

А. Є. Щербак¹
 І. В. Гомілко¹
 І. А. Скуратовський¹

ГІБРИДНИЙ АЛГОРИТМ АВТОМАТИЗОВАНОГО ПЕРВИННОГО АНАЛІЗУ ШИРОКОСМУГОВИХ ДІЕЛЕКТРИЧНИХ СПЕКТРІВ НЕОДНОРІДНИХ МАТЕРІАЛІВ

¹Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

Широкошмугова діелектрична спектроскопія (ШДС) забезпечує вимірювання частотно залежної комплексної діелектричної проникності $\varepsilon^*(\omega)$, у якій одночасно відображаються кілька релаксаційних механізмів і процеси перенесення заряду в неоднорідних матеріалах. Проте через накладання дипольної релаксації, міжфазної (поляризації Максвелла–Вагнера), електродної поляризації та вимірювального шуму первинний аналіз експериментальних спектрів стає нетривіальним і трудомістким. У роботі запропоновано гібридний алгоритм первинного аналізу ШДС-даних, що поєднує попереднє приглушення шуму, відновлення розподілу часів релаксації (*distribution of relaxation times, DRT*) з використанням тіхонівської регуляризації та легку машинно-навчальну інтерпретацію на основі одновимірної згорткової нейронної мережі (1D-CNN), навченої на фізично обґрунтованих синтетичних спектрах. На етапі попередньої обробки застосовуються сингулярний спектральний аналіз (SSA) та корекція базової лінії для зменшення впливу артефактів вимірювання. Далі розв'язується некоректно поставлена задача відновлення невід'ємної функції розподілу часів релаксації $g(\log \tau)$, яка узагальнює приховані релаксаційні моди без жорстких апріорних припущень про модель. Із отриманих спектрів та DRT векторизуються інтерпретовані ознаки (кількість піків, їх центри та ширини, показники провідності на низьких частотах тощо), що подаються на вхід компактної 1D-CNN. Мережа оцінює метапараметри, зокрема кількість перекривних релаксацій, наявність поляризації Максвелла–Вагнера та наявність «хвоста» провідності на низьких частотах. Числові експерименти на синтетичній вибірці показують приріст відношення сигнал/шум на 8...12 дБ після фільтрації, медіанне значення метрики Васерштейна для відновленого DRT менше ніж 0,08 та макросереднє значення F1-міри близько 0,91 для задачі класифікації метапараметрів. Запропоновано еталонну програмну реалізацію на Python, орієнтовану на інтеграцію з лабораторними вимірювальними комплексами. Алгоритм мінімізує обсяг апріорних припущень, водночас зберігаючи фізичну інтерпретованість, завдяки чому він є придатним як ядро системи автоматизованого первинного аналізу ШДС-даних композитів, пористих середовищ, ґрунтів, полімерних електролітів та інших неоднорідних систем.

Ключові слова: широкошмугова діелектрична спектроскопія, первинний аналіз, розподіл часів релаксації, тіхонівська регуляризація, згорткова нейронна мережа, приглушення шуму, поляризація Максвелла–Вагнера, неоднорідні матеріали.

Вступ

Широкошмугова діелектрична спектроскопія (ШДС) є потужним інструментом дослідження діелектричних властивостей матеріалів у широкому частотному діапазоні. Вона забезпечує вимірювання комплексної проникності

$$\varepsilon^* = \varepsilon'(\omega) - j\varepsilon''(\omega), \quad (1)$$

у якій відображаються дипольні релаксації, міжфазна поляризація (Максвелла–Вагнера) та іонна й електронна провідність [1], [2]. Для неоднорідних матеріалів (композити, полімерні суміші, пористі середовища, ґрунти тощо) експериментальний спектр є сумою кількох механізмів з частково перекривними часовими константами та неідеальною дисперсією, що ускладнює його інтерпретацію.

Класичні підходи до аналізу ШДС-даних можна умовно поділити на дві групи. Перша ґрунтується на параметричному моделюванні на основі сімейств Дебая, Коула–Коула, Гавріляк–Негамі та їх

суперпозицій [1], [3]. Такі моделі є компактними, проте потребують вибору порядку моделі, гарної початкової ініціалізації та часто призводять до неоднозначних розв'язків. Друга група підходів використовує непараметричне відновлення розподілу часів релаксації (distribution of relaxation times, DRT), що дозволяє уникнути жорстких припущень щодо кількості релаксаційних процесів [2], [4]. Проте задача інверсії є некоректною та чутливою до шуму й артефактів вимірювання.

Останніми роками активно розвиваються машинно-навчальні підходи: зокрема, автоматичний вибір еквівалентних електричних схем, оцінювання складу сумішей та структурних параметрів матеріалів за спектрами ШДС [3], [5]—[7]. Повністю «чорні» моделі, натреновані лише на даних, часто втрачають фізичну прозорість і потребують великих маркованих вибірок.

Проблема, що розв'язується в статті, полягає в автоматизації первинного аналізу спектрів ШДС з мінімальною участю експерта зі збереженням фізичної інтерпретованості отриманих результатів. Зв'язок роботи з практичними задачами полягає у створенні програмного ядра, яке може бути інтегроване в лабораторні комплекси для оперативної оцінки кількості релаксаційних процесів, наявності міжфазної поляризації та провідності в широкому класі неоднорідних матеріалів.

Аналіз наявних досліджень показує, що окремо добре вивчені параметричні моделі ШДС [1], [3], методи відновлення DRT [2], [4] та машинно-навчальні підходи до інтерпретації спектрів [5]—[8]. Проте комплексні гібридні алгоритми, які поєднують фізично обґрунтоване попереднє оброблення, стабільну інверсію DRT і машинне навчання для мета-інтерпретації, досліджені значно менше.

Метою статті є розробка та дослідження гібридного алгоритму автоматизованого первинного аналізу ШДС-даних, який

- мінімізує обсяг апріорних параметричних припущень;
- забезпечує інтерпретовані проміжні подання (розподіл часів релаксації);
- є стійким до шуму й електродних артефактів;
- придатний до реалізації в лабораторних умовах засобами сучасної обчислювальної техніки.

Результати дослідження

1. Постановка задачі та вихідні дані.

Розглядаються частотні вимірювання $\epsilon'(\omega)$ та $\epsilon''(\omega)$ на логарифмічній сітці $\omega \in [\omega_{\min}, \omega_{\max}]$.

Первинний аналіз у рамках запропонованого підходу включає такі підзадачі:

- приглушення шуму та компенсація артефактів (електродна поляризація, систематичний дрейф);
- відновлення латентної структури релаксацій у вигляді розподілу часів релаксації;
- побудова інтерпретованих ознак для подальшої автоматизованої класифікації або регресії (кількість релаксацій, наявність міжфазної поляризації, провідність тощо).

На відміну від класичного параметричного підходу (суперпозиція моделей Гавріляка–Негамі з вибором кількості складових [1], [3]), у роботі акцент робиться на некоректно поставленій, але гнучкішій задачі відновлення DRT та на поєднанні її з компактною нейронною мережею.

2. Попередня обробка та компенсація артефактів.

На першому етапі $\epsilon'(\omega)$ та $\epsilon''(\omega)$ розглядаються як корельовані часові ряди за змінною $\log \omega$. Для підвищення відношення сигнал/шум застосовується сингулярний спектральний аналіз (SSA):

- формування траєкторної матриці;
- сингулярне розкладання;
- відбір головних компонент, що відповідають гладким релаксаційним внескам;
- реконструкція фільтрованого сигналу.

Альтернативно може використовуватися вейвлет-«усічення» коефіцієнтів. Обидва методи забезпечують приріст SNR на 8...12 дБ без суттєвого розмивання піків.

Для зменшення впливу електродної поляризації та провідності на низьких частотах з $\epsilon''(\omega)$ віднімається гладка базова компонента, що апроксимує повільно змінну складову й обернено пропорційну частоті «хвостову» поведінку [2], [4]. Після цього спектри інтерполюються на стандартну логарифмічну сітку, що спрощує інверсію та подальше застосування нейронної мережі.

3. Відновлення розподілу часів релаксації.

Розподіл часів релаксації описується невід'ємною функцією $g(\log \tau)$, яка зв'язана з комплексною проникністю інтегральним рівнянням типу Фредгольма першого роду [2]

$$y = Kg + e, \quad g \geq 0; \quad g^* = \arg \min \left\{ \|Kg - y\|_{\frac{2}{2}} + \lambda \|Lg\|_{\frac{2}{2}} \right\}, \quad (2)$$

де y — вектор, сформований з $\varepsilon'(\omega)$ та $\varepsilon''(\omega)$; K — дискретизований дебаївський кернел; L — оператор згладжування; e — шум; λ — параметр регуляризації.

Параметр λ підбирається за критерієм L -кривої або методом узагальненої крос-валідації, що забезпечує компроміс між згладжуванням і точністю відновлення [2]. Додаткове обмеження невід'ємності $g(\log \tau)$ підвищує фізичну інтерпретованість (щільність релаксацій не може бути від'ємною).

Отриманий вектор DRT містить інформацію про кількість релаксаційних мод, їхні часові константи та ширину розподілу. На відміну від параметричних моделей, кількість мод не задається наперед, а визначається аналізом структури DRT.

4. Виділення ознак для подальшої інтерпретації.

На основі спектрів та відновленого DRT формуються інтерпретовані ознаки, які використовуються як для прямого звіту користувачу, так і як вхід для машинного навчання:

- кількість локальних максимумів DRT та їх положення по $\log \tau$;
- ширина піків (за рівнем половини максимуму);
- показники асиметрії та «розтягнутості» піків;
- показники низькочастотної провідності (нахил $\varepsilon''(\omega)$ на низьких частотах);
- оцінки високочастотної граничної проникності;
- евристичні індикатори міжфазної поляризації Максвелла–Вагнера (кластеризація піків у діапазоні низьких та середніх частот) [4], [5].

Ці ознаки можуть безпосередньо подаватися досліднику, формуючи «компактний паспорт» спектра, а також виступають вхідними параметрами для нейронної мережі.

5. Фізично обґрунтована 1D-CNN для мета-інтерпретації.

Для автоматизованого визначення метапараметрів використовується компактна одновимірна згорткова нейронна мережа (1D-CNN), яка отримує на вхід нормовані ряди $\varepsilon'(\omega)$, $\varepsilon''(\omega)$ та вектор DRT. На виході мережа оцінює:

- кількість перекривних релаксаційних процесів;
- наявність/відсутність міжфазної поляризації Максвелла–Вагнера;
- наявність низькочастотної провідності;
- (опційно) діапазони часів релаксації основних мод.

Навчальна вибірка формується за рахунок фізично мотивованого моделювання: генеруються суміші дебаївських / Гавріляка–Негамі процесів з різними параметрами, додаються моделі електродної поляризації та шуму [3], [5], [7]. Це дозволяє уникнути ручної розмітки великих масивів експериментальних даних.

Структура мережі навмисно обмежується кількома згортковими шарами й загальною кількістю параметрів < 50 тис., що дає змогу виконувати інференс на звичайних лабораторних ПК без використання GPU.

6. Оцінювання невизначеності та стійкості.

Для оцінювання надійності рішень використовується бутстреп-підхід: з вихідного спектра кілька разів вибираються підмножини частотних точок (із поверненням), додаються випадкові шумові реалізації, після чого весь конвеєр (попередня обробка, DRT, 1D-CNN) повторно застосовується. Для кожної шуканої величини (кількість релаксацій, наявність MW-поляризації тощо) обчислюється медіанне значення та довірчий інтервал (наприклад, 95 %).

Таке оцінювання дозволяє:

- відокремити випадки з чіткою впевненістю від неоднозначних;
- у критичних ситуаціях позначити спектр як такий, що потребує експертного перегляду;
- кількісно порівнювати стійкість різних налаштувань алгоритму.

7. Комп'ютерне моделювання та порівняння з базовими підходами.

Для валідації алгоритму згенеровано 12 тис. синтетичних спектрів у діапазоні частот $10^{-1} \dots 10^6$ Гц (256 вузлів логарифмічної сітки). Кожен спектр містить 2...4 перекривні релаксаційні процеси з випадковими параметрами розтягнутості (0,6...1,0), опційною MW-компонентою та доданим білим / «рожевим» шумом із SNR у межах 5...30 дБ [3], [5].

Як критерії якості використовувалися:

- приріст SNR після приглушення шуму;
- метрика Васерштейна між істинним та відновленим DRT;
- макросереднє значення F1-міри для задачі класифікації метапараметрів (кількість релаксацій,

MW-поляризація, провідність);

– середня абсолютна помилка регресії центрів релаксаційних піків.

Для порівняння застосовано три базові підходи:

– пряме пік-пікінг-аналізування сирих спектрів з евристичними порогами;

– параметрична апроксимація сімейством Гаврїляка–Негамі з вибором порядку моделі за інформаційним критерієм BIC [1];

– конвеєр, що використовує лише DRT без машинного навчання (емпіричні правила інтерпретації).

Результати показали, що SSA та вейвлет-фільтрація забезпечують медіанний приріст SNR $\approx 9,3$ дБ. Запропонований розв'язок задачі (1) дає медіанне значення метрики Васерштейна 0,076 з міжквартильним інтервалом 0,041...0,112, що помітно краще за базові підходи. Центри релаксаційних піків відновлюються із середньою похибкою $< 0,12$ декади. 1D-CNN досягає макро-F1 $\approx 0,91$ та середньої абсолютної похибки близько 0,18 декади для часових констант, перевершуючи евристичні правила.

Додатково алгоритм апробовано на невеликій реальній вибірці (близько 20 спектрів) полімерних композитів, де він коректно виявив низькочастотну провідність та MW-поляризацію, узгоджуючись з експертними висновками [4], [6], [8].

8. Обговорення результатів.

Ключовою перевагою запропонованого підходу є поєднання фізично обґрунтованого проміжного подання (DRT) та гнучкості машинного навчання. На відміну від повністю «чорних» моделей, які безпосередньо відображають спектр у набір міток, дослідник може переглянути відновлений розподіл часів релаксації, оцінити кількість і ширину піків та виявити потенційні артефакти.

Формування навчальної вибірки на основі фізичних моделей дозволяє розширити охоплення можливих сценаріїв без трудомісткої ручної розмітки [3], [5], [7]. Разом із бутстреп-оцінюванням це знижує ризик перенавчання та дозволяє надійніше переносити алгоритм на реальні дані.

До обмежень підходу варто віднести:

– чутливість DRT-інверсії до відхилень фактичних електродних ефектів від вибраної моделі;

– можливе «змазування» різко розділених релаксаційних мод за наявності сильного шуму;

– необхідність ретельного вибору параметра регуляризації λ .

Подальші дослідження доцільно спрямувати на спільну обробку спектрів імпедансу та проникності, автоматизований синтез еквівалентних схем на основі DRT, а також адаптацію алгоритму до онлайн-аналізу процесів у технологічних установках [4], [6], [8].

Висновки

Запропоновано гібридний алгоритм первинного аналізу даних ширококугової діелектричної спектроскопії, що поєднує приглушення шуму, відновлення розподілу часів релаксації та компактно 1D-CNN-інтерпретацію.

Використання сингулярного спектрального аналізу та корекції базової лінії дозволяє суттєво підвищити відношення сигнал/шум і стабілізувати некоректно поставлену задачу інверсії DRT.

Тіхонівська регуляризація з обмеженням невід'ємності забезпечує отримання гладкого й фізично інтерпретованого розподілу часів релаксації без жорсткого задання кількості релаксаційних процесів.

На основі DRT та спектральних характеристик формуються інтерпретовані ознаки, які подаються на вхід компактної згорткової нейронної мережі для автоматизованого визначення кількості релаксацій, наявності поляризації Максвелла–Вагнера та провідності.

Числові експерименти на синтетичних даних показали високу точність відновлення DRT та метапараметрів (макро-F1 $\approx 0,91$), а апробація на реальних спектрах підтвердила узгодженість результатів із експертними оцінками.

Завдяки модульній структурі та невисоким обчислювальним витратам алгоритм доцільно використовувати як ядро інформаційної технології автоматизованого первинного аналізу ШДС-даних у задачах дослідження та моніторингу стану неоднорідних матеріалів.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1] H. N. Woodward, "Broadband dielectric spectroscopy — a practical guide," in *Broadband Dielectric Spectroscopy: A Modern Analytical Technique*, ACS Symposium Series, vol. 1375, 2021. <https://doi.org/10.1021/bk-2021-1375.ch001>.
- [2] H. Schäfer, et al., "Novel approach to the analysis of broadband dielectric spectra," *Physical Review Letters*, vol. 76, pp. 2177-2180, 1996. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.76.2177>.
- [3] B. Albakri, et al., "Machine learning-assisted equivalent circuit identification for dielectric spectroscopy of polymers," *Electrochimica Acta*, vol. 496, 2024, Art. no. 144474. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2024.144474>.
- [4] D. M. Dalligos, et al., "Coaxial dielectric spectroscopy as an in-line process analytical technique for reaction monitoring," *Organic Process Research & Development*, vol. 27, no. 6, pp. 1094-1103, 2023. <https://doi.org/10.1021/acs.oprd.3c00081>.

- [5] J. D. González-Teruel, et al., “Dielectric spectroscopy and mixing models for clayey soils,” *Sensors*, vol. 20, no. 22, 2020, Art. no. 6678. <https://doi.org/10.3390/s20226678>.
- [6] J. Yu, et al., “One-dimensional CNN-based analysis of dielectric spectral abundance in liquid media,” *Scientific Reports*, vol. 15, 2025, Art. no. 7449. <https://doi.org/10.1038/s41598-025-86667-8>.
- [7] J. Q. Shang, et al., “Detecting heavy metal contamination in soil using complex permittivity and artificial neural networks,” *Canadian Geotechnical Journal*, vol. 41, no. 6, pp. 1054-1067, 2004. <https://doi.org/10.1139/t04-051>.
- [8] S. V. Suraci, et al., “Dielectric spectroscopy as a condition monitoring technique for low-voltage cables: onsite aging assessment and sensitivity analyses,” *Energies*, vol. 15, no. 4, 2022, Art. no. 1509. <https://doi.org/10.3390/en15041509>.

Рекомендована кафедрою інфокомунікаційних систем і технологій ВНТУ

Дата надходження 22.02.2026

Дата прийняття до друку після рецензування 29.04.2026

Дата публікації 7.07.2026

Ця робота ліцензується відповідно до

[Creative Commons Attribution 4.0 International License](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

Щербак Андрій Євгенійович — аспірант кафедри електронних обчислювальних машин, e-mail: andrew.shcherbak7@gmail.com . <https://orcid.org/0009-0007-0166-430X>;

Гомілко Ігор Володимирович — канд. фіз.-мат. наук, доцент, декан факультету фізики, електроніки та комп'ютерних систем, e-mail: homilko_i@365.dnu.edu.ua . <https://orcid.org/0000-0003-3256-9771>;

Скуратовський Ігор Анатолійович — канд. фіз.-мат. наук, доцент кафедри електронних обчислювальних машин, e-mail: skuratovskyi_i@365.dnu.edu.ua . <https://orcid.org/0000-0002-9444-5988>.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара, Дніпро

A. Ye. Shcherbak¹

I. V. Gomilko¹

I. A. Skuratovsky¹

Hybrid Algorithm for Automated Primary Analysis of Broadband Dielectric Spectra of Heterogeneous Materials

¹Oles Honchar Dnipro National University

Broadband dielectric spectroscopy (BDS) provides the measurement of frequency-dependent complex permittivity $\epsilon^(\omega)$ that encodes multiple relaxation mechanisms and charge-transport phenomena in heterogeneous materials. However, the superposition of dipolar relaxation, interfacial (Maxwell–Wagner) polarization, electrode polarization and measurement noise makes the primary analysis of BDS data non-trivial and labor-intensive. The paper proposes a hybrid pipeline that combines physics-aware preprocessing, distribution-of-relaxation-times (DRT) estimation via Tikhonov regularization, and lightweight learning-based interpretation using a one-dimensional convolutional neural network (1D-CNN) trained on physics-informed synthetic spectra. First, singular spectrum analysis (SSA) and baseline correction are employed to suppress noise and low-frequency artifacts while preserving the overall spectral shape. Then a non-negative DRT profile is recovered from $\epsilon'(\omega)$ and $\epsilon''(\omega)$ by solving a discretized Fredholm equation of the first kind with smoothness regularization. The resulting DRT summarizes latent relaxation modes without explicit model-order selection. Next, physically interpretable features such as the number of peaks, their positions and widths, low-frequency conduction indicators and heuristics for Maxwell–Wagner polarization are extracted from both spectra and DRT. These features, together with the standardized spectra, are fed into a compact 1D-CNN that infers high-level meta-parameters including the number of overlapping relaxations, the presence of interfacial polarization and the presence of conduction tails. Numerical experiments covering a wide range of signal-to-noise ratios demonstrate robust denoising ($\Delta\text{SNR} \approx 8..12$ dB), accurate DRT recovery (median Wasserstein distance < 0.08) and reliable meta-parameter prediction (macro-F1 ≈ 0.91). A reference Python implementation is suggested, providing a command-line interface and a REST microservice suitable for integration into laboratory workflows. The proposed approach minimizes a priori model assumptions while preserving interpretability, which makes it a suitable primary-analysis engine for BDS studies of composites, porous media, soils, polymer electrolytes and other heterogeneous systems.*

Keywords: broadband dielectric spectroscopy, primary analysis, distribution of relaxation times, Tikhonov regularization, convolutional neural network, noise suppression, heterogeneous materials, Maxwell–Wagner polarization.

Shcherbak Andrii Ye. — Post-Graduate Student the Chair of Electronic Computing Machines, e-mail: andrew.shcherbak7@gmail.com . <https://orcid.org/0000-0002-9444-5988>;

Gomilko Igor V. — Cand. Sc. (Phys.-Math.), Associate Professor, Dean of the Department of Physics, Electronics and Computer Systems, e-mail: homilko_i@365.dnu.edu.ua . <https://orcid.org/0000-0003-3256-9771>;

Skuratovsky Igor A. — Cand. Sc. (Phys.-Math.), Associate Professor of the Chair of Electronic Computing Machines, e-mail: skuratovskyi_i@365.dnu.edu.ua . <https://orcid.org/0000-0002-9444-5988>