

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
НАЦІОНАЛЬНИЙ АВІАЦІЙНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
Кафедра прикладної математики

ДОПУСТИТИ ДО ЗАХИСТУ

Завідувач кафедри

\_\_\_\_\_ П.О. Приставка

" \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2019 р.

# ДИПЛОМНА РОБОТА

(ПОЯСНЮВАЛЬНА ЗАПИСКА)

ВИПУСКНИКА ОСВІТНЬОГО СТУПЕНЯ

“БАКАЛАВР ”

**Тема:** Метод регуляризації для задачі електрохімічного імпедансу

**Виконавець:**

Полуянов В.В.

**Керівник:**

д. ф.-м.н. Василик В.Б.

**Нормоконтролер:**

К.ф.-м.н., доцент Іллічева Л. М.

Київ 2019

# НАЦІОНАЛЬНИЙ АВІАЦІЙНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Факультет

Кібербезпеки, комп'ютерної та  
програмної інженерії

Кафедра

Прикладної математики

Спеціальність

6.040301 "Прикладна математика"

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри

\_\_\_\_\_ П.О. Приставка

" \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2019 р.

## ЗАВДАННЯ

### на виконання дипломної роботи

*Полуянова Віктора Вадимовича*

1. **Тема дипломної роботи:** Метод регуляризації для задачі електрохімічного імпедансу, затверджена наказом ректора від «29» березня 2019 р № 598/ст.
2. **Термін виконання роботи:** з «\_\_» \_\_\_\_\_ по «\_\_» \_\_\_\_\_
3. **Вхідні дані до роботи:** значення імпедансу схеми Войта(Voight circuit) для набору частот.
4. **Зміст пояснювальної записки:** огляд основних теоретичних положень для виконання дипломного проекту, а саме: методики електрохімічної імпедансної спектроскопії, інтегральних рівнянь, зокрема рівнянь Фредгольма першого роду, методу регуляризації Тихонова; реалізація програмного забезпечення для відтворення функції розподілу часу релаксації по вхідним даним, а також аналіз і порівняння отриманих результатів у залежності від параметрів роботи.

### Календарний план-графік

№ п/п	Завдання	Термін виконання	Відмітка про виконання
	Отримання індивідуального завдання		Виконано
	Огляд літератури за темою дипломної роботи		Виконано
	Побудова алгоритму знаходження рішення для задачі електрохімічної спектроскопії		Виконано
	Огляд можливих модифікацій алгоритму, вивчення стратегій вибору параметрів		Виконано
	Розробка програмного забезпечення		Виконано
	Тестування програмного забезпечення		Виконано
	Оформлення пояснювальної записки		Виконано
	Створення презентації		Виконано
	Здача дипломної роботи		
	Захист дипломної роботи		

5. Дата видачі завдання: " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2019 р.

Керівник дипломної роботи

В.Б. Василик

Завдання прийняв до виконання

В.В. Полуянов

## РЕФЕРАТ

Пояснювальна записка до дипломної роботи на тему: «Метод регуляризації для задачі електрохімічного імпедансу»: 67 сторінок, 53 рисунка, 1 таблиця, 35 використаних джерел.

ЕЛЕКТРОХІМІЧНА СПЕКТРОСКОПІЯ, ІМПЕДАНС, ІНТЕГРАЛЬНЕ РІВНЯННЯ ФРЕДГОЛЬМА ПЕРШОГО РОДУ, МЕТОД РЕГУЛЯРИЗАЦІЇ ТИХОНОВА, КВАЗІОПТИМАЛЬНІСТЬ

**Об'єкт дослідження:** інтегральне рівняння, що є математичною моделлю, яка описує функцію розподілу часу релаксації у схемі Войта

**Предмет дослідження:** методи регуляризації для некоректно поставлених задач.

**Середовище розробки,** що використовувалося в процесі виконання дипломної роботи – Microsoft Visual Studio 2017, мова програмування - C#.

**Мета:** розробити інформаційну систему для реконструкції функції розподілу часу релаксації за відомим спостереженнями імпедансу для електричної схеми Войта.

**Результатом** виконання дипломної роботи є автоматизована система для реконструкції функції розподілу часу релаксації за спостереженнями імпедансу.

**Галузь застосування:** Результат виконання дипломної роботи може бути використаний для обробки результатів електрохімічної імпедансної спектроскопії з метою визначення такої характеристики матеріалу, як функція розподілу часу релаксації.

## ЗМІСТ

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ.....	6
ВСТУП .....	6
Розділ 1. ОСНОВНІ ПОНЯТТЯ ТА МЕТОДИ ЦИФРОВОЇ ОБРОБКИ	
ЗОБРАЖЕНЬ .....	8
1.1. Дискретизація неперервних зображень .....	Ошибка! Закладка не определена.
1.2. Квантування зображень .....	Ошибка! Закладка не определена.
1.3. Основні процедури поелементної обробки зображень	Ошибка! Закладка не опре
1.4. Колірні моделі .....	Ошибка! Закладка не определена.
Висновки до розділу 1 .....	17
Розділ 2. МЕТОДИ ЦИФРОВОЇ ФІЛЬТРАЦІЇ ТА МАСШТАБУВАННЯ	
ЗОБРАЖЕННЯ .....	18
2.1. Фільтри на основі двовимірних поліноміальних сплайнів, близьких до інтерполяційних у середньому .....	18
2.2. Алгоритми покращення якості зображення та їх модифікації .....	21
2.3. Алгоритм масштабування цифрового зображення та його модифікація .....	21
Висновки до розділу 2 .....	21
Розділ 3. АВТОМАТИЗОВАНА СИСТЕМА ОБРОБКИ ЗОБРАЖЕНЬ .....	22
3.1. Опис програмного забезпечення .....	22
3.2. Інструкція користувача.....	22
3.3. Тестування розробленого програмного забезпечення .....	22
Висновки до розділу 3 .....	22
ВИСНОВКИ.....	22
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ .....	22

## ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Нехай задано  $Z = \{\omega_i, Z(\omega_i); i = \overline{0, N-1}\}$  - набір двійок, де  $\omega_i$  - значення частоти, на якій було проведено спостереження, а  $Z(\omega_i)$  - значення імпедансу, які були отримані при вимірюванні. Необхідно розробити **автоматизовану систему**, яка буде відтворювати функцію часу релаксації, що характеризує середовище, у якому було проведено експеримент, на основі цих даних. Для цього необхідно виконати наступні завдання:

- Проаналізувати математичну модель, що описує імпеданс у схемі Войта.
- Враховуючи те, що схема описується інтегральним рівнянням Фредгольма першого роду і є некоректно поставленою, необхідно при розв'язанні застосувати метод регуляризації для знаходження стійких до змін вхідних даних результатів.
- Розглянути різні методи підбору параметрів регуляризації  $\lambda$ .
- Реалізувати програмне забезпечення, що розв'язує відповідну задачу, автоматично підбираючи оптимальне значення параметр регуляризації  $\lambda$ .
- Провести тестування розробленої системи на різних вхідних даних.
- Проаналізувати отримані результати, а також їх залежність від різноманітних параметрів, таких як кількість спостережень  $N$ , вагові множники, вид функції розподілу.
- Оформити пояснювальну записку.

## ВСТУП

Сучасний світ побудований на інформаційних технологіях, і кожного року ми бачимо нові пристрої, які надають нам все більші й більші можливості. Втім, для того щоб задовольнити зростаючий попит на високотехнологічні пристрої як у побутовій, так і промислових сферах, необхідним є не лише розвиток програмного забезпечення, але й модифікація апаратної частини. Постійне вдосконалення матеріалів, що використовуються, а також загальне прагнення до мініатюризації, створює попит у галузі матеріалознавства. Як масштабні проекти на кшталт космічних, так і побутова техніка або гаджети, які стали невід'ємною частиною нашого життя, потребують новітніх матеріалів і методів для роботи з ними.

У свою чергу, розвиток матеріалів створює потребу у нових засобах контролю якості. Електрохімічна спектроскопія – набір методик неруйнівного контролю, який надає можливість визначити внутрішні характеристики об'єкту тестування за рахунок вимірів його імпедансу (аналогу опору для змінного струму). Електрохімічна спектроскопія включає у себе цілий ряд методів, які у залежать від обраного діапазону частот, які ділять на дві групи: процеси резонансу та релаксації.

Електрохімічна спектроскопія може застосовуватися до дуже широкого спектру об'єктів – провідників, напівпровідників, іноді навіть діелектриків, у різних агрегатних станах. Наприклад, її використовують для аналізу покриттів [1], виявлення корозії [2]. Розвивається і аналіз біологічних матеріалів: наприклад, метод використовується для визначення концентрації бактерій[3], виявленні шкідливих патогенів [4],[5] або аналізі якості харчових продуктів [6],[7].

Існує навіть окрема галузь, що займається аналізом живих організмів – біоелектричний імпедансний аналіз, або біоімпедансометрія, яка займається визначенням таких характеристик організмів (наприклад, людини), як кількість кісткової або мускульної маси. Втім, вона показує кращі результати

при групових дослідженнях або спостереженні за одною особою протягом певного часу, ніж за рахунок одноразового дослідження[8].

Втім, як і більшість обернених задач, тобто задач визначення характеристик моделі за рахунок даних, отриманих під час спостережень, електрохімічна спектроскопія приводить до математичної постановки задачі, що є некоректно поставленою за Адамаром. Через це виникає потреба у використанні різних методів регуляризації. Більш того, кожна окрема задача вимагає унікального підходу в залежності від своєї специфіки.

Таким чином, розвиток сучасної промисловості дає запит на розвиток математичних методів розв'язування некоректно поставлених задач. Навіть при використанні відомих методів регуляризації основною проблемою є вибір оптимальних параметрів, для чого існує багато підходів [9].

Саме тому у даній роботі приділяється увага як побудові метода регуляризації, так і вибору параметрів для його оптимальної реалізації.



## **Розділ 1. МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ СХЕМИ ВОЙТА. ІНТЕГРАЛЬНІ РІВНЯННЯ ТА МЕТОДИ ЇХ РОЗВ'ЯЗКУ**

У розділі описуються основні теоретичні відомості, необхідні для розв'язування задачі реконструкції функції розподілу часу релаксації за спостереженнями імпедансу. У розділі 1.1 описується поняття імпедансу, електрична схема Войта та її властивості, а також метод електрохімічної спектроскопії для цієї схеми. Розділ 1.2 присвячений розгляду інтегральних рівнянь, зокрема рівнянь Фредгольма першого роду, і методів їх розв'язання. Окрема увага приділяється некоректності задачі. Розділ 1.3 присвячений методам регуляризації, зокрема методу регуляризації Тихонова, та методикам підбору параметрів регуляризації.

### **1.1. Електрохімічна спектроскопія елемента Войта**

У класичній електротехніці міру провідності визначав опір, але з відкриттям і поширенням змінного струму з'явилася потреба у відпорному аналогу для нього, оскільки класичний опір не може описати відповідні процеси. Через це було введено поняття імпедансу – комплексного опору між двома вузлами електричного ланцюга. Як і звичайний опір, імпеданс вимірюється в омах[10]. Будемо записувати імпеданс у **декартовій формі**, тобто:

$$Z = Z' + iZ''$$

або, як функцію від частоти  $\omega$ :

$$Z(\omega) = Z'(\omega) + iZ''(\omega)$$

Суть електрохімічної спектроскопії полягає у вимірі імпедансу об'єкта для певного набору частот. Для визначення функції часу релаксації зазвичай використовують частоти від  **$10^{-2}$  до  $10^{10}$  Гц**[11].

Розглянемо характеристики елементів електричних ланцюгів, які є складовими ланцюгу Войта.

Базовим елементом подібних схем зазвичай вважають елемент з постійною фазою (constant phase element, CPE) – елемент, що моделює поведінку подвійного електричного шару, що є неідеальним мікроконденсатором. Його імпеданс описується як

$$Z(\omega) = \frac{1}{Q(i\omega)^\alpha} \quad \operatorname{Re} Z(\omega) = Z'(\omega) = \frac{c_\alpha}{Q\omega^\alpha} \quad \operatorname{Im} Z(\omega) = Z''(\omega) = -\frac{s_\alpha}{Q\omega^\alpha}$$

де

$$c_\alpha = \cos\left(\frac{\pi\alpha}{2}\right) \quad s_\alpha = \sin\left(\frac{\pi\alpha}{2}\right)$$

Втім, будемо розглядати ідеалізований варіант, у якому базовим елементом є звичайний конденсатор, що відповідає CPE, для якого  $\alpha=1$  [12].

У такому разі формули значно спрощуються і мають вигляд

$$Z(\omega) = \frac{1}{C(i\omega)} \quad Z'(\omega) = 0 \quad Z''(\omega) = -i \frac{1}{C\omega} = \frac{1}{Ci\omega}$$

Наступний елемент – конденсатор та резистор, поєднані паралельно (рис.1). Опір конденсатора дорівнює  $R$ , а імпеданс такого елемента ( $R/Q$ ) визначається аналогічним методом до схем з постійним струмом[13]

$$Z(\omega) = \frac{R}{1 + \tau i\omega} \quad Z'(\omega) = \frac{R}{1 + \tau^2 \omega^2} \quad Z''(\omega) = -\frac{R\tau\omega}{1 + \tau^2 \omega^2} \quad \tau = RC$$

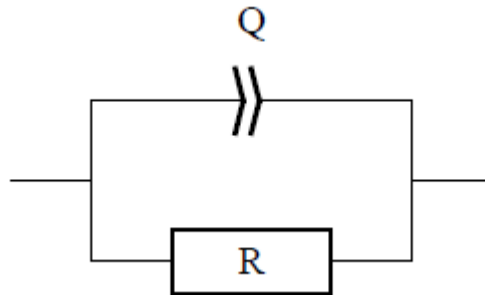


Рис 1. Елемент ( $R/Q$ )

Схема Войта, у свою чергу, визначається як набір елементів ( $R/Q$ ), поєднаних між собою послідовно (рис. 2).

$$Z(\omega) = \sum_{m=0}^{N-1} \frac{R_m}{1 + \tau_m i\omega} \quad Z'(\omega) = \sum_{m=0}^{N-1} \frac{R_m}{1 + \tau_m^2 \omega^2} \quad Z''(\omega) = -\sum_{m=0}^{N-1} \frac{R_m \tau_m \omega}{1 + \tau_m^2 \omega^2} \quad (1.1)$$

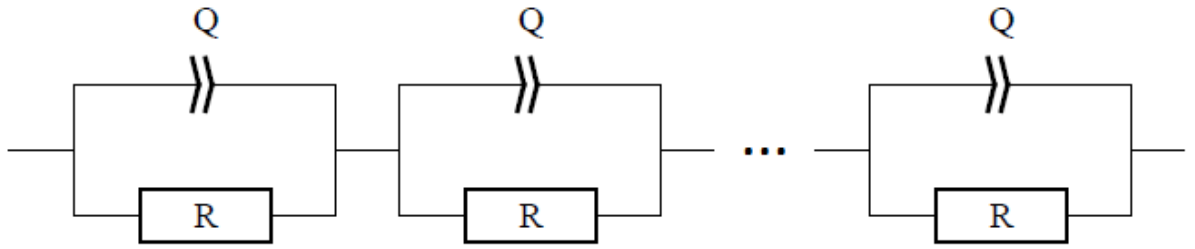


Рис. 2 Схема Войта

Більш того, експерименти електрохімічної спектроскопії зазвичай не можуть бути описані скінченною кількістю елементів (R/Q), оскільки вони включають у себе неперервно розподілені у часі константи. Схема Войта зі скінченною кількістю (R/Q) елементів теж може бути використана, але замість дискретних значень  $R_m = \tau_m C_m^{-1}$  розглядається неперервна версія  $R = g(\tau)$  з часом  $\tau$  [14]. У такому разі у формулі (1.1) сума перетворюється у інтеграл

$$Z(\omega) = \int_0^{\infty} \frac{g(\tau) d\tau}{1 + i\omega\tau} \quad (1.2)$$

де  $g(\tau)$  описує час релаксації системи, що досліджується. Більш того, деякі інші моделі, наприклад, Коле-Коле, Девідсона-Коле або елемента Варбурга, можуть бути розглянуті з точки зору рівняння (1.2)[14].

Оскільки нас цікавить дійснозначний розв'язок  $g(\tau)$ , то рівняння (1.2) доцільно замінити системою інтегральних рівнянь  $A_1, A_2$ :

$$\begin{cases} (A_1 g)(\omega) = \int_0^{\infty} \frac{g(\tau) d\tau}{1 + \omega^2 \tau^2} = Z'(\omega) \\ (A_2 g)(\omega) = \int_0^{\infty} \frac{\omega \tau g(\tau) d\tau}{1 + \omega^2 \tau^2} = -Z''(\omega) \end{cases} \quad (1.3)$$

Якщо ж замість усієї функції  $Z(\omega)$  відомі лише спостереження імпедансу  $Z(\omega_j) = Z(\omega_j)' + iZ(\omega_j)''$ , то система (1.3) стає колокаційною і може бути записана у абстрактному вигляді

$$T_N A_1 g = T_N Z' \quad T_N A_2 g = -T_N Z'' \quad (1.4)$$

де  $T_N$  це так званий вибірковий оператор (sampling operator), який для певної функції  $F(\omega)$  визначає вектор її значень у заданих точках  $\omega_j$ , тобто

$$T_N F = (F(\omega_0), F(\omega_1), F(\omega_2), \dots, F(\omega_{N-1}))$$

**Колокація** – це спеціальна форма дискретизації, коли оригінальна задача на кшталт (1.3), замінюється скінченновимірною. Для нашого випадку, колокація це проектування у Евклідовий простір  $R^N$  векторів  $u = (u_0, u_1, \dots, u_{N-1}), v = (v_0, v_1, \dots, v_{N-1})$ , у якому визначений скалярний добуток

$$\langle u, v \rangle_{R^N} = \sum_{j=0}^{N-1} \gamma_j u_j v_j$$

з відповідною нормою  $\|\cdot\|_{R^N}$ ; тут вагові множники  $\gamma_j$  - деякі додатні числа.

Відмітимо, що якщо оператори  $A_1, A_2$  розглядаються у просторі  $L_2(0, \infty)$  дійснoвизначених сумованих з квадратом функцій на  $(0, \infty)$ , то рівняння (1.4), через свою скінченновимірність, завжди мають розв'язок хоча за допомогою методу найменших квадратів.

## 1.2. Інтегральні рівняння. Рівняння Фредгольма першого роду

### 1.2.1. Загальні відомості про інтегральні рівняння

Інтегральним рівнянням називається рівняння, що містить невідому функцію під знаком інтеграла. Наприклад,

$$y(x) = \int_a^b K(x, s) y(s) ds + f(x) \quad (a \leq x \leq b) \quad (1.5)$$

або

$$y(x) = \int_a^x K(x, s) y(s) ds + f(x) \quad (1.6)$$

Тут  $K(x, s)$  та  $f(x)$  – задані функції, а  $y(x)$  – шукане рішення. Функція  $K(x, s)$  в наведених відношеннях називається ядром інтегрального рівняння.

Рівняння (1.5) та (1.6) відносяться до лінійних інтегральних рівнянь. Існують також нелінійні інтегральні рівняння, наприклад

$$y(x) = \int_a^x K(x, s, y(s)) ds + f(x)$$

Існує наступна класифікація інтегральних рівнянь:

а) якщо шукана функція знаходиться лише під знаком інтеграла, то таке рівняння називають інтегральним рівнянням першого роду. Такими рівняннями являються, наприклад

$$\int_a^b K(x, s) y(s) ds = f(x) \quad (1.7)$$

або

$$\int_a^x K(x, s, y(s)) ds = f(x) \quad (1.8)$$

Відношення (1.5) та (1.6), у яких функція міститься і поза інтегралом, називаються рівняннями другого роду.

б) якщо межі інтегрування фіксовані, то інтегральне рівняння називається інтегральним рівнянням Фредгольма (випадки (1.5) та (1.7)). Якщо ж межі інтегрування є змінними, (випадки (1.6) та (1.8)), то таке інтегральне рівняння називається рівнянням Вольтерра.

Формально рівняння Вольтерра можна розглядати як частиковий випадок рівняння Фредгольма, вважаючи, що ядро  $K(x, s)$  тотожно рівне 0 при  $s > x$ . Втім, фізичні задачі, що приводять до рівнянь Вольтерра та Фредгольма, а також властивості розв'язків цих рівнянь істотно різняться, тому рівняння Вольтерра виділяють у особливий тип рівнянь.

в) рівняння (1.5)-(1.8) називають однорідними, якщо  $f(x)$  тотожно рівне 0. Інакше вони називаються неоднорідними

Інтегрування у інтегральному рівнянні може проводитися як по відрізку прямої, так і по деякій області. Від цього приведена вище класифікація не змінюється[15].

Також, надалі будемо вважати, що для ядра  $K(x, s)$  при  $x, s \in [a, b]$  виконуються наступні умови:

- 1)  $K(x, s)$  - чисельна функція.
- 2)  $K(x, s)$  не дорівнює тотожно нулю.
- 3)  $K(x, s)$  - неперервна функція по сукупності елементів.
- 4)  $K(x, s)$  - симетричне ядро, тобто  $K(x, s) = K(s, x)$ .

### 1.2.2. Рівняння Фредгольма першого роду як некоректно поставлена задача

Розв'язок будь якої кількісної математичної задачі зазвичай заключається у знаходженні певного «рішення» по заданим «вхідним даним»  $f$ . Запишемо це у формі  $y = R(f)$ , де  $R$  – деякий оператор. Будемо вважати  $y$  та  $f$  елементами метричних просторів  $T$  та  $F$  з відстанями між цими елементами  $\rho_Y(y_1, y_2)$  та  $\rho_F(f_1, f_2)$ .

Розв'язок називають стійким, якщо для будь якого  $\varepsilon > 0$  можна вказати таке  $\delta(\varepsilon) > 0$ , що з нерівності  $(f_1, f_2) \leq \delta(\varepsilon)$  випливає  $\rho_Y(y_1, y_2) \leq \varepsilon$ , де  $f_1$  та  $f_2$  - довільні елементи  $F$ ,  $y_1 = R(f_1) \in Y$ ,  $y_2 = R(f_2) \in Y$ .

Задача  $y = R(f)$  називається коректно поставленою на парі метричних просторів  $(Y, F)$ , якщо виконуються умови:

- 5) Для будь якого елемента  $f \in F$  існує розв'язок  $y \in Y$ .
- 6) Розв'язок визначається однозначно.
- 7) Розв'язок є стійким

Задачі, що не відповідають зазначеним вимогам, називаються некоректно поставленими.

Відмітимо, що метрики у просторах  $Y$  та  $F$  характеризують, що мається на увазі під «малою зміною»  $y$  та  $f$ . Від того, яким чином вибрана метрика, може залежати, чи буде рішення  $y$  стійким при зміні  $f$  або ні, і відповідно, чи буде задача  $y = R(f)$  коректною.

Знову розглянемо інтегральне рівняння Фредгольма першого роду (1.7)

$$\int_a^b K(x,s)y(s)ds = f(x)$$

Нехай ядро  $K(x,s)$  є неперервним. Будемо вважати  $y$  та  $f$  елементами просторів неперервних на  $[a,b]$  функцій з метрикою

$$\begin{aligned}\rho_Y(y_1, y_2) &= \sup_{[a,b]} |y_1(x) - y_2(x)|, \\ \rho_F(f_1, f_2) &= \sup_{[a,b]} |f_1(x) - f_2(x)|\end{aligned}\tag{1.9}$$

Якщо ядро  $K(x,s)$  є замкненим, то розв'язок є єдиним. Розглянемо деякі міркування щодо існування розв'язку поставленої задачі.

Нескладно побачити, що неперервність  $f(x)$  у загальному випадку не гарантує існування неперервного розв'язку. Дійсно, нехай функція  $f(x)$  неперервна, але має розриви похідної при деяких значеннях  $x \in (a,b)$ , а ядро  $K(x,s)$  неперервно диференційоване по  $x$ . Тоді для будь якої неперервної  $y(x)$  ліва частина (1.7) усюди на  $(a,b)$  має неперервну похідну, у той час як права частина має неперервну похідну не при усіх  $x$ . Відповідно, відношення (1.7) не виконується для жодної неперервної функції  $y(x)$ , тобто, неперервного розв'язку (1.7) не існує.

Тепер розглянемо питання умов, необхідних для існування неперервного розв'язку (1.7). З (1.7) випливає, що  $f(x)$  є функцією, що представляється через ядро. Коефіцієнти Фур'є  $f_n$  та  $y_n$  по системі власних функцій ядра  $K(x,s)$  пов'язані формулою  $\lambda_n f_n = y_n$ . У силу нерівності Бесселя [17] для  $y(x)$  ряд  $\sum_{n=1}^{\infty} y_n^2$  є збіжним, і, відповідно, збіжним є і ряд  $\sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2 f_n^2$ , тобто коефіцієнти  $f_n$  повинні зменшуватись досить швидко. Неперервність  $f_n$  забезпечує збіжність ряду  $\sum_{n=1}^{\infty} f_n^2$ , яка впливає з нерівності Бесселя для  $f(x)$ , втім, у загальному, не забезпечує збіжність  $\sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2 f_n^2$ . Відповідно, розв'язок (1.7) може існувати не для будь якої

неперервної функції  $f(x)$ , а лише для такої, для якої збігається ряд

$$\sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2 f_n^2 \text{ (нагадаємо, що } |\lambda| \rightarrow \infty \text{ при } n \rightarrow \infty \text{)}.$$

Розглянемо питання стійкості. Нехай  $y(x)$  є розв'язком рівняння (1.7).

Введемо  $z(x) = y(x) + \cos(\omega x)$ , де  $\omega$  - деякий параметр. Отримаємо рівняння.

Якому задовольняє  $z(x)$  у припущенні, що  $K(x, s)$  неперервне разом з похідною по  $s$ . Маємо з (1.7)

$$\int_a^b K(x, s)[z(s) - \cos(\omega s)]ds = f(x)$$

звідки

$$\begin{aligned} \int_a^b K(x, s)z(s)ds &= g(x) = f(x) + \int_a^b K(x, s)\cos(\omega s)ds = \\ &= f(x) + K(x, s)\frac{\sin(\omega s)}{\omega} \Big|_a^b - \int_a^b K'_s(x, s)\frac{\sin(\omega s)}{\omega}ds \end{aligned}$$

Очевидно, що  $\sup_{[a, b]} |f(x) - g(x)| \leq \frac{C}{\omega}$ , де  $C$  - незалежна від  $\omega$

константа. Тому при достатньо великому значенні  $\omega$  значення

$$\rho_F(f, g) = \sup_{[a, b]} |f(x) - g(x)| \text{ як завгодно мале. У той же час}$$

$$\rho_Y(y, z) = \sup_{[a, b]} |\cos(\omega x)| = 1, \text{ тобто ця величина малою не є. Звідси можна}$$

зробити важливий висновок: рішення інтегрального рівняння Фредгольма першого роду є нестійким відносно збурення функції  $f(x)$ . Тому рівняння (1.7) відноситься до класу некоректно поставлених задач або, як прийнято говорити, некоректною задачею.

Ця властивість рівняння першого роду створювала великі труднощі при практичному використанні таких рівнянь, між тим, багато фізичних процесів описується саме такими рівняннями. Мала похибка у вхідних даних може привести до того, що розв'язок не буде мати нічого спільного з реальним фізичним процесом або навіть не буде існувати.



### **1.2.3. Метод регуляризації Тихонова**

Знову звернемося до рівняння (1.7).

### **1.2.4. Стратегії підбору параметрів регуляризації**

## **Висновки до розділу 1**

## Розділ 2. ЗНАХОДЖЕННЯ РОЗВ'ЯЗКУ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ. МОДЕЛЮВАННЯ ВХІДНИХ ДАНИХ

У розділі приводиться хід розв'язку рівняння 1.4 і ряд проблем, які виникають при реалізації цього розв'язку. Розділ 2.1. присвячений знаходженню розв'язку для задачі (1.4). Розділ 2.2 присвячений деталям моделювання даних у разі відсутності результатів реальних експериментів. Розділ 2.3 присвячений ряду обчислювальних проблем – зокрема знаходженню розв'язків СЛАР з погано обумовленими матрицями та чисельному обчисленню невластивих інтегралів.

//коментар// у звіті використовується словосполучення «joint regularization». Наскільки я розумію, мається на увазі той факт, що регуляризації проводить по двом параметрам? Якщо це не так і мені теж треба згадати це визначення, не могли б ви вказати його переклад на українську?

### 2.1. Регуляризація колокаційних імпедансних рівнянь

У цьому розділі розглянемо методику регуляризації колокаційного рівняння (1.4). Ця регуляризації може бути сформульована як мінімізація функціоналів:

$$\begin{aligned}\Phi_1(g) &= \|T_N A_1 g - T_N Z'\|_{R^N}^2 + \lambda_1 \|g\|_{L_2(0,\infty)}^2 \\ \Phi_2(g) &= \|T_N A_2 g - T_N Z''\|_{R^N}^2 + \lambda_2 \|g\|_{L_2(0,\infty)}^2\end{aligned}\quad (2.1)$$

Одразу відвіtimo, що можливою є регуляризації по двом параметрам одночасно, як наприклад у [14]. Вона має вигляд

$$\Phi(g) = \lambda_1 \|T_N A_1 g - T_N Z'\|_{R^N}^2 + \lambda_2 \|T_N A_2 g - T_N Z''\|_{R^N}^2 + \|g\|_{L_2(0,\infty)}^2 \quad (2.2)$$

Втім, не зважаючи на те, що вона може привести до кращих результатів за (2.1), вона є мультипараметричною і потребує значно складнішої стратегії вибору параметрів, особливо враховуючи малу дослідженість проблеми мультипараметричної регуляризації. Таким чином, регуляризації окремо по уявній і окремо по реальній частині є більш ефективною у тому сенсі, що методи підбору параметрів  $\lambda_1$  та  $\lambda_2$  для (2.1) є більш вивченими, ніж для

(2.2), і, відповідно. Крім того, рівняння (2.2) приводить до СЛАР розміру  $(2N \times 2N)$  б через що число обумовленості матриці росте значно швидше. Враховуючи те, що задача, що розглядається, і так є некоректно поставленою, це може призвести до значних похибок.

Повертаючись до рівнянь (2.1), відмітимо, що перші доданки відповідають відхиленням даних, а другі – мірі регуляризації. У дусі регуляризації Тихонова останній доданок являє собою норму розв'язку у просторі  $L_2(0, \infty)$ , що визначається скалярним добутком

$$\langle f, g \rangle_{L_2(0, \infty)} = \int_0^{\infty} f(\tau)g(\tau)d\tau, \quad f, g \subseteq L_2(0, \infty)$$

Відомо[8], що наближений регуляризований розв'язок (1.4), що мінімізує (2.1), може бути знайдений з операторних рівнянь

$$\begin{aligned} (T_N A_1)^* T_N A_1 g + \lambda_1 g &= (T_N A_1)^* T_N Z' \\ (T_N A_2)^* T_N A_2 g + \lambda_2 g &= -(T_N A_2)^* T_N Z'' \end{aligned} \quad (2.3)$$

де  $(T_N A_1)^*$  та  $(T_N A_2)^*$  - спряжені оператори до  $T_N A_1$  та  $T_N A_2$  відповідно.

Вони визначаються відношеннями

$$\begin{aligned} \langle u, T_N A_1 f \rangle_{R^N} &= \langle (T_N A_1)^* u, f \rangle_{L_2(0, \infty)} \\ \langle u, T_N A_2 f \rangle_{R^N} &= \langle (T_N A_2)^* u, f \rangle_{L_2(0, \infty)} \end{aligned} \quad (2.4)$$

які мають задовольнятися для будь яких  $f \subseteq L_2(0, \infty)$  та  $u = (u_0, u_1, \dots, u_{N-1}) \subseteq R^N$ .

Виходячи з визначення  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{R^N}, T_N$ , а також (1.3), маємо

$$\begin{aligned} \langle u, T_N A_1 f \rangle_{R^N} &= \sum_{j=0}^{N-1} \gamma_j u_j \left( \int_0^{\infty} \frac{f(\tau) d\tau}{1 + \omega_j^2 \tau^2} \right) = \int_0^{\infty} \left( \sum_{j=0}^{N-1} \frac{\gamma_j u_j}{1 + \omega_j^2 \tau^2} \right) f(\tau) d\tau = \left\langle \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{1 + \omega_j^2 \tau^2} \gamma_j u_j, f \right\rangle_{L_2(0, \infty)} \\ \langle u, T_N A_2 f \rangle_{R^N} &= \sum_{j=0}^{N-1} \gamma_j u_j \left( \int_0^{\infty} \frac{\omega \tau f(\tau) d\tau}{1 + \omega_j^2 \tau^2} \right) = \int_0^{\infty} \left( \sum_{j=0}^{N-1} \frac{\omega \tau \gamma_j u_j}{1 + \omega_j^2 \tau^2} \right) f(\tau) d\tau = \left\langle \sum_{j=0}^{N-1} \frac{\omega \tau}{1 + \omega_j^2 \tau^2} \gamma_j u_j, f \right\rangle_{L_2(0, \infty)} \end{aligned}$$

Тепер, з (2.4) можна зробити висновок, що для будь якого  $u = (u_0, u_1, \dots, u_{N-1}) \subseteq R^N$

$$\begin{aligned}
(T_N A_1)^* u &= \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{1 + \omega_j^2 \tau^2} \gamma_j u_j \\
(T_N A_2)^* u &= \sum_{j=0}^{N-1} \frac{\omega \tau}{1 + \omega_j^2 \tau^2} \gamma_j u_j
\end{aligned} \tag{2.5}$$

З іншого боку, з визначення спряженого оператора  $(T_N A_1)^*$  та  $(T_N A_2)^*$  мають бути  $N$ -вимірними операторами з  $L_2(0, \infty)$  у  $R^N$ , і, відповідно, можуть бути представленими у вигляді

$$\begin{aligned}
(T_N A_1)^*(\cdot) &= \sum_{j=0}^{N-1} l_j^1(\tau) \langle e^j, \cdot \rangle_{R^N} \\
(T_N A_2)^*(\cdot) &= \sum_{j=0}^{N-1} l_j^2(\tau) \langle e^j, \cdot \rangle_{R^N}
\end{aligned} \tag{2.6}$$

де  $l_j^1, l_j^2 \subseteq L_2(0, \infty)$ ,  $e^j \subseteq R^N$ . Порівнюючи з (2.5), приходимо до наступних формул

$$l_j^1(\tau) = \frac{1}{1 + \omega_j^2 \tau^2} \quad l_j^2(\tau) = \frac{\omega_j \tau}{1 + \omega_j^2 \tau^2} \tag{2.7}$$

$$e^j = (e_0^j, e_1^j, \dots, e_{N-1}^j) \subseteq R^N \quad e_k^j = \delta_{kj} \tag{2.8}$$

де  $\delta_{kj}$  - символ Кронекера, тобто  $\delta_{kj} = 0$  для  $k \neq j$ ,  $\delta_{jj} = 1$

Тепер з (2.6)-(2.8) легко побачити, що розв'язок (2.3) може бути представлений у вигляді

$$\begin{aligned}
g_{\lambda_1}(\tau) &= \sum_{j=0}^{N-1} g_j^1 \frac{1}{1 + \omega_j^2 \tau^2} \\
g_{\lambda_2}(\tau) &= \sum_{j=0}^{N-1} g_j^2 \frac{\omega \tau}{1 + \omega_j^2 \tau^2}
\end{aligned} \tag{2.9}$$

невідомі коефіцієнти  $g_j^1$  та  $g_j^2$  можна знайти, вирішивши систему лінійних алгебраїчних рівнянь

$$\begin{aligned}
\lambda_1 g_k^1 + \sum_{j=0}^{N-1} g_j^1 \gamma_{\kappa} a_{kj}^1 &= \gamma_{\kappa} Z'(\omega_{\kappa}) \\
\lambda_2 g_k^2 + \sum_{j=0}^{N-1} g_j^2 \gamma_{\kappa} a_{kj}^2 &= -\gamma_{\kappa} Z''(\omega_{\kappa})
\end{aligned} \quad k = \overline{0, N-1} \tag{2.10}$$

де параметри  $a_{kj}^1$  та  $a_{kj}^2$  визначаються як

$$\begin{aligned} a_{kj}^1 &= \int_0^\infty l_k^1(\tau) l_j^1(\tau) d\tau = \int_0^\infty \frac{1}{1 + \omega_k^2 \tau^2} \cdot \frac{1}{1 + \omega_j^2 \tau^2} d\tau = \frac{\pi}{2(\omega_k + \omega_j)} \\ a_{kj}^2 &= \int_0^\infty l_k^2(\tau) l_j^2(\tau) d\tau = \int_0^\infty \frac{\omega_k \tau}{1 + \omega_k^2 \tau^2} \cdot \frac{\omega_j \tau}{1 + \omega_j^2 \tau^2} d\tau = \frac{\pi}{2(\omega_k + \omega_j)} \end{aligned} \quad (2.11)$$

**2.2.**

**2.3.**

## Висновки до розділу 2

## **Розділ 3.**

### **3.1. Опис програмного забезпечення**

### **3.2. Інструкція користувача**

### **3.3. Тестування розробленого програмного забезпечення**

## **Висновки до розділу 3**

## **ВИСНОВКИ**

1.

## **СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ**

1. McIntyre, J.M.; Pham, H.Q. (1996). "Electrochemical impedance spectroscopy; a tool for organic coatings optimizations". *Progress in Organic Coatings*. **27** (1–4): 201–207. doi:10.1016/0300-9440(95)00532-3
2. Bonora, P.L.; Deflorian, F.; Fedrizzi, L. (1996). "Electrochemical impedance spectroscopy as a tool for investigating underpaint corrosion". *Electrochimica Acta*. **41** (7–8): 1073–1082. doi:10.1016/0013-4686(95)00440-8
3. Maalouf, R.; Fournier-Wirth, C.; Coste, J.; Chebib, H.; Saikali, Y.; Vittori, O.; Errachid, A.; Cloarec, J.P.; Martelet, C.; Jaffrezic-Renault, N. (2007). "Label-Free Detection of Bacteria by Electrochemical Impedance Spectroscopy:

- Comparison to Surface Plasmon Resonance". Analytical Chemistry. 79 (13): 4879–4886. doi:10.1021/ac070085n. PMID 17523594*
4. Ruan, C.; Yang, L.; Li, Y. (2002). "Immunobiosensor Chips for Detection of *Escherichia coli* O157:H7 Using Electrochemical Impedance Spectroscopy". *Analytical Chemistry. 74 (18): 4814–4820. doi:10.1021/ac025647b*
  5. Nandakumar, V.; La Belle, J.T.; Reed, J.; Shah, M.; Cochran, D.; Joshi, L.; Alford, T.L. (2008). "A methodology for rapid detection of *Salmonella typhimurium* using label-free electrochemical impedance spectroscopy". *Biosensors & Bioelectronics. 24 (4): 1039–1042*
  6. Mabrook, M.F.; Petty, M.C. (2003). "Effect of composition on the electrical conductance of milk". *Journal of Food Engineering. 60 (3): 321–325. doi:10.1016/S0260-8774(03)00054-2*
  7. Damez, J.L.; Clerion, S.; Abouelkaram, S.; Lepetit, J. (2008). "Beef meat electrical impedance spectroscopy and anisotropy sensing for non-invasive early assessment of meat ageing". *Journal of Food Engineering. 85 (1): 116–122. doi:10.1016/j.jfoodeng.2007.07.026*
  8. Buchholz AC, Bartok C, Schoeller DA (October 2004). "The validity of bioelectrical impedance models in clinical populations". *Nutrition in Clinical Practice. 19 (5): 433–46. doi:10.1177/0115426504019005433. PMID 16215137*
  9. Comparing parameter choice methods for regularization of ill-posed problems(mainLowRes)
  - 10.[https://en.wikipedia.org/wiki/Electrical\\_impedance](https://en.wikipedia.org/wiki/Electrical_impedance)
  - 11.[https://en.wikipedia.org/wiki/Dielectric\\_spectroscopy](https://en.wikipedia.org/wiki/Dielectric_spectroscopy)
  - 12.<http://www.consultsr.net/resources/eis/cpe1.htm>
  - 13.QCircuits
  - 14.Report
  - 15.Васильева А. Б., Тихонов Н. А. Интегральные уравнения. — 2-е изд., стереотип. — М: ФИЗМАТЛИТ, 2002. — 160 с. — ISBN 5-9221-0275-3.
  - 16.Краснов М. Л. Интегральные уравнения: введение в теорию. — М.: Наука, 1975

17. <http://mathworld.wolfram.com/BesselsInequality.html>

18. J.Y. Chen, S. Pereverzyev, Y.S. Xu, Aggregation of regularized solutions from multiple observation models, *Inverse Problems* 31(7) (2015).