів дисертаційної роботи

*Праці, в яких опубліковано основні наукові результати дисертації*

*Публікації у фахових виданнях України:*

1. **Tymoshchuk, D<sup>1</sup>.**, & Yasniy, O<sup>2</sup>. (2025). Modelling of hysteresis behaviour of nickel-titanium shape memory alloy using artificial neural network. *Measuring and Computing Devices in Technological Processes*, (2), 285–289. <https://doi.org/10.31891/2219-9365-2025-82-40>. (Особистий внесок: 1-формування концепції дослідження, розроблення його методологічних засад, створення програмного забезпечення, проведення валідації отриманих результатів, виконання дослідницької роботи, підготовка та впорядкування даних, написання початкового варіанта рукопису, участь у його доопрацюванні та редагуванні, а також підготовка візуалізацій результатів дослідження. 2 - планував і керував дослідженням.).
2. **Tymoshchuk, D<sup>1</sup>.**, & Yasniy, O<sup>2</sup>. (2025). Information technology for predicting the hysteresis behavior of shape memory alloys based on a stacking ensemble machine learning model. *Scientific Journal of the Ternopil National Technical University*, 119(3), 134–146. [https://doi.org/10.33108/visnyk\\_tntu2025.03.134](https://doi.org/10.33108/visnyk_tntu2025.03.134). (Особистий внесок: 1 - формування концепції дослідження, розроблення його методологічних засад, створення програмного забезпечення, проведення валідації отриманих результатів, виконання дослідницької роботи, підготовка та впорядкування даних, написання початкового варіанта рукопису, участь у його доопрацюванні та редагуванні, а також підготовка візуалізацій результатів дослідження. 2 - планував і керував дослідженням.).

*Публікації у виданнях, які індексуються у міжнародній наукометричній базі Scopus:*

1. **Tymoshchuk, D.**, Yasniy, O., Didych, I., Maruschak, P., & Lutsyk, N. (2025). Recurrent neural networks with integrated gradients explanation for predicting the hysteresis behavior of shape memory alloys. *Sensors*, 26(1), 110. <https://doi.org/10.3390/s26010110>.
2. Yasniy, O., **Tymoshchuk, D.**, Didych, I., Iasnii, V., & Pasternak, I. (2025). Modelling the properties of shape memory alloys using machine learning methods. *Procedia Structural Integrity*, 68, 132–138. <https://doi.org/10.1016/j.prostr.2025.06.033>.
3. Yasniy, O., **Tymoshchuk, D.**, Didych, I., Zoloty, R., & Tymoshchuk, V. (2025). Modeling of shape memory alloys hysteresis behavior considering the loading cycle frequency. *Procedia Structural Integrity*, 72, 188–194. <https://doi.org/10.1016/j.prostr.2025.08.091>.
4. **Tymoshchuk, D.**, Yasniy, O., Didych, I., Stanko, A., & Medvid, V. (2026). Prediction of SMA hysteresis behavior by ensemble stacking machine learning model with SHAP-based explanation. *Progress in Engineering Science*, 100237. <https://doi.org/10.1016/j.pes.2026.100237>.
5. **Tymoshchuk, D.**, Yasniy, O., Didych, I., Maruschak, P., Lapusta, Y. (2026). Prediction of SMA Hysteresis Behavior: A Deep Learning Approach with Explainable AI. *Computers, Materials & Continua*, 87(3), 24. <https://doi.org/10.32604/cmc.2026.077062>.
6. **Tymoshchuk, D.**, Yasniy, O., Lapusta, Y., Didych, I., Pasternak, I., & Iasnii, V. (2026). Modeling the hysteresis behavior of SMA by an ensemble voting machine learning model. *Procedia Structural Integrity*, 81, 35–40. <https://doi.org/10.1016/j.prostr.2026.03.007>.

*Праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:*

1. Yasniy, O., **Tymoshchuk, D.**, Didych, I., Iasnii, V., & Pasternak, I. (2024, August 26–30). Modeling of hysteresis in shape memory alloys using artificial neural network. European Conference on Fracture 2024 Structural Integrity and Durability (ECF24), Zagreb, Croatia.
2. Yasniy, O., **Tymoshchuk, D.**, Didych, I., Iasnii, V., & Tymoshchuk, V. (2024, November 17–19). Modelling of shape memory alloys hysteretic behaviour considering the loading cycle frequency. 12th Annual Conference of Society of Structural Integrity and Life (DIVK12), Belgrade, Serbia.
3. **Tymoshchuk, D.**, Yasniy, O., Didych, I., Medvid, V., & Stanko, A. (2025, November 25–28). Prediction of SMA hysteresis behaviour by ensemble stacking machine learning. 1st Biennial ESIS-CSIC Conference on Structural Integrity (BECCSI 2025), Belgrade, Serbia.
4. **Tymoshchuk, D.**, Yasniy, O., Didych, I., Pasternak, I., & Nykytyuk, V. (2025, October 15–17). Modeling the hysteresis behavior of SMA by an ensemble voting machine learning model. VIII International Conference “In-service Damage of Materials: Diagnostics and Prediction” (DMDP 2025), Ternopil, Ukraine.

## ДОДАТОК Б. Довідки та акти впровадження результатів дисертаційного дослідження



**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
ТЕРНОПІЛЬСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
імені ІВАНА ПУЛЮЯ**

вул. Руська, 56, м. Тернопіль, 46001. Тел. (0352)52-41-81. Факс (0352)25-49-83  
http://www.tntu.edu.ua, E-mail: univ@tu.edu.te.ua. Код ЄДРПОУ 05408102

*23.04.2026* № *2/28-571* На № \_\_\_\_\_



**«ЗАТВЕРДЖУЮ»**  
Перший проректор ТНТУ  
Олег ЛЯШУК  
«*23*» *04* 202*6*р.

### ДОВІДКА

про впровадження результатів дисертаційної роботи

*Тимощука Дмитра Івановича*

на тему «Методи та моделі машинного навчання для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми», поданого на здобуття ступеня доктора філософії за спеціальністю 122 «Комп'ютерні науки» в освітній процес Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя

Запропоновані у дисертаційній роботі Тимощука Дмитра Івановича підходи до розроблення ансамблевих моделей та моделей глибокого машинного навчання для прогнозування складних нелінійних процесів, а також застосування методів пояснюваного штучного інтелекту (ХАІ), зокрема SHAP та Integrated Gradients, і підходи до аналізу та інтерпретації результатів моделювання впроваджено в навчальний процес кафедри комп'ютерно-інтегрованих технологій. Зазначені результати використовуються під час проведення лекційних занять з дисципліни «Методи та системи штучного інтелекту» для здобувачів освітнього рівня «Бакалавр» спеціальності 174 «Автоматизація, комп'ютерно-інтегровані технології та робототехніка» за освітньою програмою «Комп'ютеризовані системи управління та прикладне програмування». Впровадження результатів дисертаційної роботи дало змогу підвищити рівень підготовки здобувачів, поглибити їхні знання у сфері сучасних методів машинного навчання та пояснюваного штучного інтелекту, а також сформувати практичні навички застосування цих методів для розв'язання складних інженерних задач.

### ПОГОДЖЕНО:

Гарант ОПП 174 «Автоматизація, комп'ютерно-інтегровані технології та робототехніка»,  
к.т.н., доц. **Роман ЗОЛОТИЙ**

Завідувач кафедри комп'ютерно-інтегрованих технологій  
к.т.н., доц. **Олександр ГОЛОТЕНКО**

Керівник навчального відділу  
к.т.н., доц. **Ігор ТКАЧЕНКО**



МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
 ТЕРНОПІЛЬСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
 імені ІВАНА ПУЛЮЯ

вул. Руська, 56, м. Тернопіль, 46001. Тел. (0352)52-41-81. Факс (0352)25-49-83  
 http://www.tntu.edu.ua, E-mail: univ@tu.edu.te.ua. Код ЄДРПОУ 05408102

23.04.2026 № 2/28-542 На №



«ЗАТВЕРДЖУЮ»  
 Перший проректор ТНТУ  
 Олег ЛЯШУК  
 04 2026 р.

**ДОВІДКА**

про впровадження результатів дисертаційної роботи

*Тимощука Дмитра Івановича*

на тему «Методи та моделі машинного навчання для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми», поданого на здобуття ступеня доктора філософії за спеціальністю 122 «Комп'ютерні науки» в освітній процес Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя

Результати дисертаційної роботи Тимощука Дмитра Івановича, що пов'язані з побудовою та застосуванням моделей машинного навчання для прогнозування складних нелінійних процесів, методами попередньої обробки експериментальних даних, підходами до формування інформативних ознак, а також методами оцінювання точності, узагальнювальної здатності та інтерпретованості моделей, використано в навчальному процесі кафедри систем штучного інтелекту та аналізу даних при проведенні лекційних занять з дисципліни «Машинне навчання» для здобувачів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти спеціальності 124 «Системний аналіз» освітньо-професійної програми «Інтелектуальний аналіз даних». Використання зазначених результатів у навчальному процесі дало змогу підвищити рівень компетентності студентів щодо сучасних підходів до аналізу даних, побудови моделей прогнозування, оцінювання їхньої ефективності, інтерпретації результатів машинного навчання та практичного застосування інтелектуальних інформаційних технологій для розв'язання складних прикладних задач.

**ПОГОДЖЕНО:**

Гарант ОПП «Інтелектуальний аналіз даних»,  
 д.т.н., проф.

Олег ЯСНІЙ

Завідувач кафедри систем  
 штучного інтелекту та аналізу даних  
 к.т.н., доц.

Василь ЯЦИШИН

Керівник навчального відділу  
 к.т.н., доц.

Ігор ТКАЧЕНКО



## ТОВ «СЕЙСМО АНАЛІТИКС»

Код ЄДРПОУ 43924508  
 IBAN: UA853052990000026003045918760 в АТ  
 КБ «ПриватБанк»  
 62441, Харківська обл., Харківський р-н,  
 с. Циркуни, вул. Тиха, буд. 26

Вих. № 151

від 27.04.2026

### АКТ ВПРОВАДЖЕННЯ

результатів дисертаційного дослідження Тимошука Дмитра Івановича «Методи та моделі машинного навчання для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми» в ТОВ «СЕЙСМО АНАЛІТИКС».

Результати, отримані Тимошуком Д.І. при виконанні ним дисертаційного дослідження на тему «Методи та моделі машинного навчання для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми», а саме:

- підходи до підвищення точності прогнозування за рахунок урахування циклічності процесів, нелінійних закономірностей та особливостей зміни станів досліджуваних систем;
- засоби інтерпретації результатів машинного навчання, зокрема методи оцінювання впливу вхідних параметрів на результати прогнозування, що забезпечують підвищення прозорості та обґрунтованості прийняття рішень;
- підходи до аналізу даних у задачах інженерного й прикладного характеру.

Були використані у ТОВ «СЕЙСМО АНАЛІТИКС» при розробленні та вдосконаленні підходів до аналізу експериментальних даних, пов'язаних із виявленням нелінійних залежностей, прогнозуванням поведінки досліджуваних об'єктів та підвищенням ефективності оброблення даних у прикладних аналітичних задачах. Впровадження результатів дисертаційної роботи дало змогу підвищити якість аналітичного опрацювання даних, розширити можливості застосування методів машинного навчання для прогнозування складних процесів, покращити обґрунтованість отриманих результатів завдяки використанню інтерпретованих моделей та сприяти підвищенню ефективності в діяльності підприємства.

Даний акт не є підставою для проведення фінансових розрахунків.

**Директор**  
**ТОВ «СЕЙСМО АНАЛІТИКС»**



**Варавін А.В.**

**ТОВ "Ново-Ком"**

ЄДРПОУ 31138586

Р/р UA213253650000002600501610333 в

ПАТ "КРЕДОБАНК"

46001, м.Тернопіль, вул. Ів.Франка, 23

Вих. № 5

від 30.04.2026

**Акт впровадження**

результатів дисертаційного дослідження Тимощука Дмитра Івановича «Методи та моделі машинного навчання для прогнозування гістерезисної поведінки сплавів з пам'яттю форми» в ТОВ «Ново-Ком».

У межах впровадження результатів дисертаційного дослідження Тимощука Д.І. у ТОВ «Ново-Ком» здійснено апробацію та практичне використання науково-методичних розробок, спрямованих на вдосконалення методів аналізу та прогнозування складних нелінійних процесів у прикладних задачах. Зокрема, у діяльності з розроблення інформаційно-аналітичних систем впроваджено підходи до застосування сучасних методів пояснюваного штучного інтелекту, серед яких SHAP та Integrated Gradients, що забезпечують детальний аналіз внеску кожної ознаки у формування результату прогнозування. Також застосовано програмні рішення для інтеграції моделей машинного навчання з модулями пояснюваного штучного інтелекту, що підвищують прозорість функціонування аналітичних систем.

Зазначені результати були використані при вирішенні задач аналізу багатофакторних залежностей та прогнозування поведінки об'єктів у змінних умовах із застосуванням методів пояснюваного штучного інтелекту, що дозволило підвищити інформативність результатів моделювання та забезпечити можливість їх інтерпретації фахівцями предметної області.

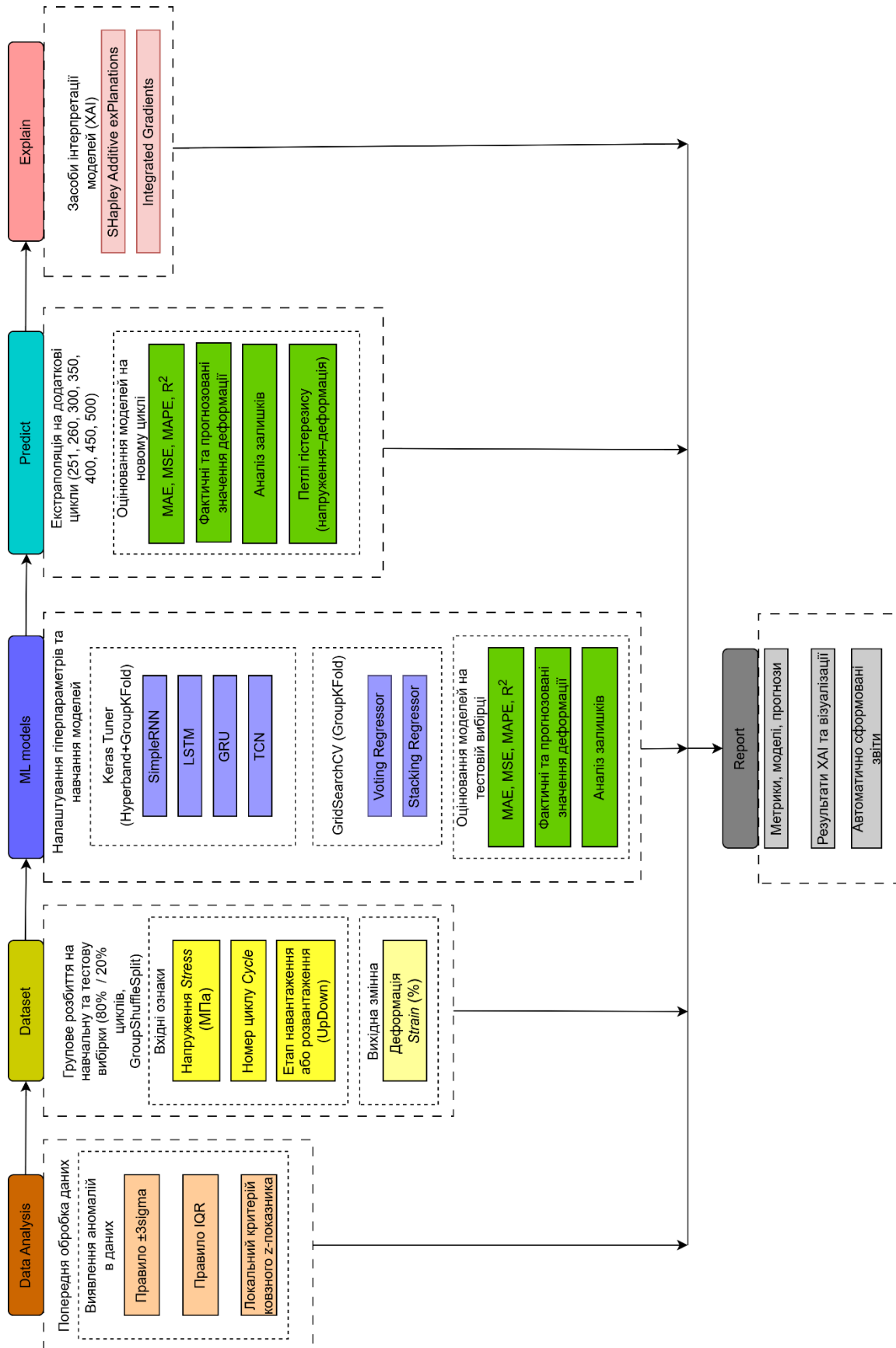
Даний акт не є підставою для проведення фінансових розрахунків.

Директор ТОВ «Ново-Ком»



Андрій Грицина

## ДОДАТОК В. Архітектура програмної системи дослідження



## ДОДАТОК Г. Метрики точності Voting-моделей

Таблиця Г.1.

Метрики точності ансамблевої Voting-моделі для частоти навантаження  
0,1 Гц

Цикл	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
251	0,0008	0,0217	0,9992	0,0024
260	0,0062	0,0572	0,9939	0,0066
300	0,0131	0,0870	0,9846	0,0098
350	0,0198	0,1009	0,9867	0,0104
400	0,0554	0,2210	0,9248	0,0228
450	0,1994	0,4330	0,7007	0,0445
500	0,4869	0,6894	0,2550	0,0712

Таблиця Г.2.

Метрики точності ансамблевої Voting-моделі для частоти навантаження  
0,3 Гц

Цикл	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
251	0,0007	0,0203	0,9997	0,0065
260	0,0007	0,0205	0,9997	0,0067
300	0,0039	0,0537	0,9985	0,0206
350	0,0161	0,1169	0,9938	0,0429
400	0,0453	0,2052	0,9818	0,0692
450	0,0795	0,2741	0,9676	0,0871
500	0,1376	0,3625	0,9424	0,1118

Таблиця Г.3.

Метрики точності ансамблевої Voting-моделі для частоти навантаження  
0,5 Гц

Цикл	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
251	0,0003	0,0134	0,9993	0,0047
260	0,0004	0,0178	0,9991	0,0059
300	0,0006	0,0218	0,9986	0,0075
350	0,0016	0,0347	0,9964	0,0109
400	0,0041	0,0555	0,9911	0,0180
450	0,0102	0,0962	0,9770	0,0304
500	0,0187	0,1332	0,9599	0,0421

Таблиця Г.4.

Метрики точності ансамблевої Voting-моделі для частоти навантаження 1

Гц

Цикл	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
251	0,0002	0,0118	0,9994	0,0051
260	0,0003	0,0124	0,9994	0,0052
300	0,0007	0,0194	0,9985	0,0088
350	0,0059	0,0721	0,9878	0,0316
400	0,0193	0,1355	0,9604	0,0577
450	0,0440	0,2078	0,9086	0,0870
500	0,0775	0,2771	0,8362	0,1143

Таблиця Г.5.

Метрики точності ансамблевої Voting-моделі для частоти навантаження 3

Гц

Цикл	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
251	0,0006	0,0182	0,9985	0,0092
260	0,0006	0,0189	0,9985	0,0098
300	0,0019	0,0366	0,9956	0,0203
350	0,0081	0,0709	0,9829	0,0431
400	0,0130	0,0900	0,9736	0,0545
450	0,0213	0,1221	0,9577	0,0718
500	0,0391	0,1805	0,9231	0,1005

Таблиця Г.6.

Метрики точності ансамблевої Voting-моделі для частоти навантаження 5

Гц

Цикл	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
251	0,0004	0,0155	0,9982	0,0084
260	0,0004	0,0161	0,9983	0,0092
300	0,0095	0,0788	0,9653	0,0591
350	0,0163	0,1069	0,9465	0,0786
400	0,0272	0,1342	0,9177	0,1007
450	0,0314	0,1471	0,9103	0,1045
500	0,0455	0,1774	0,8769	0,1248

Метрики точності ансамблевої Voting-моделі для частоти навантаження 10

Гц

<b>Цикл</b>	<b>MSE</b>	<b>MAE</b>	<b><math>R^2</math></b>	<b>MAPE</b>
251	0,0001	0,0082	0,9989	0,0046
260	0,0002	0,0128	0,9975	0,0070
300	0,0007	0,0218	0,9928	0,0130
350	0,0052	0,0662	0,9566	0,0385
400	0,0103	0,0940	0,9188	0,0540
450	0,0190	0,1301	0,8590	0,0742
500	0,0392	0,1891	0,7236	0,1093

## ДОДАТОК Д. Метрики точності Stacking-моделей

Таблиця Д.1.

Метрики точності ансамблевої Stacking-моделі для частоти навантаження  
0,1 Гц

Цикл	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
251	0,0009	0,0250	0,9991	0,0028
260	0,0082	0,0704	0,9921	0,0080
300	0,0450	0,1797	0,9474	0,0199
350	0,1059	0,3141	0,8571	0,0331
400	0,1454	0,3751	0,8028	0,0394
450	0,1580	0,3876	0,7628	0,0406
500	0,2250	0,4420	0,7086	0,0559

Таблиця Д.2.

Метрики точності ансамблевої Stacking-моделі для частоти навантаження  
0,3 Гц

Цикл	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
251	0,0006	0,0188	0,9997	0,0062
260	0,0009	0,0245	0,9996	0,0074
300	0,0027	0,0432	0,9989	0,0145
350	0,0102	0,0891	0,9960	0,0347
400	0,0130	0,0954	0,9947	0,0395
450	0,0194	0,1793	0,9861	0,0425
500	0,0373	0,2665	0,9669	0,0579

Таблиця Д.3.

Метрики точності ансамблевої Stacking-моделі для частоти навантаження  
0,5 Гц

Цикл	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
251	0,0004	0,0167	0,9992	0,0059
260	0,0008	0,0253	0,9983	0,0085
300	0,0015	0,0339	0,9969	0,0116
350	0,0018	0,0363	0,9940	0,0188
400	0,0020	0,0419	0,9926	0,0198
450	0,0024	0,0430	0,9906	0,0203
500	0,0028	0,0445	0,9898	0,0252

Таблиця Д.4.

Метрики точності ансамблевої Stacking-моделі для частоти навантаження

1 Гц

Цикл	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
251	0,0003	0,0155	0,9992	0,0068
260	0,0004	0,0158	0,9990	0,0073
300	0,0006	0,0203	0,9987	0,0078
350	0,0010	0,0259	0,9978	0,0102
400	0,0024	0,0391	0,9951	0,0183
450	0,0103	0,0769	0,9790	0,0391
500	0,0210	0,1126	0,9568	0,0567

Таблиця Д.5.

Метрики точності ансамблевої Stacking-моделі для частоти навантаження

3 Гц

Цикл	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
251	0,0012	0,0287	0,9970	0,0146
260	0,0017	0,0324	0,9961	0,0152
300	0,0019	0,0360	0,9957	0,0169
350	0,0043	0,0565	0,9903	0,0304
400	0,0160	0,1063	0,9661	0,0610
450	0,0230	0,1260	0,9534	0,0725
500	0,0290	0,1364	0,9423	0,0814

Таблиця Д.6.

Метрики точності ансамблевої Stacking-моделі для частоти навантаження

5 Гц

Цикл	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
251	0,0011	0,0274	0,9952	0,0155
260	0,0012	0,0298	0,9950	0,0172
300	0,0071	0,0622	0,9741	0,0479
350	0,0095	0,0731	0,9685	0,0564
400	0,0133	0,0918	0,9595	0,0680
450	0,0182	0,1170	0,9506	0,0757
500	0,0241	0,1493	0,9421	0,0824

Метрики точності ансамблевої Stacking-моделі для частоти навантаження

10 Гц

<b>Цикл</b>	<b>MSE</b>	<b>MAE</b>	<b><math>R^2</math></b>	<b>MAPE</b>
251	0,0012	0,0298	0,9873	0,0165
260	0,0013	0,0308	0,9879	0,0167
300	0,0025	0,0413	0,9772	0,0242
350	0,0067	0,0669	0,9435	0,0414
400	0,0118	0,0919	0,9078	0,0552
450	0,0199	0,1220	0,8523	0,0728
500	0,0394	0,1788	0,7302	0,1069

## ДОДАТОК Е. Метрики точності SimpleRNN, LSTM та GRU моделей

Таблиця Е.1.

Метрики точності моделей SimpleRNN, LSTM та GRU для частоти навантаження 0,1 Гц

Модель	Цикл	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
SimpleRNN	251	0,0011	0,0266	0,9990	0,0029
	260	0,0018	0,0324	0,9982	0,0036
	300	0,0562	0,1823	0,9343	0,0204
	350	0,3457	0,4423	0,5341	0,0496
	400	0,6182	0,6096	0,1619	0,0685
	450	0,6629	0,6303	0,0053	0,0699
	500	0,7200	0,6597	-0,1014	0,0731
LSTM	251	0,0006	0,0223	0,9994	0,0024
	260	0,0007	0,0224	0,9993	0,0024
	300	0,0048	0,0593	0,9944	0,0063
	350	0,0162	0,0966	0,9782	0,0105
	400	0,0557	0,1672	0,9244	0,0188
	450	0,0775	0,1966	0,8836	0,0219
	500	0,1329	0,2663	0,7966	0,0296
GRU	251	0,0008	0,0242	0,9993	0,0026
	260	0,0035	0,0535	0,9967	0,0056
	300	0,0628	0,2319	0,9266	0,0238
	350	0,2212	0,4571	0,7019	0,0474
	400	0,4344	0,6508	0,4110	0,0682
	450	0,6044	0,7665	0,0930	0,0797
	500	0,7636	0,8510	-0,1681	0,0886

Таблиця Е.2.

Метрики точності моделей SimpleRNN, LSTM та GRU для частоти навантаження 0,3 Гц

Модель	Цикл	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
SimpleRNN	251	0,0005	0,0180	0,9998	0,0049
	260	0,0001	0,0097	0,9999	0,0030
	300	0,0007	0,0207	0,9997	0,0056
	350	0,0044	0,0555	0,9983	0,0146
	400	0,0080	0,0738	0,9968	0,0180
	450	0,0089	0,0795	0,9964	0,0197
	500	0,0141	0,1016	0,9941	0,0260

LSTM	251	0,0003	0,0138	0,9999	0,0043
	260	0,0008	0,0077	0,9999	0,0025
	300	0,0003	0,0153	0,9999	0,0052
	350	0,0010	0,0278	0,9996	0,0078
	400	0,0019	0,0368	0,9992	0,0096
	450	0,0018	0,0366	0,9992	0,0113
	500	0,0022	0,0430	0,9990	0,0145
GRU	251	0,0001	0,0091	0,9999	0,0024
	260	0,0009	0,0064	0,9999	0,0018
	300	0,0004	0,0152	0,9998	0,0045
	350	0,0010	0,0254	0,9996	0,0060
	400	0,0023	0,0405	0,999	0,0105
	450	0,0015	0,0327	0,9993	0,0106
	500	0,0028	0,0467	0,9988	0,0151

Таблиця Е.3.

Метрики точності моделей SimpleRNN, LSTM та GRU для частоти навантаження 0,5 Гц

Модель	Цикл	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
SimpleRNN	251	0,0001	0,0130	0,9996	0,0041
	260	0,0002	0,0075	0,9998	0,0027
	300	0,0003	0,0132	0,9994	0,0045
	350	0,0003	0,0152	0,9992	0,0049
	400	0,0006	0,0204	0,9987	0,0067
	450	0,0012	0,0305	0,9973	0,0096
	500	0,0059	0,0682	0,9874	0,0200
LSTM	251	0,0001	0,0074	0,9999	0,0025
	260	0,0001	0,0097	0,9998	0,0032
	300	0,0002	0,0118	0,9994	0,0042
	350	0,0009	0,0271	0,9980	0,0086
	400	0,0008	0,0246	0,9980	0,0086
	450	0,0015	0,0337	0,9966	0,0112
	500	0,0041	0,0572	0,9912	0,0180
GRU	251	0,0001	0,0073	0,9998	0,0028
	260	0,0003	0,0147	0,9995	0,0045
	300	0,0007	0,0234	0,9986	0,0076
	350	0,0012	0,0309	0,9974	0,0103
	400	0,0023	0,0419	0,9949	0,0124
	450	0,0040	0,0567	0,9911	0,0170
	500	0,0094	0,0864	0,9797	0,0250

Таблиця Е.4.

Метрики точності моделей SimpleRNN, LSTM та GRU для частоти навантаження 1 Гц

Модель	Цикл	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
SimpleRNN	251	0,0001	0,0094	0,9997	0,0037
	260	0,0001	0,0117	0,9996	0,0047
	300	0,0005	0,0185	0,9989	0,0087
	350	0,0019	0,0354	0,9959	0,0166
	400	0,0041	0,0546	0,9916	0,0247
	450	0,0076	0,0783	0,9842	0,0337
	500	0,0125	0,1015	0,9735	0,0408
LSTM	251	0,0001	0,0084	0,9998	0,0036
	260	0,0001	0,0077	0,9998	0,0031
	300	0,0001	0,0081	0,9998	0,0034
	350	0,0003	0,0144	0,9993	0,0064
	400	0,0005	0,0198	0,9990	0,0083
	450	0,0008	0,0247	0,9983	0,0108
	500	0,0011	0,0282	0,9976	0,0121
GRU	251	0,0001	0,0081	0,9998	0,0036
	260	0,0001	0,0090	0,9997	0,0039
	300	0,0002	0,0121	0,9995	0,0056
	350	0,0008	0,0210	0,9984	0,0099
	400	0,0013	0,0250	0,9973	0,0123
	450	0,0023	0,0322	0,9953	0,0159
	500	0,0027	0,0368	0,9942	0,0177

Таблиця Е.5.

Метрики точності моделей SimpleRNN, LSTM та GRU для частоти навантаження 3 Гц

Модель	Цикл	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
SimpleRNN	251	0,0001	0,0084	0,9997	0,0044
	260	0,0001	0,0080	0,9997	0,0041
	300	0,0004	0,0155	0,9990	0,0069
	350	0,0015	0,0307	0,9967	0,0139
	400	0,0045	0,0516	0,9909	0,0221
	450	0,0083	0,0693	0,9835	0,0298
	500	0,0114	0,0827	0,9775	0,0367
LSTM	251	0,0001	0,0054	0,9999	0,0030
	260	0,0001	0,0076	0,9998	0,0036

	300	0,0002	0,0107	0,9994	0,0059
	350	0,0006	0,0171	0,9987	0,0084
	400	0,0025	0,0372	0,9949	0,0168
	450	0,0047	0,0506	0,9906	0,0223
	500	0,0067	0,0629	0,9867	0,0290
GRU	251	0,0001	0,0054	0,9999	0,0027
	260	0,0001	0,0043	0,9999	0,0019
	300	0,0002	0,0142	0,9994	0,0074
	350	0,0007	0,0232	0,9985	0,0119
	400	0,0028	0,0492	0,9943	0,0250
	450	0,0049	0,0645	0,9902	0,0329
	500	0,0070	0,0722	0,9862	0,0376

Таблиця Е.6.

Метрики точності моделей SimpleRNN, LSTM та GRU для частоти навантаження 5 Гц

Модель	Цикл	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
SimpleRNN	251	0,0001	0,0061	0,9997	0,0033
	260	0,0001	0,0105	0,9992	0,0055
	300	0,0056	0,0691	0,9797	0,0467
	350	0,0071	0,0731	0,9765	0,0488
	400	0,0106	0,0915	0,9679	0,0579
	450	0,0182	0,1125	0,9479	0,0602
	500	0,0329	0,1492	0,9111	0,0740
LSTM	251	0,0001	0,0054	0,9998	0,0030
	260	0,0001	0,0089	0,9995	0,0046
	300	0,0055	0,0699	0,9799	0,0470
	350	0,0082	0,0860	0,9730	0,0562
	400	0,0112	0,0962	0,9661	0,0642
	450	0,0117	0,0934	0,9664	0,0606
	500	0,0181	0,1137	0,9510	0,0739
GRU	251	0,0001	0,0032	0,9999	0,0019
	260	0,0002	0,0126	0,9991	0,0069
	300	0,0072	0,0815	0,9739	0,0535
	350	0,0063	0,0746	0,9792	0,0493
	400	0,0070	0,0729	0,9788	0,0481
	450	0,0057	0,0578	0,9835	0,0355
	500	0,0072	0,0614	0,9805	0,0367

Метрики точності моделей SimpleRNN, LSTM та GRU для частоти навантаження 10 Гц

Модель	Цикл	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
SimpleRNN	251	0,0001	0,0058	0,9995	0,0031
	260	0,0001	0,0076	0,9991	0,0041
	300	0,0003	0,0137	0,9973	0,0069
	350	0,0002	0,0103	0,9987	0,0055
	400	0,0005	0,0185	0,9959	0,0089
	450	0,0006	0,0182	0,9951	0,0090
	500	0,0014	0,0335	0,9902	0,0181
LSTM	251	0,0001	0,0056	0,9996	0,0029
	260	0,0001	0,0041	0,9997	0,0022
	300	0,0001	0,0107	0,9984	0,0058
	350	0,0002	0,0120	0,9981	0,0061
	400	0,0001	0,0100	0,9988	0,0054
	450	0,0003	0,0159	0,9971	0,0083
	500	0,0003	0,0153	0,9979	0,0082
GRU	251	0,0001	0,0055	0,9996	0,0030
	260	0,0001	0,0053	0,9995	0,0029
	300	0,0003	0,0125	0,9974	0,0064
	350	0,0004	0,0149	0,9969	0,0083
	400	0,0016	0,0310	0,9874	0,0158
	450	0,0058	0,0576	0,9565	0,0298
	500	0,0099	0,0836	0,9302	0,0456

## ДОДАТОК Ж. Метрики точності TCN-моделей

Таблиця Ж.1.

Метрики точності TCN-моделі для частоти навантаження 0,1 Гц

Цикл	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
251	0,0025	0,0373	0,9977	0,0041
260	0,0124	0,0968	0,9880	0,0104
300	0,0352	0,1631	0,9589	0,0164
350	0,0920	0,2536	0,8759	0,0252
400	0,2010	0,3942	0,7274	0,0397
450	0,3049	0,4850	0,5423	0,0486
500	0,5033	0,6436	0,2300	0,0651

Таблиця Ж.2.

Метрики точності TCN-моделі для частоти навантаження 0,3 Гц

Цикл	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
251	0,0006	0,0187	0,9997	0,0069
260	0,0053	0,0622	0,9980	0,0196
300	0,0071	0,0667	0,9972	0,0202
350	0,0080	0,0700	0,9969	0,0228
400	0,0119	0,0813	0,9950	0,0253
450	0,0136	0,0883	0,9944	0,0270
500	0,0213	0,1135	0,9910	0,0334

Таблиця Ж.3.

Метрики точності TCN-моделі для частоти навантаження 0,5 Гц

Цикл	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
251	0,0003	0,0144	0,9992	0,0054
260	0,0008	0,0249	0,9984	0,0078
300	0,0025	0,0431	0,9949	0,0143
350	0,0049	0,0586	0,9891	0,0199
400	0,0123	0,0899	0,9734	0,0284
450	0,0201	0,1200	0,9549	0,0379
500	0,0287	0,1441	0,9385	0,0438

Таблиця Ж.4.

Метрики точності TCN-моделі для частоти навантаження 1 Гц

Цикл	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
251	0,0001	0,0030	0,9998	0,0029
260	0,0001	0,0081	0,9997	0,0032
300	0,0003	0,0157	0,9993	0,0059
350	0,0004	0,0178	0,9989	0,0073
400	0,0013	0,0291	0,9972	0,0117
450	0,0017	0,0315	0,9964	0,0124
500	0,0030	0,0410	0,9936	0,0155

Таблиця Ж.5.

Метрики точності TCN-моделі для частоти навантаження 3 Гц

Цикл	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
251	0,0001	0,0101	0,9997	0,0053
260	0,0001	0,0105	0,9995	0,0060
300	0,0012	0,0267	0,9971	0,0120
350	0,0102	0,0834	0,9784	0,0398
400	0,0199	0,1181	0,9595	0,0513
450	0,0296	0,1461	0,9412	0,0619
500	0,0474	0,1828	0,9062	0,0774

Таблиця Ж.6.

Метрики точності TCN-моделі для частоти навантаження 5 Гц

Цикл	MSE	MAE	$R^2$	MAPE
251	0,0002	0,0123	0,9991	0,0070
260	0,0004	0,0171	0,9982	0,0103
300	0,0089	0,0739	0,9728	0,0522
350	0,0108	0,0904	0,9643	0,0627
400	0,0112	0,0955	0,9660	0,0643
450	0,0159	0,1067	0,9545	0,0596
500	0,0200	0,1119	0,9459	0,0689

Метрики точності TCN-моделі для частоти навантаження 10 Гц

<b>Цикл</b>	<b>MSE</b>	<b>MAE</b>	<b>R<sup>2</sup></b>	<b>MAPE</b>
251	0,0001	0,0097	0,9984	0,0047
260	0,0002	0,0141	0,9972	0,0071
300	0,0035	0,0521	0,9681	0,0263
350	0,0074	0,0742	0,9383	0,0403
400	0,0309	0,1455	0,7583	0,0804
450	0,0514	0,1852	0,6198	0,1037
500	0,1165	0,2763	0,1797	0,1619