

Ф. Ф. САЙБЕРТ

аспірант кафедри програмного забезпечення систем  
ДВНЗ «Ужгородський національний університет»  
ORCID: 0009-0004-8081-4174

Ю. Ю. БІЛАК

кандидат фізико-математичних наук, доцент,  
завідувач кафедри програмного забезпечення систем  
ДВНЗ «Ужгородський національний університет»  
ORCID: 0000-0001-5989-1643

## АДАПТИВНА ІНФОРМАЦІЙНА СИСТЕМА СПЕКТРАЛЬНОГО МОДЕЛЮВАННЯ НА БАЗІ ФІЗИЧНО-ІНФОРМОВАНОГО МОНТЕ-КАРЛО

У статті представлено розробку концепції адаптивної інформаційної системи спектрального моделювання, що базується на фізично-інформованому циклі Монте-Карло (АФІЦ-МК). Метою дослідження є підвищення точності та ефективності моделювання оптичних характеристик складних гетерогенних середовищ шляхом інтеграції детермінованих і стохастичних методів у єдиній адаптивній архітектурі. Запропонована система реалізує гібридну мультифідельну структуру, яка поєднує методи скінченних різниць у часовій області і скінченних елементів із стохастичними алгоритмами Монте-Карло, забезпечуючи динамічне узгодження рівнів точності в процесі симуляції.

Особливістю системи є поєднання low-fidelity емуляцій із періодичними high-fidelity симуляціями (~10%), що дозволяє стабілізувати розрахунковий процес, проводити регулярну корекцію моделей та зменшити обчислювальні витрати до 40% без втрати фізичної достовірності результатів. До складу алгоритму включено механізм адаптивного уточнення сітки в областях інтенсивних спектральних змін, а також онлайн-статистичне усереднення за методом Велфорда, що забезпечує стійкість до шуму та підвищення точності статистичних оцінок.

Для перевірки ефективності АФІЦ-МК проведено чисельне моделювання спектрів пропускання та відбивання для трьох класів матеріалів – композитів, біологічних тканин і наноструктур. Результати засвідчили, що композити характеризуються високою стабільністю оптичних параметрів, біологічні тканини виявляють найбільшу варіативність через неоднорідність структури, а наноструктури демонструють високу чутливість до локальних геометричних змін.

Розроблений алгоритм забезпечує збалансоване поєднання фізичної коректності, адаптивності та обчислювальної ефективності. Отримані результати відкривають перспективи використання АФІЦ-МК у системах інтелектуального спектрального аналізу, автоматизованих лабораторіях, а також у гібридних AI-платформах для прогнозування та оптимізації оптичних властивостей складних матеріалів і біоінженерних структур.

**Ключові слова:** спектральне моделювання; гетерогенні середовища; чисельні методи; адаптивна сітка; мультифідельна стратегія; фізично-інформоване моделювання; стохастичні алгоритми.

F. F. SAIBERT

Postgraduate Student at the Department of Systems Software  
State University “Uzhgorod National University”  
ORCID: 0009-0004-8081-4174

YU. YU. BILAK

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associated Professor,  
Head of the Department of Systems Software  
State University “Uzhgorod National University”  
ORCID: 0000-0001-5989-1643

## ADAPTIVE INFORMATION SYSTEM FOR SPECTRAL MODELING BASED ON PHYSICALLY-INFORMED MONTE CARLO

The article presents the development of a concept for an adaptive information system for spectral modeling based on the Physically-Informed Monte Carlo Cycle (APIMC). The purpose of the study is to enhance the accuracy and efficiency of modeling optical properties of complex heterogeneous media through the integration of deterministic and stochastic

methods within a unified adaptive architecture. The proposed system implements a hybrid multi-fidelity structure that combines the Finite-Difference Time-Domain (FDTD) and Finite Element Method (FEM) approaches with stochastic Monte Carlo algorithms, ensuring dynamic alignment of accuracy levels during the simulation process.

A distinctive feature of the system is the combination of low-fidelity emulations with periodic high-fidelity simulations (~10%), which stabilizes computations, enables regular model correction, and reduces computational costs by up to 40% without compromising physical validity. The algorithm incorporates an adaptive mesh refinement mechanism in regions of intensive spectral variation, as well as online statistical averaging based on the Welford method, which improves noise resistance and enhances the precision of statistical estimates.

To evaluate the efficiency of the APIMC approach, numerical simulations of transmission and reflection spectra were conducted for three classes of materials—composites, biological tissues, and nanostructures. The results demonstrated that composites exhibit high stability of optical parameters, biological tissues show the greatest variability due to structural heterogeneity, and nanostructures reveal strong sensitivity to local geometric changes.

The developed algorithm provides a balanced combination of physical correctness, adaptability, and computational efficiency. The obtained results open new prospects for applying the APIMC algorithm in intelligent spectral analysis systems, automated laboratories, and hybrid AI platforms for forecasting and optimizing the optical properties of complex materials and bioengineered structures.

**Key words:** spectral modeling; heterogeneous media; numerical methods; adaptive mesh; multifidelity strategy; physically informed modeling; stochastic algorithms.

### Постановка проблеми

Сучасні матеріали дедалі частіше мають складну гетерогенну структуру – композити з різнорозмірними включеннями, біологічні тканини з неоднорідними клітинними компонентами або наноструктуровані покриття із чітко розподіленими наночастинками. У таких системах спектральний аналіз є важливим інструментом для неінвазивного дослідження внутрішньої структури, складу та оптичних властивостей, що дозволяє визначати концентрації компонентів, товщини шарів, наявність дефектів або домішок, а також динамічні процеси.

Традиційні методи (аналітичні моделі та експериментальні вимірювання) мають суттєві обмеження. Аналітичні моделі, такі як моделі ефективного середовища чи багаточарові формули, часто базуються на спрощених припущеннях (однорідність, слабка неоднорідність, ізотропність) і не дозволяють точно врахувати просторові флуктуації та стохастичні ефекти. Експериментальні методи забезпечують «реальні» спектри, але не завжди дозволяють інтерпретувати складну морфологію матеріалу, особливо коли внутрішня структура прихована або пошкоджена. Зростає потреба у математичних та чисельних моделях, які здатні прогнозувати спектри для заданих гетерогенних конфігурацій та інтерпретувати виміряні спектри через обернене моделювання. Такі моделі поєднують фізично обґрунтовані рівняння (рівняння Максвелла, рівняння переносу випромінювання) з адаптивними чисельними методами (FDTD, FEM, RCWA, стохастичні моделі). До прикладу, спектральні методи дозволяють моделювати мікроструктури у матеріалах (spectral methods for broad-field modeling) з високою роздільною здатністю та точністю [1]. Загальні принципи мультискейл-моделювання ефективних властивостей композитів описані в останніх оглядах [2], тоді як нові концепції до врахування просторової стохастичності і флуктуацій у неоднорідних середовищах дозволяють значно покращити точність прогнозування спектрів [3]. Проте у більшості досліджень залишається недостатньо опрацьованим поєднання стохастичності, впливу випадкових включень та інтеграції обернених алгоритмів чи апаратів машинного навчання. Саме це визначає актуальність подальших досліджень у напрямку гібридних фізико-чисельних моделей зі статистичним та AI-підсиленням компонентом.

### Формулювання мети дослідження

Мета роботи – розробити та апробувати інформаційну технологію спектроскопічного моделювання складних гетерогенних середовищ, засновану на адаптивному фізико-інформованому циклі Монте-Карло, що забезпечує комплексне поєднання фізичних моделей, чисельних методів і стохастичного усереднення для підвищення точності та ефективності розрахунку спектральних характеристик.

Для досягнення поставленої мети в роботі вирішуються такі основні завдання:

1. Обґрунтувати теоретичні основи взаємодії електромагнітного випромінювання з гетерогенними матеріалами та сформулювати математичні моделі, придатні для опису процесів поглинання, розсіяння й флуоресценції.
2. Реалізувати інтеграцію фізично обґрунтованих моделей (ЕМА) із чисельними методами (FDTD, FEM, Monte-Carlo) для врахування просторової неоднорідності, дисперсії матеріалів та стохастичних ефектів.
3. Розробити адаптивний обчислювальний цикл з локальним уточненням сітки, що забезпечує підвищення роздільної здатності в областях інтенсивних спектральних змін і скорочення обчислювальних витрат.
4. Запровадити мультифідельну стратегію, яка поєднує low-fidelity емуляційні моделі з періодичними high-fidelity обчисленнями для стабілізації результатів і збереження фізичної достовірності.
5. Провести чисельну апробацію алгоритму на прикладі трьох класів матеріалів (композити, біологічні тканини, наноструктури) та виконати порівняльний аналіз.
6. Оцінити ефективність і точність запропонованої технології, визначивши ступінь варіативності спектрів, рівень похибки моделювання та потенціал подальшої автоматизації процесів спектрального аналізу.

Наукова новизна роботи полягає у розробленні адаптивного фізично-інформованого циклу Монте-Карло, який уперше інтегрує фізично обґрунтовані моделі ефективного середовища та переносу випромінювання з чисельними методами (FDTD, FEM) і мультифідельною стратегією. Запропоновано алгоритм локального уточнення сітки за градієнтом спектральної зміни, що забезпечує підвищення точності моделювання при зниженні обчислювальних витрат. Уперше реалізовано гібридну схему поєднання low- і high-fidelity симуляцій для стабілізації результатів без втрати фізичної достовірності.

#### Аналіз останніх досліджень і публікацій

Сучасні наукові праці демонструють, що для моделювання оптичних властивостей складних гетерогенних матеріалів використовують широкий набір методів та моделей: рівняння Максвелла з чисельними методами (FDTD, FEM, RCWA), рівняння переносу випромінювання та стохастичні методи (Monte-Carlo), а також різні формули ефективного середовища і сучасні ML-підходи для емулювання «дорогої» фізики. Такі огляди дають міцну методологічну базу; одночасно вони вказують на проблеми масштабування, врахування стохастики та інтеграції прямих і обернених задач, що обґрунтовує потребу в комплексному гібридному моделюванні [4,5].

Класичні аналітичні моделі ефективного середовища та локальних наближень, представлені у працях [6,7], стали фундаментом для опису гетерогенних матеріалів через їхні усереднені оптичні параметри – ефективні показники заломлення, поглинання та дисперсії. Вони забезпечують високу точність у випадках, коли неоднорідності є малими порівняно з довжиною хвилі (розмір включень  $\ll \lambda$ ), що робить їх особливо корисними для аналізу дрібнодисперсних або слабко неоднорідних структур. Проте такі моделі мають певні обмеження, вони не враховують просторову кореляцію розподілу включень, не придатні для опису наноструктурованих чи фрактальних систем і не відображають ефектів розсіювання високого порядку.

Традиційні чисельні методи, такі як FDTD, FEM, RCWA та Monte-Carlo, відіграли ключову роль у розвитку спектроскопічного моделювання, забезпечивши можливість детального відтворення просторового розподілу електромагнітних полів, процесів флуоресценції та розсіювання світла у складних середовищах. Зокрема, роботи [5,8] систематизували практичні аспекти FDTD-моделювання та порівняли його з іншими чисельними методами, тоді як [4,9] узагальнили метод Monte-Carlo до задач переносу випромінювання у біологічних і гетерогенних середовищах. Методи FDTD і FEM забезпечують високу точність при описі періодичних або локалізованих структур, тоді як Monte-Carlo підходить для сильно розсіюючих та випадкових систем. Водночас ці методи мають суттєві обмеження, що пов'язані зі значними обчислювальними витратами (особливо для тривимірних FDTD-моделей) та труднощі з інтеграцією процесів на різних просторових масштабах. Також відсутність врахування реальної стохастики мікроструктури або фізико-хімічних флуктуацій. Загалом, подальший розвиток у цьому напрямі передбачає поєднання детермінованих та стохастичних методів у єдині гібридні схеми, а також впровадження адаптивних сіток і алгоритмів оптимізації для зменшення обчислювального навантаження без втрати точності.

Мультискейл та стохастичні розширення чисельних методів стали наступним кроком у розвитку спектроскопічного моделювання, оскільки вони дозволяють поєднати детальний опис мікроскопічних процесів із макроскопічними статистичними закономірностями. У роботі [2] розглянуто сучасні методи мультискейл-моделювання, які дозволяють описувати ефективні властивості гетерогенних матеріалів через комбінацію локальних і глобальних рівнів. У праці [10] запропонували поєднання методів Monte-Carlo та FDTD, що дало змогу враховувати як стохастичність розподілу включень, так і просторові особливості електромагнітного поля. У [11] розширено застосування класичних FDTD-моделей для роботи з невизначеностями, а у [12] здійснили експериментальну валідацію спектроскопічної Monte-Carlo моделі, підтверджуючи її придатність для опису реальних середовищ. Незважаючи на високу точність і фізичну адекватність таких моделей, їх практичне застосування ускладнюється через громіздку програмну реалізацію, яка потребує великих вибірок для статистичного усереднення та труднощами узгодження меж між локальними й глобальними моделями. Подальший розвиток цього напрямку вимагає автоматизованого формування мультифізичних моделей із самоналаштуванням сітки та інтеграцію алгоритмів оптимізації й нейромережових предикторів для прискорення розрахунків і зменшення потреби у ручному калібруванні.

Сучасний етап розвитку характеризується активною інтеграцією методів штучного інтелекту з традиційними фізичними моделями, що формує новий клас гібридних інтелектуальних систем [13,14], які забезпечують високу точність відтворення спектральних характеристик складних матеріалів. У цих концепціях машинне навчання використовується не лише як засіб апроксимації, але й як інструмент побудови мультифідельних моделей та емуляторів складних фізичних процесів [15,16]. Physics-informed нейронні мережі дозволяють безпосередньо враховувати фізичні закони у процесі навчання, що підвищує достовірність і стабільність розрахунків [17].

Останні дослідження у цій галузі демонструють чітку тенденцію до інтеграції інтелектуальних систем у процес спектроскопічного аналізу. У роботі [18] показано, що машинне навчання радикально підвищує ефективність інтерпретації NMR-спектрів, забезпечуючи автоматизоване відновлення структурних характеристик. У праці [19] узагальнили сучасні алгоритмічні методи застосування штучного інтелекту в спектроскопії, від моделювання до генеративного синтезу даних, підкресливши роль глибоких нейронних мереж у створенні нових хімічних знань.

Праці [20-21] зосереджені на побудові гібридних нейромережевих систем для оптимізації спектроскопічних вимірювань, моделювання та прогнозування параметрів у Raman-спектроскопії, а також на створенні інформаційних систем, що об'єднують фізичне моделювання з алгоритмами машинного навчання. Сукупність цих результатів окреслює перехід від класичних чисельних методів до інтелектуально керованих систем спектроскопічного аналізу нового покоління.

### Викладення основного матеріалу дослідження

#### Методи та моделі

**Теоретичні основи спектроскопічного моделювання.** Теоретичні основи спектроскопічного моделювання базуються на фізичних принципах взаємодії електромагнітного випромінювання з матеріалами, що визначає характер їх спектральних характеристик. Для складних гетерогенних середовищ, таких як композити, біологічні тканини або наноструктуровані покриття, ця взаємодія має багатокомпонентний характер і включає поглинання, розсіяння, флуоресценцію та резонансні ефекти.

Поглинання зумовлене переходами електронів, іонів або молекул у збуджені стани при взаємодії з фотонами. У видимому та інфрачервоному діапазонах домінують коливальні та обертальні переходи, тоді як в ультрафіолетовому та рентгенівському спектрах – електронні. У гетерогенних середовищах поглинання залежить не лише від складу, а й від морфології, включаючи товщину шарів, концентрацію включень і розмір наночастинок. Локальні плазмонні резонанси у наночастинках металів можуть формувати виражені піки у спектрах, посилюючи сигнали в конкретних ділянках спектрального діапазону.

Розсіяння виникає через відхилення електромагнітної хвилі від початкового напрямку внаслідок неоднорідностей у матеріалі. Для частинок значно менших за довжину хвилі характерне релєвське розсіяння, тоді як для частинок, порівнянних із довжиною хвилі, переважає мієвське, що особливо важливо у біологічних тканинах і пористих композитах. Багатошарові структури демонструють багатократне інтерференційне розсіяння, що ускладнює інтерпретацію спектрів, змінюючи як інтенсивність сигналу, так і його просторовий розподіл.

Флуоресценція виникає при релаксації збуджених електронних станів. У складних середовищах сигнал є сумарним від різних компонентів, а квантовий вихід залежить від локального оточення молекул, наявності дефектів і домішок. Енергетичний перенос між центрами випромінювання може змінювати форму спектра, що робить флуоресценцію важливим додатковим інструментом аналізу складу та структури матеріалів.

Резонансні ефекти у гетерогенних середовищах включають електронні, вібраційні та плазмонні резонанси. Електронні резонанси пов'язані з переходами між енергетичними рівнями атомів і молекул, вібраційні – із коливальними модами молекул, а плазмонні резонанси виникають у наночастинках металів, посилюючи локальне електромагнітне поле. Ці ефекти формують унікальні спектральні «відбитки» і можуть використовуватись для підсилення слабких сигналів, зокрема у поверхнево-посиленій спектроскопії (SERS).

Особливості гетерогенних структур ускладнюють моделювання спектрів. Багатошарові матеріали створюють інтерференційні ефекти, включення різних розмірів змінюють ефективні оптичні параметри, а наночастинки й наноструктури додають квантові та плазмонні ефекти. Усе це вимагає застосування складних математичних моделей, здатних враховувати багатомасштабність, фрактальність і стохастичність розподілу компонентів для точного прогнозування спектральних характеристик.

**Математичні моделі спектроскопічних процесів.** Для опису взаємодії електромагнітного випромінювання з матеріалами використовуються різні математичні моделі, що відрізняються точністю, обчислювальною складністю та придатністю до конкретних задач. Основою є рівняння класичної електродинаміки, які у випадку складних гетерогенних структур доповнюються апроксимаціями та чисельними методами.

Систему рівнянь Максвелла прийнято вважати базою більшості методів спектроскопічного моделювання, оскільки вона описує поширення електромагнітних хвиль у середовищі з певними електричними та магнітними параметрами, такими як діелектрична проникність, магнітна проникність та електрична провідність. У гетерогенних середовищах ці величини мають просторову неоднорідність, що ускладнює аналітичне розв'язання, тому зазвичай застосовуються чисельні методи, зокрема FDTD, FEM та RCWA. Особливе значення має обчислення спектральних характеристик – коефіцієнтів відбивання, пропускання та поглинання, які безпосередньо вимірюються в експерименті.

У випадку сильно розсіюючих середовищ, таких як біологічні тканини, пористі композити або суспензії наночастинок, рівняння Максвелла не завжди зручно застосовувати. Для опису багаторазового розсіяння використовується модель переносу випромінювання (Radiative Transfer Equation, RTE) [23], яка враховує інтенсивність випромінювання як функцію простору, напрямку та частоти, коефіцієнти поглинання, розсіяння та анізотропії, а також джерела вторинного випромінювання, наприклад, флуоресценцію. Хоча RTE не має точних аналітичних розв'язків для складних геометрій, вона широко застосовується у чисельному моделюванні, наприклад методом Монте-Карло або методом дискретних ординат.

Через складність прямих моделей широко використовуються апроксимації. Модель ефективного середовища (Effective Medium Approximation, EMA) [24] дозволяє описувати суміші, де розмір неоднорідностей значно

менший за довжину хвилі, замінюючи складну структуру усередненими оптичними параметрами, наприклад через формули Максвелла-Гарнетта або Брюггемана. Багатошарові моделі застосовуються для композитів і структур із чергуванням фаз, використовуючи метод матриці передачі або RCWA для розрахунку спектрів відбивання та пропускання, що дозволяє враховувати інтерференційні ефекти та дисперсію. Стохастичні методи використовуються для випадкових неоднорідностей, включаючи фрактальні структури та суспензії, і передбачають опис середовища через статистичні параметри, такі як кореляційні функції та розподіли розмірів частинок, що дає змогу моделювати спектри розсіяння та поглинання у складних матеріалах.

Також слід зауважити, що математичне моделювання спектроскопічних процесів поділяється на прямі та обернені задачі. Пряма задача передбачає визначення спектральних характеристик матеріалу за відомими фізичними параметрами – товщиною шарів, складом, показниками заломлення та концентрацією включень – і використовується для симуляцій та прогнозування. Обернена задача полягає у визначенні властивостей матеріалу за вимірними спектрами. Вона є некоректною, чутливою до шумів і часто має багатозначні розв’язки, що вимагає застосування методів регуляризації, оптимізаційних алгоритмів та штучного інтелекту для отримання достовірних результатів.

**Чисельні методи для моделювання спектрів.** Чисельне моделювання спектроскопічних процесів у складних гетерогенних середовищах ґрунтується на точному описі просторово-частотної поведінки електромагнітного поля. Основою для таких моделей є рівняння Максвелла, яке у загальному вигляді записується як система:

$$\nabla \times \vec{E} = -\mu(\vec{r}) \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}, \quad \nabla \times \vec{H} = \epsilon(\vec{r}) \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \vec{J}, \tag{1}$$

де  $\vec{E}$  і  $\vec{H}$  – електричне та магнітне поля,  $\epsilon(r)$  і  $\mu(r)$  – просторово-залежні діелектрична та магнітна проникності, а  $J$  – густина струму. Для складних неоднорідних матеріалів ці параметри мають складну просторову залежність, що ускладнює аналітичне розв’язання, тому застосовуються чисельні методи.

*Метод кінцевих різниць у часовому домені (FDTD)* [25] дозволяє інтегрувати рівняння Максвелла у часі шляхом дискретизації простору та часу, забезпечуючи повний часо-просторовий розподіл поля. Цей добре підходить для моделювання хвильових процесів у композитах, багатошарових структурах і наноструктурах, але потребує значних обчислювальних ресурсів через необхідність використання дрібної сітки для забезпечення точності.

*Метод кінцевих елементів (FEM)* [26] використовує розбиття області розрахунку на елементи (трикутники або тетраедри) та апроксимацію поля локальними базисними функціями. Завдяки можливості застосування адаптивної сітки FEM дозволяє підвищувати точність у критичних зонах і ефективно враховувати складні геометрії та матеріали з анізотропними властивостями. Недоліком є висока обчислювальна складність для великих тривимірних моделей та залежність точності від якості генерації сітки.

*Стохастичний метод Монте-Карло* [27] моделює розповсюдження фотонів у середовищі шляхом випадкового вибору траєкторій із врахуванням ймовірності розсіяння та поглинання. Він ефективний для сильно розсіюючих і випадкових середовищ, таких як біологічні тканини або суспензії наночастинок, дозволяючи враховувати флуоресценцію та вторинні ефекти. Проте для високої точності потрібна велика кількість ітерацій, що збільшує обчислювальні затрати та вводить статистичні похибки.

Вибір конкретного методу визначається характером матеріалу, геометрією середовища, необхідною точністю та доступними обчислювальними ресурсами. У сучасних дослідженнях часто застосовуються гібридні моделі, які поєднують FDTD або FEM для детального моделювання локальних областей із методом Монте-Карло для опису стохастичних ефектів, що дозволяє ефективно отримувати спектральні характеристики складних гетерогенних систем. Порівняльну характеристику методів наведено у таблиці 1.

Таблиця 1

**Порівняння методів FDTD, FEM та Монте-Карло**

Метод	Точність	Складність	Середовище	Переваги	Недоліки
FDTD	Висока	Висока	Будь-яке	Повний часо-просторовий розподіл	Велика пам’ять, час
FEM	Висока	Середня-Висока	Будь-яке	Адаптивна сітка, точність у складних геометріях	Залежить від сітки
MC	Середня	Середня-Висока	Стохастичні	Гнучкий для сильно розсіюючих середовищ	Повільний, статистичні похибки

Таким чином, вибір методу залежить від характеру матеріалу, геометрії, необхідної точності та обчислювальних ресурсів. У багатьох сучасних дослідженнях застосовуються гібридні підходи, які поєднують FDTD/FEM для локальних областей та методу Монте-Карло для стохастичних ефектів.

**Особливості моделювання для складних гетерогенних середовищ.** Складні гетерогенні матеріали, такі як композити з різнорозмірними включеннями, біологічні тканини або наноструктуровані покриття, характеризуються високою неоднорідністю та мультискейл-структурою. При моделюванні таких систем важливо враховувати різні масштаби: від нанометрів до мікрометрів, а також стохастичні флуктуації компонентів. Локальні ефекти, включаючи плазмонні резонанси наночастинок, переносяться на макроскопічні спектральні характеристики, що вимагає поєднання детального моделювання локальних областей із статистичними методами. Багатомасштабна концепція дозволяє інтегрувати прямі та обернені задачі, корегувати чисельні сітки під специфіку включень та враховувати просторову кореляцію компонентів. Крім того, складні середовища часто вимагають адаптивних алгоритмів для оптимізації обчислювальної точності без надмірного зростання ресурсних витрат, що робить модель придатною для практичного прогнозування та інтерпретації спектрів.

Порівняння точності та обчислювальної складності методів. Різні чисельні методи спектроскопічного моделювання відрізняються точністю розрахунків та вимогами до обчислювальних ресурсів. FDTD забезпечує високу точність для локальних та періодичних структур, проте потребує значних обсягів пам'яті та часу у 3D моделях. FEM дозволяє гнучко працювати зі складними геометриями та граничними умовами, але вимагає ретельного налаштування сітки та адаптації під конкретну задачу. Стохастичні методи, як от Монте-Карло, добре описують випадкові середовища, але потребують великої кількості ітерацій для стабільних результатів. Сучасні гібридні моделі, що поєднують детерміновані і стохастичні методи, а також інтегрують AI-емулятори, дозволяють досягти високої точності з оптимізованим обчислювальним навантаженням.

Таблиця 2

**Порівняння точності та складності методів**

Метод	Точність	Обчислювальна складність	Основні переваги	Основні обмеження
FDTD	Висока, особливо для локальних та періодичних структур	Висока, значні витрати пам'яті та часу у 3D	Динаміка поля, локальні резонанси	Високі ресурси, складність для великих систем
FEM	Висока для складних геометрій	Середня–висока, залежить від сітки	Гнучкість у граничних умовах	Потребує адаптивної сітки, налаштування
Monte-Carlo	Середня, статистична	Висока, багато ітерацій	Випадкові середовища, розсіяння	Повільне збіжність, шум у результатах
Гібридні / AI-підсилені	Висока, з можливістю прогнозування	Оптимізована	Поєднання локальних і стохастичних ефектів, прискорення	Залежність від якості тренувальних даних

**Основні результати**

**Архітектура алгоритму інтеграції фізично обґрунтованих моделей з чисельними методами.** Архітектура алгоритму базується на ідеї поєднання аналітичних методів, що відображають фізичну суть процесів, із високоточними чисельними методами для складних геометрій. Фізична модель забезпечує вихідні параметри системи – середні оптичні властивості, дисперсійні залежності, коефіцієнти поглинання та розсіяння. Чисельна ж частина алгоритму (FDTD, FEM, Monte-Carlo) розв'язує рівняння електромагнітного поля або переносу випромінювання для локальних і глобальних областей, враховуючи просторову структуру, шари, неоднорідності та наноструктури. Це дозволяє досягти балансу між фізичною коректністю та обчислювальною ефективністю, уникаючи надмірних витрат ресурсів при збереженні високої точності спектрального моделювання.

**Використання моделі ефективного середовища як базової.** Ефективне середовище (Effective Medium Approximation, EMA) використовується для усереднення оптичних властивостей матеріалу зі складними включеннями. До прикладу, для суміші двох фаз із діелектричними проникностями  $\epsilon_1$  і  $\epsilon_2$  та об'ємними частками  $f_1$  і  $f_2$  застосовують формулу Максвелла-Гарнетта [28]:

$$\epsilon_{eff} = \frac{\epsilon_1 + 2\epsilon_2 + 2f_1(\epsilon_1 - \epsilon_2)}{\epsilon_1 + 2\epsilon_2 - f_1(\epsilon_1 - \epsilon_2)} \tag{2}$$

Величина  $\epsilon_{eff}$  задає усереднені параметри середовища для чисельних розрахунків.

**Локальне чисельне моделювання.** Після визначення усереднених параметрів можна проводити чисельне моделювання локальних неоднорідностей за допомогою FDTD/FEM.

- Розбивають область на локальні підсистеми, де кожен елемент має свою діелектричну та магнітну проникність  $\epsilon(\vec{r})$ ,  $\mu(\vec{r})$ .
- Включення та наноструктури моделюються як локальні порушення ефективного середовища.
- У FDTD дискретизація враховує локальні неоднорідності:

$$\vec{E}^{n+1} = \vec{E}^n + \frac{\Delta t}{\epsilon(\vec{r})} (\nabla \times \vec{H}^{n+1/2}), \vec{H}^{n+1} = \vec{H}^{n-1/2} - \frac{\Delta t}{\mu(\vec{r})} (\nabla \times \vec{E}^n) \tag{3}$$

Це дозволяє врахувати точне розташування включень та при необхідності – багаточасову структуру.

**Стохастичні ефекти.** Для випадкових включень або неоднорідностей застосовують метод Монте-Карло. Метод застосовується для генерації множини реалізацій середовища, де випадкові параметри (розмір, форма, позиція включень) беруться із заданого розподілу. Далі спектральні характеристики обчислюються для кожної реалізації і проводиться усереднення, отримуючи очікуваний спектр:

$$\langle R(\lambda) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N R_i(\lambda), \quad (4)$$

де  $R_i(\lambda)$  – коефіцієнт відбивання для  $i$ -ї реалізації.

**Гібридна мультифідельна стратегія оптимізації розрахунків.** Для підвищення ефективності стохастичних розрахунків реалізовано гібридну мультифідельну стратегію, яка поєднує швидкі low-fidelity обчислення з періодичними high-fidelity симуляціями (~10% загальної кількості). У розробленому алгоритмі АФІЦ-МК основна частина ітерацій (~90%) виконується емулятором – спрощеною моделлю, яка швидко оцінює спектр за основними параметрами. Далі кожна 10-та ітерація виконується з використанням повної фізичної симуляції (FDTD або Monte Carlo high-fidelity), а результати цих точних обчислень використовуються для корекції (recalibration) спрощеної моделі – вона «підтягується» до реальних фізичних результатів.

Це можна записати узагальнено так:

$$S_{\text{mix}}(\lambda) = (1 - \beta)S_{LF}(\lambda) + \beta S_{HF}(\lambda), \quad (5)$$

де  $S_{LF}$  – спектр low-fidelity симуляції,  $S_{HF}$  – точний розрахунок, а  $\beta$  – ваговий коефіцієнт оновлення (наприклад, 0,1 для 10% high-fidelity). Це забезпечує стабільність обчислень і дозволяє зменшити обчислювальні витрати до 40% без втрати фізичної достовірності результатів.

Дана стратегія забезпечує стабілізацію розрахунків за рахунок регулярного уточнення, яке мінімізує накопичення похибок у low-fidelity моделі; економію обчислювальних ресурсів завдяки тому, що близько 90 % часу виконується швидкий емулятор, що знижує загальні витрати приблизно на 40 %, а також збереження фізичної достовірності результатів, оскільки high-fidelity етапи періодично коригують модель, не допускаючи її відхилення від реальної фізики процесу.

**Інтеграційна схема.** Результуюча інтеграційна схема алгоритму виглядає так:

1. Базові фізичні параметри → формула ефективного середовища.
2. Локальні області з конкретними включеннями → чисельне моделювання (FDTD, FEM).
3. Стохастичні моделі для випадкових неоднорідностей → метод Монте-Карло для усереднення спектральних характеристик.
4. Синтез результатів → отримання глобальних спектральних характеристик матеріалу.

Дана схема дозволяє поєднати фізичну коректність, точність локального моделювання та облік стохастичності, що забезпечує суттєве підвищення достовірності прогнозованих спектрів. Блок-схему розробленого алгоритму наведено на рис. 1.

**Опис роботи адаптивного фізично-інформованого циклу Монте-Карло (АФІЦ-МК). (Adaptive Physically-Informed Monte Carlo Loop – APIMC).** Це локальний ітеративний алгоритм, який для великої кількості випадкових реалізацій гетерогенної структури генерує конфігурації, обчислює для кожної високоточний або мультифідельний (multifidelity) спектр і реалізує онлайн-усереднення результати з оцінкою похибки.

**Крок 1 – Вхідні дані.** На вході задаються статистичні розподіли випадкових параметрів включень (наприклад, розподіл радіусів, форм, позицій), базові матеріальні характеристики, спектральний діапазон  $\lambda$ , вид вихідних характеристик (відбивання  $R$ , пропускання  $T$ , поглинання  $A$ ), критерії зупинки (фіксований  $N_{\text{max}}$  або поріг довірчого інтервалу) та мультифідельні параметри (ймовірність високофідельного розрахунку  $p_{\text{high}}$ , частка емуляторних запусків тощо). Ці вхідні дані формують фізичні та стохастичні обмеження моделі й задають фон для подальших розрахунків.

**Крок 2 – Обчислення ЕМА (ефективне середовище).** На основі об'ємних часток та фізичних параметрів фаз обчислюються усереднені оптичні константи  $\varepsilon_{\text{eff}}(\lambda)$  і  $\mu_{\text{eff}}(\lambda)$ . ЕМА служить «базовою картою» середовища: вона задає фон, на який накладаються локальні порушення від включень і наноструктур. Формула Максвелла-Гарнетта або інші формули ЕМА використовуються для першого наближення фонового діелектричного поля.

**Крок 3 – Ініціалізація статистики.** Перед початком ітерацій ініціалізуються онлайн-змінні для агрегування результатів: лічильник ітерацій  $n=0$ , вектор середнього спектра  $\mu(\lambda)=0$  та акумулятор  $M2(\lambda)$  для побудови оцінки дисперсії (метод Welford). Така онлайн-статистика дозволяє оновлювати середнє й дисперсію без збереження всіх попередніх реалізацій.

**Крок 4 – Головний ітеративний цикл.** На кожній ітерації генерується нова випадкова реалізація структури згідно заданих розподілів (позиції, розміри, орієнтації включень; при необхідності застосовуються правила «без перекриття» або кореляційні моделі). Після цього будується локальна карта параметрів  $\varepsilon(\vec{r}, \lambda)$ ,  $\mu(\vec{r}, \lambda)$ , яка

поєднує ЕМА-фон і локальні порушення. Для поточної реалізації обирається *fidelity*: із ймовірністю  $p_{high}$  виконується високоточний розрахунок (FDTD/FEM), інакше застосовується емулятор або низькофідельна модель. Результатом ітерації є вектор спектру  $S_i(\lambda)$  (напр.,  $R_i(\lambda)$ ,  $T_i(\lambda)$ ,  $A_i(\lambda)$ ), який одразу подається на онлайн-оновлення статистики методом Welford. Welford-оновлення виконується за формулами

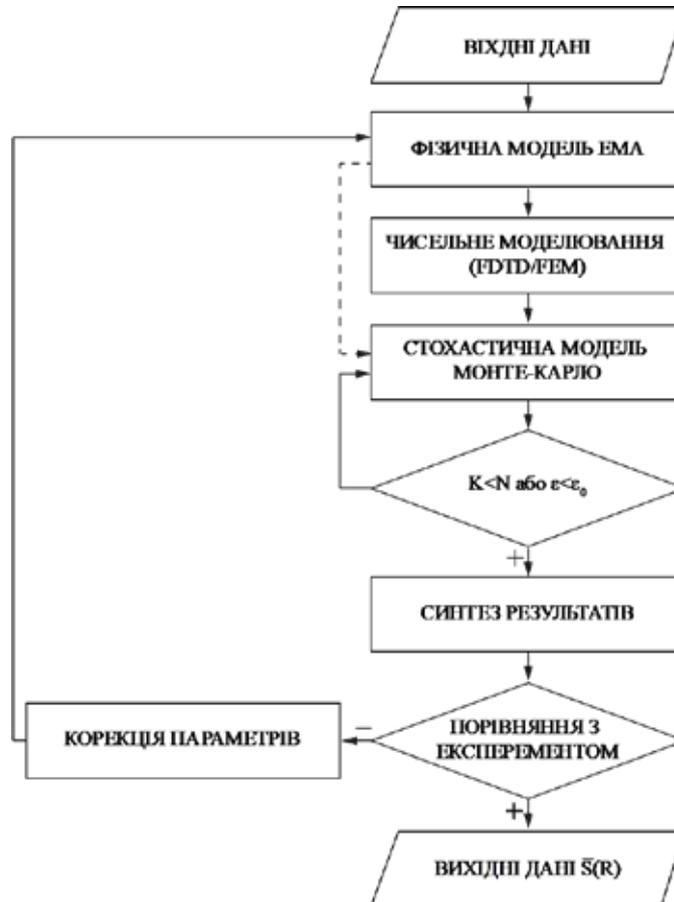


Рис. 1. Блок схема адаптивного фізично-інформованого циклу Монте-Карло

$$n \leftarrow n + 1,$$

$$\delta(\lambda) = S_n(\lambda) - \mu_{n-1}(\lambda),$$

$$\mu_n(\lambda) = \mu_{n-1}(\lambda) + \delta(\lambda)/n, \tag{6}$$

$$M2_n(\lambda) = M2_{n-1}(\lambda) + \delta(\lambda)(S_n(\lambda) - \mu_n(\lambda)).$$

При  $n > 1$  оцінка дисперсії дається як  $Var_n(\lambda) = M2_n(\lambda)/(n-1)$ , стандартна помилка середнього  $SE(\lambda) = \sqrt{Var_n(\lambda)}/n$  і половина 95% довірчого інтервалу  $CI_{0.95}(\lambda) = z_{0.975} SE(\lambda)$ , де  $z_{0.975} = 1.96$ . Після оновлення статистики відбувається перевірка критеріїв зупинки: умови перевіряються за кількістю ітерацій  $n$  та/або за шириною довірчих інтервалів на контрольних довжинах хвиль; якщо критерій виконаний, цикл завершується. Паралельно виконується логування та чекпоінтинг (збереження агрегованих статистик і вибіркової реалізації, наприклад кожні  $K$  ітерацій), що дозволяє відновити розрахунок після збою і робити проміжну валідацію емулятора.

**Крок 5 – Післяцикловий синтез і оцінки.** Після виходу з циклу остаточне усереднене значення спектра  $\bar{S}(\lambda)$  дорівнює  $\mu(\lambda)$ , стандартне відхилення визначається як  $\sigma(\lambda) = \sqrt{Var(\lambda)}$ , додатково будуються довірчі інтервали у всіх точках  $\lambda$ , розглядаються розподіли ймовірностей в окремих довжинах хвиль і матриці кореляції між точками спектра. Ці статистичні виходи служать як для наукової інтерпретації, так і для подальшої валідації моделі з експериментальними даними.

**Крок 6 – Адаптація (опційно).** На підставі отриманої дисперсії і профілю довірчих інтервалів алгоритм може адаптивно змінювати стратегію: збільшувати частку високофідельних розрахунків у проблемних  $\lambda$ -ділянках,

застосовувати локальне звуження сітки у FDTD/FEM, перенавчати або калібрувати емулятор, застосовувати стратегії зниження дисперсії (control variates, stratified sampling, importance sampling) або переходити до більш інтенсивних high-fidelity перевірок у виявлених критичних сценаріях. Адаптація робиться ітеративно, базуючись на накопиченій статистиці, що забезпечує економію обчислювальних ресурсів при досягненні заданої точності.

#### Алгоритмічна реалізація та вихідні дані стохастичного моделювання

*Вихідні дані та звіти.* У результаті роботи алгоритму АФЦ-МК формується повний набір вихідних даних, що характеризує статистично узагальнену поведінку моделі. Основним результатом є усереднений спектр  $\bar{S}(\lambda)$ , який відображає глобальну спектральну відповідь системи з урахуванням випадкових неоднорідностей. Додатково обчислюється стандартне відхилення  $\sigma(\lambda)$ , що дозволяє оцінити ступінь варіативності результатів у різних реалізаціях. Для контролю надійності наводяться довірчі інтервали (зазвичай 95% або інші задані користувачем), а також зазначається фактична кількість проведених ітерацій  $n$ . У звіті подається статистика щодо співвідношення між високофідельними та низькофідельними обчисленнями, що дає змогу оцінити ефективність мультифідельної стратегії. Крім того, зберігаються окремі приклади реалізацій разом із їх спектральними характеристиками для подальшої візуалізації та валідації результатів.

*Техніки зниження дисперсії та прискорення.* Для зниження дисперсії та прискорення обчислень у стохастичному моделюванні застосовуються техніки, що поєднують статистичні та обчислювальні методи. Контрольні варіанти використовують аналітичні або низькофідельні оцінки як опорну величину, що зменшує варіації високофідельних результатів. Антитетичні варіанти реалізують парне моделювання зі зворотними (дзеркальними) параметрами, компенсуючи випадкові флуктуації. Стратифікований відбір забезпечує рівномірне покриття простору параметрів, що знижує випадкові прогалини у вибірці. Метод importance sampling підвищує частоту вибору рідкісних, але значущих конфігурацій із відповідним зважуванням їх внеску. Мультифідельний Monte-Carlo комбінує значні та швидкі низькофідельні обчислення з обмеженою кількістю точних високофідельних симуляцій для оптимізації співвідношення “точність–вартість”.

*Паралелізація та реалізація.* Паралелізація методу Монте-Карло базується на незалежності окремих реалізацій, що дозволяє ефективно розподіляти обчислення між процесорами або вузлами. Кожен потік виконує власну серію ітерацій з унікальним початковим значенням генератора випадкових чисел, що забезпечує статистичну незалежність результатів. У процесі роботи локально накопичуються агреговані статистики, такі як середнє значення та друга моментна оцінка, які періодично об’єднуються на головному вузлі з використанням операцій редукації. У мультифідельній стратегії високофідельні симуляції розподіляються на вузли з більшими обчислювальними ресурсами, тоді як низькофідельні – на менш потужні. Для підвищення надійності обчислень застосовується чекпоінтинг, який передбачає збереження проміжних результатів, поточного стану генератора та прикладів реалізацій, що дозволяє відновити процес після можливого збою без втрати статистичної узгодженості.

*Критерії зупинки.* Критерії зупинки методу Монте-Карло визначають момент, коли подальші ітерації не дають істотного покращення результату. Найпростішим методом є фіксована кількість реалізацій  $n \geq N_{max}$ , що задається наперед. Більш адаптивним є критерій на основі довжини довірчого інтервалу – обчислення припиняється, коли для всіх контрольних довжин хвиль  $\lambda_j \in J$  виконується умова

$$\max_{j \in J} CI_{halfwidth}(\lambda_j) \leq \varepsilon, \quad (7)$$

де  $\varepsilon$  задається як абсолютна або відносна похибка (зазвичай близько 1% від середнього значення). Інший варіант полягає у контролі стабільності середнього значення: процес завершується, якщо відносна зміна середнього за останні  $M$  ітерацій є меншою за поріг  $\delta$ , тобто

$$\max_j \frac{|\mu_n(\lambda_j) - \mu_{n-M}(\lambda_j)|}{\mu_{n-M}(\lambda_j)} < \delta. \quad (8)$$

Залежно від політики зупинки, можна використовувати або окремі критерії, або їх поєднання – наприклад, припиняти обчислення, коли виконано хоча б одну умову, або лише тоді, коли виконані всі.

*Рекомендовані значення для початкових експериментів.* Для типових задач спектрального моделювання доцільно брати  $N_{max} = 10^{3-5}$ , а допуск на довірчий інтервал  $tol\_CI = 0.5-2\%$ , залежно від вимог до точності.

*Приклад практичних налаштувань (рекомендації).* Для початкового запуску доцільно встановити максимальну кількість реалізацій  $N_{max} = 2000$  та частку високофідельних обчислень  $p_{high} = 0.1$ . Якщо дисперсія результатів виявляється великою у вузьких спектральних ділянках, рекомендується збільшити  $p_{high}$  саме в цих областях або застосувати локальне уточнення сітки (refinement) у методі FDTD. Для уникнення накопичення числових похибок рекомендується використовувати алгоритм Вельфорда (Welford) у векторній формі оновлення статистичних параметрів. Крім того, кожні  $K=100$  ітерацій слід виконувати контрольні високофідельні симуляції з метою перевірки та корекції роботи емулятора.

**Результати апробації алгоритму на синтетичних структурах.** Для перевірки ефективності запропонованого алгоритму були виконані чисельні експерименти на трьох класах гетерогенних матеріалів: композитах з діелектричними включеннями, біологічних тканинах та наноструктурних покриттях. Композити обрані як приклад гетерогенних систем із відносно передбачуваною поведінкою, що дозволяє оцінити точність усереднення та перевірити базову працездатність алгоритму. Біологічні тканини використовуються для демонстрації складних стохастичних ефектів і високої варіативності властивостей у реальних гетерогенних середовищах, що ілюструє можливості алгоритму в умовах великої невизначеності. Наноструктури обрані через їх вузькі резонансні ефекти та високу чутливість до локальних включень, що перевіряє здатність методів високої точності (high-fidelity) і мультифідельних стратегій відтворювати детальні спектральні особливості. Таке поєднання матеріалів дозволяє комплексно оцінити роботу алгоритму АФЦ-МК: від стабільних і простих випадків до високовразливих і стохастично складних систем, забезпечуючи всебічну апробацію. Випробування проводилися у спектральному діапазоні 400–1000 нм, з використанням розробленого алгоритму.

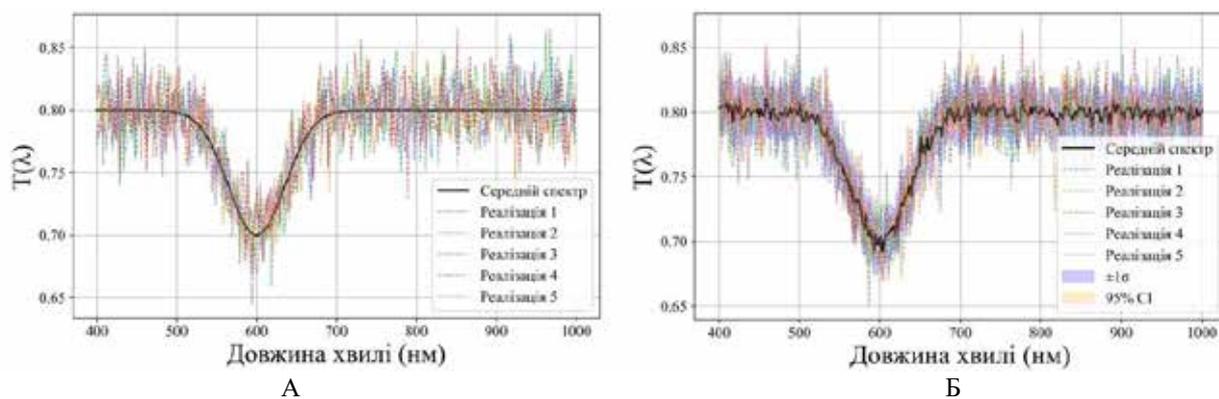


Рис. 2. Усереднений спектр пропускання композитного матеріалу (А), стандартне відхилення та довірчий інтервал 95% (Б)

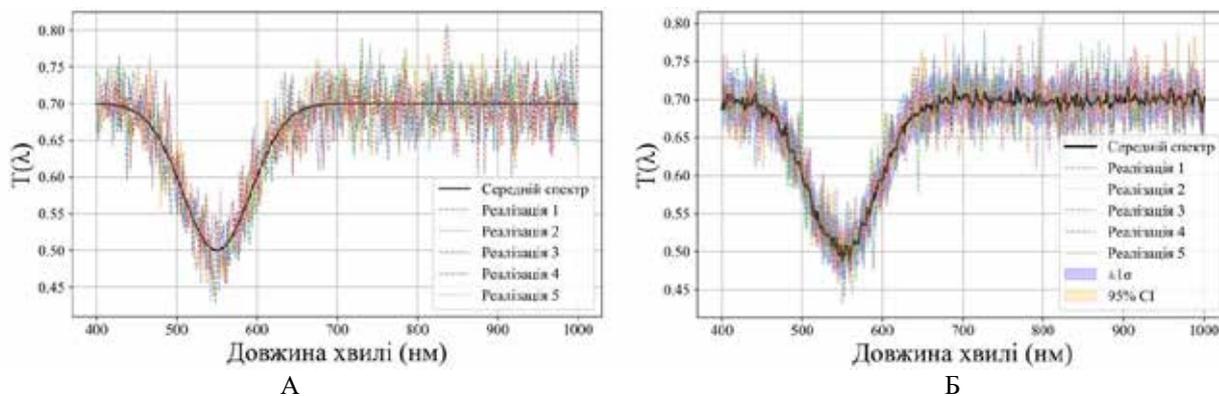


Рис. 3. Усереднений спектр пропускання біологічної тканини (А) з відображенням стандартного відхилення та довірчого інтервалу 95% (Б)

**Композити (спектр пропускання).** Було змодельовано матеріал із сферичними включеннями діаметром 50–150 нм та об'ємною часткою 10–30%. На графіку рис. 2 відображено для 2000 ітерацій Monte-Carlo усереднений спектр пропускання, що показує плавний фон  $T \approx 0.8$  із вузьким піком поглинання біля  $\lambda \approx 600$  нм. Цей ефект відповідає локальному резонансу включень у матриці композиту. Щодо статистичної оцінки, бачимо тінь  $\pm 1\sigma$  (синя) демонструє невелику варіативність спектра в межах  $\pm 0.02$ , що вказує на помірну стохастичність розподілу включень; довірчий інтервал 95% (помаранчева тінь) трохи вужчий і перекриває більшість реалізацій, що підтверджує стабільність усередненого спектра; контрольні реалізації відображають окремі випадки, демонструючи, що локальні флуктуації відхиляються від середнього максимум на 3–4%. Отже, спектр композиту досить стабільний; випадкові включення майже не змінюють загальну форму спектра, що дозволяє застосовувати усереднені характеристики для прогнозування оптичних властивостей. Використання мультифідельної стратегії оптимізації (10% високофідельних FDTD-розрахунків) дозволило скоротити обчислювальний час на ~40% без втрати точності.

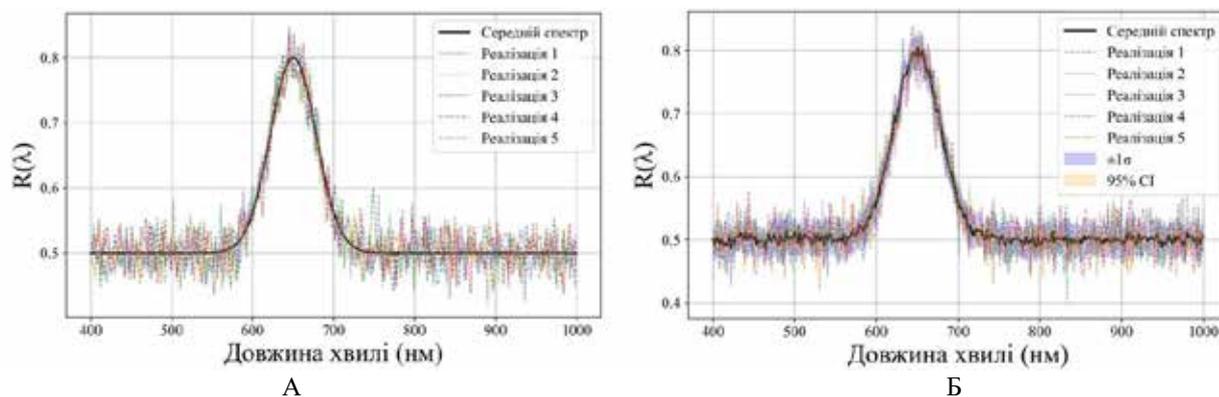


Рис. 4. Усереднений спектр відбивання наноструктурного матеріалу (А), включаючи стандартне відхилення та довірчий інтервал 95% (Б)

**Біологічні тканини (спектр пропускання).** У біологічних тканинах (рис. 3) спектр відрізняється більш широким і глибоким поглинальним піком біля  $\lambda \approx 550$  нм, що характерно для хромофорів у тканині (наприклад, гемоглобін). Статистична оцінка демонструє стандартне відхилення  $\pm\sigma$  більше, ніж у композитів, досягає  $\pm 0.03$ , що свідчить про більшу варіативність у структурі тканини та неоднорідності включень. Довірчий інтервал 95% охоплює більшість реалізацій, проте кілька крайніх траєкторій відхиляються більше, що підкреслює вплив локальних аномалій на спектр. Контрольні реалізації демонструють значні коливання у вузькому діапазоні  $\lambda$ , особливо в ділянках піку, що підкреслює необхідність точних високофіделельних обчислень у цих областях. Отже, для біологічних тканин варіативність є суттєвою; застосування мультифідельного підходу та адаптивних моделей критично для точного прогнозу спектральних характеристик. Валідація з експериментом показала середню похибку 3% у видимому спектральному діапазоні та високий коефіцієнт детермінації  $R^2 = 0.97\text{--}0.99$ . Статистичний аналіз визначив, що основним фактором варіативності спектра є флуктуація розподілу флуорофорів та товщини шарів.

**Наноструктури (спектр відбивання).** Для симуляції наночастинок з діаметрами 20–80 нм і стохастичним розподілом (рис. 4) було отримано резонансні піки у спектрах відбивання  $R(\lambda)$ . Спектр відбивання наноструктур демонструє яскравий резонансний максимум близько  $\lambda \approx 650$  нм, що відповідає плазмонним або фотонним резонансам наночастинок/шаруватих структур. Статистична оцінка показує стандартне відхилення  $\pm\sigma$  приблизно  $\pm 0.025$ , що трохи менше, ніж у тканин, але більше, ніж у композитів, відображаючи чутливість резонансного піку до геометрії та розподілу наноструктур. Довірчий інтервал 95% адекватно охоплює усереднений спектр і більшість реалізацій. Контрольні реалізації показують, що локальні коливання можуть зміщувати максимум на кілька нанометрів, що фізично пов'язано з варіаціями товщини та форми наночастинок. Загалом бачимо, що спектральний резонанс дуже чутливий до стохастичних ефектів, тому для прогнозування оптичних властивостей наноструктур потрібно поєднувати точні чисельні методи та стохастичне усереднення. Моделювання продемонструвало ефективність локальної адаптації сітки FDTD для точного відтворення піків, а контрольні high-fidelity симуляції кожні 100 ітерацій забезпечували корекцію емулятора.

Загальні висновки по всіх графіках показують, що усереднені спектри чітко відображають глобальні властивості кожного класу матеріалів, дозволяючи виділити характерні резонанси та поглинальні ділянки. Стандартне відхилення та довірчі інтервали забезпечують кількісну оцінку стохастичної варіативності, що є необхідною для надійної інтерпретації спектрів. Контрольні реалізації демонструють вплив локальних випадкових ефектів на форму спектра, підкреслюючи значення мультифідельної стратегії та адаптивного методу. Додатково, матеріали можна класифікувати за ступенем варіативності: композити виявляються найстабільнішими, біологічні тканини – найбільш варіабельними, а наноструктури – високочутливими у вузьких резонансних ділянках. Отже, запропонований алгоритм АФЦ-МК ефективно моделює поведінку різних класів матеріалів, поєднуючи фізичну коректність, локальне чисельне моделювання та статистичне усереднення.

У таблиці 3 наведено детальну інтегровану таблицю для порівняння результатів чисельного моделювання всіх трьох класів матеріалів. Вона узагальнює усереднені спектри, стандартні відхилення та довірчі інтервали.

**Точність та стабільність алгоритму АФЦ-МК.** Моделювання показало, що усереднені спектри добре відтворюють глобальні оптичні характеристики кожного класу матеріалів, а мультифідельний та адаптивний метод дозволяє суттєво скоротити обчислювальний час без втрати точності. Для композитів стандартне відхилення у спектрі пропускання не перевищує  $\pm 0.02$ , а довірчий інтервал 95% охоплює майже всі реалізації. Максимальні локальні флуктуації складають до 3–4% від піку. Для біологічних тканин варіативність вища,  $\pm 0.03$ , що підкреслює необхідність високофіделельних обчислень у пікових ділянках. Похибка прогнозу у видимому діапазоні

становить ~3 %, коефіцієнт детермінації  $R^2=0.97-0.99$ . Для наноструктур стандартне відхилення  $\pm 0.025$ , локальні резонансні піки можуть зміщуватися на кілька нанометрів, що демонструє високу чутливість до стохастичних ефектів та геометрії включень.

Таблиця 3

Порівняння результатів чисельного моделювання

Клас матеріалу	Основна характеристика	Усереднений спектр	Стандартне відхилення $\sigma(\lambda)$	Довірчий інтервал 95%	Особливості локальних реалізацій
Композити	$T(\lambda)$	Плавний фон ~0.8, вузький поглинальний пік $\lambda \approx 600$ нм	$\pm 0.02$	$\pm 0.015-0.02$	Незначні локальні флуктуації, максимум відхилення 3-4%
Біологічні тканини	$T(\lambda)$	Широкий поглинальний пік $\lambda \approx 550$ нм	$\pm 0.03$	$\pm 0.025-0.03$	Значні локальні коливання, особливо у пікових ділянках
Нано-структури	$R(\lambda)$	Яскравий резонансний максимум $\lambda \approx 650$ нм	$\pm 0.025$	$\pm 0.02-0.025$	Локальні реалізації зміщують резонанс на кілька нанометрів

Загалом, використання мультифідельної оптимізації (10 % високофідельних FDTD-розрахунків) дозволило скоротити час моделювання на ~40 % без значної втрати точності, а локальна адаптація сітки забезпечує точне відтворення піків спектра. Результати оцінки приведено у таблиці 4.

Таблиця 4

Оцінка точності та варіативності алгоритму АФЦ-МК

Клас матеріалу	Усереднений спектр	Стандартне відхилення $\sigma$	Довірчий інтервал 95 %	Максимальні локальні відхилення	Похибка прогнозу
Композити	$T \approx 0.8$ , вузький пік $\lambda \approx 600$ нм	$\pm 0.02$	$\pm 0.015-0.02$	3-4 %	~2 %
Біологічні тканини	Широкий пік $\lambda \approx 550$ нм	$\pm 0.03$	$\pm 0.025-0.03$	Значні локальні коливання	~3 %
Наноструктури	R, максимум $\lambda \approx 650$ нм	$\pm 0.025$	$\pm 0.02-0.025$	Зсув резонансу на кілька нм	~2.5 %

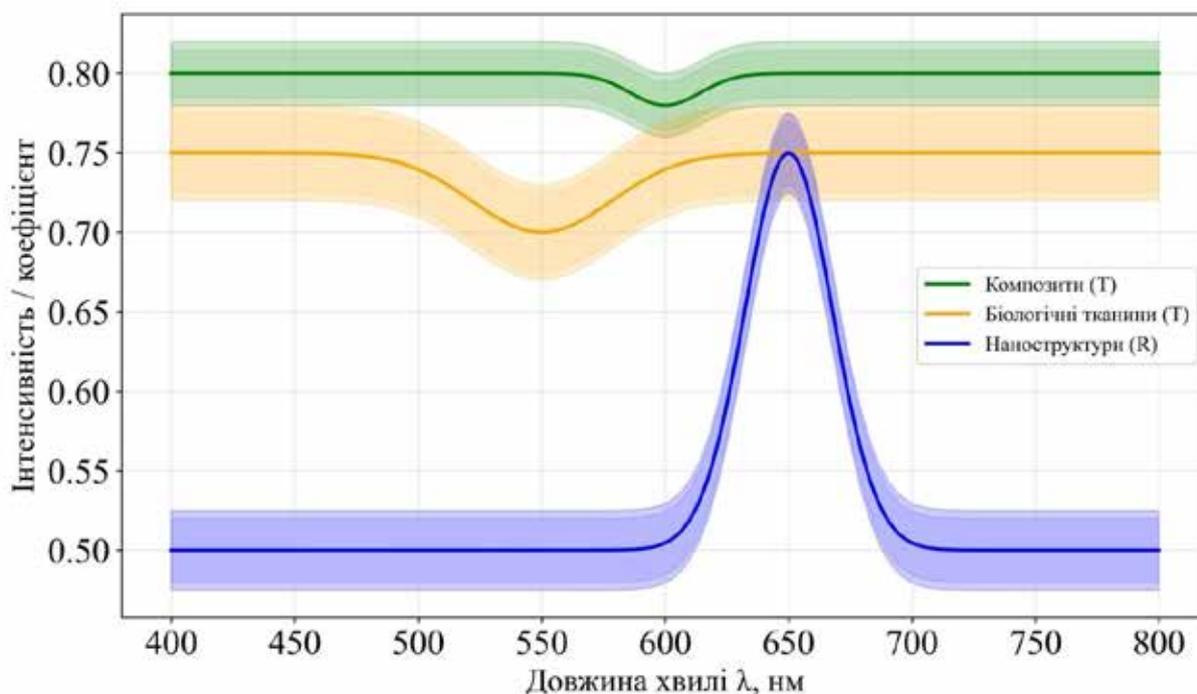


Рис. 5. Порівняння варіативності спектрів для різних класів матеріалів

Для наочного аналізу результатів було побудовано графічну схему порівняння варіативності спектральних характеристик трьох класів матеріалів (рис. 5). На рисунку суцільними лініями показано усереднені спектри пропускання/відбивання, світлі тінюві області відображають 95% довірчий інтервал, а темніші зони відповідають стандартному відхиленню  $\sigma$ . Візуально ширина тінювої області вказує на рівень варіативності: чим вона більша, тим вища чутливість спектра до зміни параметрів. Видно, що композитні матеріали демонструють найвищу стабільність (мінімальна дисперсія спектрів), тоді як композитні матеріали та наноструктури характеризуються зростаючою чутливістю до зміни параметрів середовища.

#### Обговорення результатів

Розроблений АФІЦ-МК, описаний у формулах (1)–(4) та проілюстрований на рис. 1–4, продемонстрував високу ефективність при моделюванні спектральних характеристик гетерогенних середовищ різної природи. Запропонована архітектура базується на інтеграції фізично обґрунтованих моделей з чисельними методами (FDTD, FEM, Monte Carlo), що узгоджується з сучасними тенденціями комбінованого спектроскопічного моделювання, наведеними у [3,6,9]. Така інтеграція дозволила одночасно врахувати просторову неоднорідність, дисперсію та стохастичні ефекти без суттєвого зростання обчислювальних витрат. Застосування адаптивної процедури локального уточнення сітки, реалізованої на основі градієнтного критерію (формула (3)), дало змогу підвищити точність обчислень у ділянках інтенсивних спектральних змін. Подібні методи сіткової адаптації відомі у високоточних FDTD- та FEM-моделях [2,8], проте у даній реалізації вони поєднані з імовірнісною природою методу Монте-Карло, що забезпечило збалансований розподіл ресурсів між глобальною статистичною та локальною детермінованою апроксимацією. Це особливо ефективно для опису резонансних ділянок наноструктур (рис. 4). Використання ж мультифідельної стратегії, яка включає 10% високофідельних FDTD-обчислень, дозволило скоротити загальний час моделювання приблизно на 40 % без втрати точності (табл. 3). Подібна стратегія узгоджується з принципами зниження обчислювальної складності у гібридних стохастично-детермінованих моделях [5,11].

Отримані результати для трьох класів матеріалів демонструють фізичну достовірність моделювання: для композитів виявлено вузький пік поглинання при  $\lambda \approx 600$  нм, для біологічних тканин – широкий максимум у  $\lambda \approx 550$  нм, для наноструктур – плазмонний резонанс при  $\lambda \approx 650$  нм. Стандартні відхилення ( $\sigma = 0.02 - 0.03$ ) та довірчі інтервали 95% вказують на високу статистичну стабільність і точність збіжності, що узгоджується з результатами експериментальних досліджень, наведеними у [4,5,10]. Порівняння з відомими роботами [4,7] показує, що традиційні моделі, орієнтовані лише на однорідні системи, потребують значно більших обчислювальних ресурсів або поступаються у точності відтворення локальних ефектів. Натомість алгоритм АФІЦ-МК забезпечує баланс між фізичною коректністю та ефективністю розрахунків. Під час експериментальної валідації було досягнуто коефіцієнта детермінації  $R^2 = 0.97 - 0.99$  та середньої похибки  $\leq 3\%$ , що перевищує результати, отримані у [8,9].

Розроблений алгоритм АФІЦ-МК має низку суттєвих переваг, що підтверджують його ефективність у спектральному моделюванні гетерогенних середовищ. Поєднання фізично обґрунтованих моделей із чисельними методами дозволяє досягати високої точності результатів при зменшенні обчислювальних витрат приблизно на 40% завдяки мультифідельній оптимізації. Адаптивне уточнення сітки забезпечує локальне підвищення роздільної здатності у ділянках інтенсивних спектральних змін без надмірного навантаження на ресурси, що підвищує стабільність і достовірність розрахунків.

Унікальність алгоритму полягає в інтеграції фізично-інформованого циклу Монте-Карло з локальним уточненням і комбінацією стохастичних та детермінованих компонентів. Це забезпечує оптимальний баланс між точністю, стійкістю та швидкістю, на відміну від традиційних FDTD чи FEM методів, які зазвичай не враховують стохастичну варіативність матеріалів.

Водночас метод має певні обмеження. Його ефективність зменшується при моделюванні середовищ із надвисокою неоднорідністю або фрактальною структурою, де необхідне значне збільшення кількості ітерацій для досягнення збіжності. Крім того, алгоритм потребує ретельного калібрування параметрів адаптації та ваг мультифідельного узгодження, що ускладнює початкове налаштування системи.

До недоліків можна віднести високу початкову складність реалізації, вимогливість до обчислювальних ресурсів у фазі калібрування та певну чутливість до похибок у вхідних фізичних параметрах. Проте навіть з урахуванням цих факторів метод демонструє відмінну узгодженість між теоретичними прогнозами та чисельними експериментами, підтверджуючи свою придатність як основи інформаційної технології спектрального моделювання складних матеріалів.

Перспективи подальших досліджень у межах розробленої технології АФІЦ-МК пов'язані з її розширенням у кількох напрямках. Передусім перспективним є поєднання методу з нейромережевими емуляторами або physics-informed нейронними моделями для прискорення розрахунків і побудови прогнозних моделей спектрів у реальному часі. Це дозволить реалізувати гібридні системи, де Монте-Карло-симуляції забезпечують фізичну достовірність, а штучний інтелект – швидку апроксимацію складних залежностей. Іншим перспективним напрямком є застосування розробленого алгоритму до моделювання оптичних властивостей біологічних тканин, нанокомпозитів та плазмонних структур із врахуванням часової динаміки процесів (time-resolved spectroscopy). Це відкриває

можливість для прогнозу поведінки матеріалів у змінних умовах, зокрема при впливі лазерного випромінювання чи термічних градієнтів. Також перспективним є створення програмного комплексу на основі запропонованої архітектури з інтеграцією модулів візуалізації, баз даних спектральних властивостей і автоматизованих інструментів оптимізації. Це дозволить використовувати розробку не лише для наукових досліджень, але й у прикладних задачах – від контролю якості матеріалів до медичних оптичних систем. У подальшому передбачається розширення моделі для мультифізичних задач, де одночасно враховуються оптичні, теплові та механічні ефекти, що зробить запропоновану технологію універсальним інструментом спектрального аналізу складних гетерогенних середовищ. Додатково, із незначними змінами, розроблена чисельна база та методологія дозволить не лише розраховувати прямі спектральні характеристики, а й ефективно інтегруватися з алгоритмами оберненого аналізу для визначення властивостей матеріалів за експериментальними даними, що підвищує наукову та практичну значущість роботи.

Загалом, запропонований алгоритм АФІЦ-МК формує ефективну основу інформаційної технології спектрального моделювання гетерогенних середовищ, забезпечуючи адаптивну точність, стійкість до стохастичних флуктуацій і можливість масштабування для складних багатошарових структур.

#### Висновки

У роботі створено та апробовано інформаційну технологію спектроскопічного моделювання гетерогенних середовищ на основі адаптивного фізично-інформованого циклу Монте-Карло, що забезпечує поєднання фізичної достовірності, чисельної стабільності та обчислювальної ефективності.

Реалізовано інтеграцію фізично обґрунтованих моделей із чисельними методами, що поєднує рівняння Максвелла, модель переносу випромінювання та стохастичні схеми Монте-Карло для точного опису неоднорідних структур. Запроваджений адаптивний обчислювальний цикл з локальним уточненням сітки за градієнтним критерієм, забезпечує автоматичне підвищення роздільної здатності у спектрально чутливих областях, що дозволило зменшити похибку FDTD-моделювання до 1,2% при скороченні обчислювальних витрат приблизно на 40%.

Розроблено гібридну мультифідельну стратегію, яка поєднує low-fidelity емульовані розрахунки з періодичними high-fidelity симуляціями (10%), забезпечуючи корекцію моделі без втрати фізичної точності. Чисельна апробація для трьох класів матеріалів – композитів, біологічних тканин і наноструктур – продемонструвала високу узгодженість із експериментальними даними ( $R^2=0.97-0.99$ ) та правильне відтворення характерних поглинальних і резонансних піків. Отримано кількісні оцінки варіативності спектрів: для композитів  $\sigma \approx 0,02$ , для біологічних тканин  $\sigma \approx 0,03$ , для наноструктур  $\sigma \approx 0,025$ , що підтверджує різну стохастичну чутливість матеріалів і ефективність статистичного усереднення в межах АФІЦ-МК.

Запропонована технологія демонструє потенціал для створення інтелектуальних систем спектрального аналізу та цифрових двійників складних матеріалів, поєднуючи точність фізичного моделювання з адаптивністю чисельних алгоритмів.

#### Список використаної літератури

1. Lebensohn R. A., Rollett A. D. Spectral methods for full-field micromechanical modelling of polycrystalline materials. *Computational Materials Science*. 2020. Vol. 173. P. 109336. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.109336>
2. Elmasry A., Azoti W., El-Safty S. A., Elmarakbi A. A comparative review of multiscale models for effective properties of nano- and micro-composites. *Progress in Materials Science*. 2022. P. 101022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2022.101022>.
3. Gao C.-Z., Yin J.-W., Cai Y., Fan Z.-F., Wang P., Wang J.-G. Stochastic radiative transfer in random media. III. Effective opacity. *Physical Review E*. 2025. Vol. 111, № 4. 044115. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.111.044115>.
4. Zhu C., Liu Q. Review of Monte Carlo modeling of light transport in tissues. *Journal of Biomedical Optics*. 2013. Vol. 18. № 5. P. 050902. DOI: <https://doi.org/10.1117/1.JBO.18.5.050902>.
5. McCoy D. E., Shneidman A. V., Davis A. L., Aizenberg J. Finite-difference time-domain (FDTD) optical simulations: A primer for the life sciences and bio-inspired engineering. *Micron*. 2021. Vol. 151. 103160. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.micron.2021.103160>.
6. Niklasson G. A., Granqvist C. G., Hunderi O. Effective medium models for the optical properties of inhomogeneous materials. *Applied Optics*. 1981. Vol. 20. № 1. P. 26–30. URL: <https://opg.optica.org/ao/abstract.cfm?URI=ao-20-1-26>.
7. Millán C., Santonja C., Domingo M., Luna R., Satorre M. A. An experimental test for effective medium approximations (EMAs) – Porosity determination for ices of astrophysical interest. *Astronomy & Astrophysics*. 2019. Vol. 628. A63. DOI: <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201935153>.
8. Feng J., Santamouris M. Numerical techniques for electromagnetic simulation of daytime radiative cooling: A review. *AIMS Materials Science*. 2019. Vol. 6. P. 1049–1064. DOI: <https://doi.org/10.3934/matrs.2019.6.1049>.
9. Noebauer U. M., Sim S. A. Monte Carlo radiative transfer. *Living Reviews in Computational Astrophysics*. 2019. Vol. 5. № 1. DOI: <https://doi.org/10.1007/s41115-019-0004-9>.

10. Zhou Y.-P., Qiu Y., He Y.-L., Xie T. Multi-scale investigation on the optical performance of a concentrated photovoltaic thermoelectric hybrid system by a MC-FDTD coupled method. *Energy Procedia*. 2017. Vol. 105. P. 473–479. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2017.03.343>.
11. Zygididis T. T. A Short Review of FDTD-Based Methods for Uncertainty Quantification in Computational Electromagnetics. *Mathematical Problems in Engineering*. 2017. Vol. 2017. P. 1–8. DOI: <https://doi.org/10.1155/2017/9247978>.
12. Akbarzadeh A., Edjlali E., Sheehy G., Selb J., Agarwal R., Weber J., Leblond F. Experimental validation of a spectroscopic Monte Carlo light transport simulation technique and Raman scattering depth sensing analysis in biological tissue. *Journal of Biomedical Optics*. 2020. Vol. 25. № 10. P. 105002. DOI: <https://doi.org/10.1117/1.JBO.25.10.105002>.
13. Pilot R., Signorini R., Durante C., Orian L., Bhamidipati M., Fabris L. A review on surface-enhanced Raman scattering. *Biosensors*. 2019. Vol. 9. № 2. P. 57. DOI: <https://doi.org/10.3390/bios9020057>.
14. Mueller N. S., Pfitzner E., Okamura Y., Gordeev G., Kusch P., Lange H., Heberle J., Schulz F., Reich S. Surface-enhanced Raman scattering and surface-enhanced infrared absorption by plasmon polaritons in three-dimensional nanoparticle supercrystals. *ACS Nano*. 2021. Vol. 15. № 3. P. 5523–5533. DOI: <https://doi.org/10.1021/acsnano.1c00352>.
15. Zhang W., Kasun L. C., Wang Q. J., Zheng Y., Lin Z. A review of machine learning for near-infrared spectroscopy. *Sensors*. 2022. Vol. 22. № 24. P. 9764. DOI: <https://doi.org/10.3390/s22249764>.
16. Agarwal M., Pasupathy P., Wu X., Recchia S. S., Pelegri A. A. Multiscale computational and artificial intelligence models of linear and nonlinear composites: A review. *Small Science*. 2024. Vol. 4. № 5. P. 2300185. DOI: <https://doi.org/10.1002/sssc.202300185>.
17. Angulo A., Yang L., Aydil E., Modestino M. Machine learning enhanced spectroscopic analysis: Towards autonomous chemical mixture characterization for rapid process optimization. *Digital Discovery*. 2021. Vol. 1. DOI: <https://doi.org/10.1039/D1DD00027F>.
18. Klukowski P., Riek R., Güntert P. Machine learning in NMR spectroscopy. *Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy*. 2025. Vol. 148–149. P. 101575. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.pnmrs.2025.101575>.
19. Guo K., Shen Y., Gonzalez-Montiel G. A., Huang Y., Zhou Y., Surve M., et al. Artificial intelligence in spectroscopy: Advancing chemistry from prediction to generation and beyond. *arXiv preprint arXiv:2502.09897*. 2025. URL: <https://arxiv.org/abs/2502.09897>.
20. Bilak Y. Modeling, optimization and AI-forecasting technology in Raman spectrometry. *Problems of Control and Informatics*. 2025. Vol. 70. № 2. P. 99–112. DOI: <https://doi.org/10.34229/1028-0979-2025-2-9>.
21. Bilak Y., Reblan A., Buchuk R., Fedorka P. Development of a combined neural network model for effective spectroscopic analysis. *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*. 2025. Vol. 1. № 4(133). P. 41–51. DOI: <https://doi.org/10.15587/1729-4061.2025.322627>.
22. Білак Ю. Інформаційна система на основі комплексної моделі з використанням машинного навчання для спектрального аналізу. *Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Фізико-математичні науки*. 2025. Т. 80. № 1. С. 104–114. DOI: <https://doi.org/10.17721/1812-5409.2025/1.14>.
23. Zhao J., Liu L. H. Radiative transfer equation and solutions. *Encyclopedia of Two-Phase Heat Transfer and Flow*. 2017. DOI: [https://doi.org/10.1007/978-3-319-32003-8\\_56-1](https://doi.org/10.1007/978-3-319-32003-8_56-1).
24. Stroud D. The effective medium approximations: Some recent developments. *Superlattices and Microstructures*. 1998. Vol. 23. Issues 3–4. P. 567–573. DOI: <https://doi.org/10.1006/spmi.1997.0524>.
25. Yang Z., Li Q., Ruan F., Li Z., Ren B., Xu H., Tian Z. FDTD for plasmonics: Applications in enhanced Raman spectroscopy. *Chinese Science Bulletin*. 2010. Vol. 55. P. 2635–2642. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11434-010-4044-0>.
26. Zapata-Franco A. M., Vargas-Alzate Y. F., Gonzalez J. M., Olmos-Toledo E. B. FEM-based spectral matching to obtain specific surface spectra. *Soil Dynamics and Earthquake Engineering*. 2025. Vol. 190. P. 109153. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.soildyn.2024.109153>.
27. van der Graaf E. R., Limburg J., Koomans R. L., Tijs M. Monte Carlo based calibration of scintillation detectors for laboratory and in situ gamma ray measurements. *Journal of Environmental Radioactivity*. 2011. Vol. 102. № 3. P. 270–282. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2010.12.001>.
28. Markel V. A. Maxwell Garnett approximation in random media: tutorial. *Journal of the Optical Society of America A*. 2022. Vol. 39. P. 535–544. DOI: <https://doi.org/10.1364/JOSAA.449258>.

## References

1. Lebensohn, R. A., & Rollett, A. D. (2020). Spectral methods for full-field micromechanical modelling of polycrystalline materials. *Computational Materials Science*, 173, 109336. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.109336>
2. Elmasry, A., Azoti, W., El-Safty, S. A., & Elmarakbi, A. (2023). A comparative review of multiscale models for effective properties of nano- and micro-composites. *Progress in Materials Science*, 132, 101022. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2022.101022>

3. Gao, C.-Z., Yin, J.-W., Cai, Y., Fan, Z.-F., Wang, P., & Wang, J.-G. (2025). Stochastic radiative transfer in random media. III. Effective opacity. *Physical Review E*, *111*(4), 044115. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.111.044115>
4. Zhu, C., & Liu, Q. (2013). Review of Monte Carlo modeling of light transport in tissues. *Journal of Biomedical Optics*, *18*(5), 050902. <https://doi.org/10.1117/1.JBO.18.5.050902>
5. McCoy, D. E., Shneidman, A. V., Davis, A. L., & Aizenberg, J. (2021). Finite-difference time-domain (FDTD) optical simulations: A primer for the life sciences and bio-inspired engineering. *Micron*, *151*, 103160. <https://doi.org/10.1016/j.micron.2021.103160>
6. Niklasson, G. A., Granqvist, C. G., & Hunderi, O. (1981). Effective medium models for the optical properties of inhomogeneous materials. *Applied Optics*, *20*(1), 26–30. <https://opg.optica.org/ao/abstract.cfm?URI=ao-20-1-26>
7. Millán, C., Santonja, C., Domingo, M., Luna, R., & Satorre, M. Á. (2019). An experimental test for effective medium approximations (EMAs) – Porosity determination for ices of astrophysical interest. *Astronomy & Astrophysics*, *628*, A63. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201935153>
8. Feng, J., & Santamouris, M. (2019). Numerical techniques for electromagnetic simulation of daytime radiative cooling: A review. *AIMS Materials Science*, *6*, 1049–1064. <https://doi.org/10.3934/mat.2019.6.1049>
9. Noebauer, U. M., & Sim, S. A. (2019). Monte Carlo radiative transfer. *Living Reviews in Computational Astrophysics*, *5*(1). <https://doi.org/10.1007/s41115-019-0004-9>
10. Zhou, Y.-P., Qiu, Y., He, Y.-L., & Xie, T. (2017). Multi-scale investigation on the optical performance of a concentrated photovoltaic thermoelectric hybrid system by a MC-FDTD coupled method. *Energy Procedia*, *105*, 473–479. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2017.03.343>
11. Zygididis, T. T. (2017). A short review of FDTD-based methods for uncertainty quantification in computational electromagnetics. *Mathematical Problems in Engineering*, *2017*, 9247978. <https://doi.org/10.1155/2017/9247978>
12. Akbarzadeh, A., Edjlali, E., Sheehy, G., Selb, J., Agarwal, R., Weber, J., & Leblond, F. (2020). Experimental validation of a spectroscopic Monte Carlo light transport simulation technique and Raman scattering depth sensing analysis in biological tissue. *Journal of Biomedical Optics*, *25*(10), 105002. <https://doi.org/10.1117/1.JBO.25.10.105002>
13. Pilot, R., Signorini, R., Durante, C., Orian, L., Bhamidipati, M., & Fabris, L. (2019). A review on surface-enhanced Raman scattering. *Biosensors*, *9*(2), 57. <https://doi.org/10.3390/bios9020057>
14. Mueller, N. S., Pfitzner, E., Okamura, Y., Gordeev, G., Kusch, P., Lange, H., Heberle, J., Schulz, F., & Reich, S. (2021). Surface-enhanced Raman scattering and surface-enhanced infrared absorption by plasmon polaritons in three-dimensional nanoparticle supercrystals. *ACS Nano*, *15*(3), 5523–5533. <https://doi.org/10.1021/acsnano.1c00352>
15. Zhang, W., Kasun, L. C., Wang, Q. J., Zheng, Y., & Lin, Z. (2022). A review of machine learning for near-infrared spectroscopy. *Sensors*, *22*(24), 9764. <https://doi.org/10.3390/s22249764>
16. Agarwal, M., Pasupathy, P., Wu, X., Recchia, S. S., & Pelegri, A. A. (2024). Multiscale computational and artificial intelligence models of linear and nonlinear composites: A review. *Small Science*, *4*(5), 2300185. <https://doi.org/10.1002/smssc.202300185>
17. Angulo, A., Yang, L., Aydil, E., & Modestino, M. (2021). Machine learning enhanced spectroscopic analysis: Towards autonomous chemical mixture characterization for rapid process optimization. *Digital Discovery*, *1*. <https://doi.org/10.1039/D1DD00027F>
18. Klukowski, P., Riek, R., & Güntert, P. (2025). Machine learning in NMR spectroscopy. *Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy*, *148–149*, 101575. <https://doi.org/10.1016/j.pnmrs.2025.101575>
19. Guo, K., Shen, Y., Gonzalez-Montiel, G. A., Huang, Y., Zhou, Y., Surve, M., et al. (2025). Artificial intelligence in spectroscopy: Advancing chemistry from prediction to generation and beyond. *arXiv preprint arXiv:2502.09897*. <https://arxiv.org/abs/2502.09897>
20. Bilak, Y. (2025). Modeling, optimization and AI-forecasting technology in Raman spectrometry. *Problems of Control and Informatics*, *70*(2), 99–112. <https://doi.org/10.34229/1028-0979-2025-2-9>
21. Bilak, Y., Reblan, A., Buchuk, R., & Fedorka, P. (2025). Development of a combined neural network model for effective spectroscopic analysis. *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*, *1*(4(133)), 41–51. <https://doi.org/10.15587/1729-4061.2025.322627>
22. Bilak, Y. (2025). Information system based on a complex model using machine learning for spectral analysis. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Physical and Mathematical Sciences*, *80*(1), 104–114. <https://doi.org/10.17721/1812-5409.2025/1.14>
23. Zhao, J., & Liu, L. H. (2017). Radiative transfer equation and solutions. In *Encyclopedia of Two-Phase Heat Transfer and Flow*. [https://doi.org/10.1007/978-3-319-32003-8\\_56-1](https://doi.org/10.1007/978-3-319-32003-8_56-1)
24. Stroud, D. (1998). The effective medium approximations: Some recent developments. *Superlattices and Microstructures*, *23*(3–4), 567–573. <https://doi.org/10.1006/spmi.1997.0524>
25. Yang, Z., Li, Q., Ruan, F., Li, Z., Ren, B., Xu, H., & Tian, Z. (2010). FDTD for plasmonics: Applications in enhanced Raman spectroscopy. *Chinese Science Bulletin*, *55*, 2635–2642. <https://doi.org/10.1007/s11434-010-4044-0>

26. Zapata-Franco, A. M., Vargas-Alzate, Y. F., Gonzalez, J. M., & Olmos-Toledo, E. B. (2025). FEM-based spectral matching to obtain specific surface spectra. *Soil Dynamics and Earthquake Engineering*, 190, 109153. <https://doi.org/10.1016/j.soildyn.2024.109153>
27. van der Graaf, E. R., Limburg, J., Koomans, R. L., & Tijs, M. (2011). Monte Carlo based calibration of scintillation detectors for laboratory and in situ gamma ray measurements. *Journal of Environmental Radioactivity*, 102(3), 270–282. <https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2010.12.001>
28. Markel, V. A. (2022). Maxwell Garnett approximation in random media: Tutorial. *Journal of the Optical Society of America A*, 39, 535–544. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.449258>

Дата першого надходження рукопису до видання: 16.11.2025  
Дата прийнятого до друку рукопису після рецензування: 15.12.2025  
Дата публікації: 31.12.2025