УДК 621.318:004.891 DOI https://doi.org/10.35546/kntu2078-4481.2025.1.2.3

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

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

А. М. РЕБЛЯН
викладач кафедри програмного забезпечення систем
ДВНЗ «Ужгородський національний університет»
ORCID: 0000-0002-2875-2197

РОЗРОБКА ГІБРИДНОЇ МОДЕЛІ ОБЕРНЕНОГО АНАЛІЗУ ДЛЯ ОЦІНКИ СПЕКТРАЛЬНИХ ХАРАКТЕРИСТИК БАГАТОШАРОВИХ СТРУКТУР

Багатошарові структури є ключовими елементами в сучасній оптиці, нанотехнологіях та фотоніці, де їх спектральні характеристики визначають ефективність і продуктивність пристроїв. Проте сучасні методи аналізу мають низку обмежень, таких як низька точність і недостатня стійкість до шуму, що ускладнює роботу зі складними системами. Метою цього дослідження є розробка нової гібридної моделі оберненого аналізу, яка поєднує класичні ітераційні методи та глибинні нейронні мережі. Запропонована модель використовує переваги попереднього навчання нейромереж для швидкої ініціалізації параметрів багатошарових структур та ітераційні методи для їх оптимізації.

У ході роботи створено алгоритм і відповідний програмний продукт, який реалізовано на мові Python та апробовано на синтетичних даних із шумами. Реалізація моделі виконана із використанням бібліотек NumPy, SciPy, Matplotlib, а також TensorFlow і Keras для побудови та навчання глибинних нейронних мереж. Такий підхід забезпечив ефективну обробку даних, високу точність результатів і можливість адаптації до різних експериментальних умов. Результати показали, що модель забезпечує високу точність у відновленні спектральних параметрів навіть за умов значного рівня шуму. Це підтверджується низькими значеннями середньоквадратичної похибки та високим коефіцієнтом детермінації, що перевищують результати традиційних підходів. Окрім того, модель виявилася адаптивною до змін у геометрії шарів та оптичних властивостях, а її використання дозволило скоротити кількість ітерацій завдяки попередньому навчанню глибинних нейронних мереж.

Застосування розробленої моделі є перспективним для спектроскопії, розробки оптичних покриттів, сенсорів і фотонних пристроїв. Її гнучкість дозволяє працювати з невеликими навчальними вибірками, а здатність адаптуватися до шумів розширює можливості аналізу. Подальше вдосконалення алгоритму, включаючи оптимізацію нейронних мереж та розширення навчальної бази, може значно розширити сфери її застосування та забезпечити ще вищу точність.

Ключові слова: *багатошарові структури, спектральний аналіз, математичне моделювання, гібридна модель, ітераційні методи, глибинне навчання, нейронні мережі.*

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

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

A. M. REBLIAN
Lecturer at the Department of Systems Software
State University “Uzhgorod National University”
ORCID: 0000-0002-2875-2197

DEVELOPMENT OF A HYBRID INVERSE ANALYSIS MODEL FOR EVALUATING SPECTRAL CHARACTERISTICS OF MULTILAYERED STRUCTURES

Multilayer structures are key elements in modern optics, nanotechnology and photonics, where their spectral characteristics determine the efficiency and performance of devices. However, modern analysis methods have a number of limitations, such as low accuracy and insufficient noise immunity, which complicates work with complex systems. The aim of this study is to develop a new hybrid inverse analysis model that combines classical iterative methods and deep neural networks. The proposed model uses the advantages of pre-training of neural networks for fast initialization of the parameters of multilayer structures and iterative methods for their optimization.

In the course of the work, an algorithm and a corresponding software product were created, which were implemented in Python and tested on synthetic data with noise. The model was implemented using the NumPy, SciPy, Matplotlib libraries, as well as TensorFlow and Keras for building and training deep neural networks. This approach ensured efficient data processing, high accuracy of results, and the ability to adapt to various experimental conditions. The results showed that the model provides high accuracy in restoring spectral parameters even under conditions of significant noise levels. This is confirmed by low values of the mean square error and high coefficient of determination, which exceed the results of traditional approaches. In addition, the model turned out to be adaptive to changes in the geometry of the layers and optical properties, and its use allowed to reduce the number of iterations due to pre-training of deep neural networks.

The application of the developed model is promising for spectroscopy, development of optical coatings, sensors and photonic devices. Its flexibility allows working with small training samples, and the ability to adapt to noise expands the analysis capabilities. Further improvement of the algorithm, including optimization of neural networks and expansion of the training base, can significantly expand the scope of its application and provide even higher accuracy.

Key words: *multilayer structures, spectral analysis, mathematical modeling, hybrid model, iterative methods, deep learning, neural networks.*

Постановка проблеми

Багатошарові структури знаходять широке застосування в таких галузях, як оптика, нанотехнології, фотоніка та матеріалознавство. Їх ефективний спектральний аналіз є критично важливим для оцінки ключових параметрів, таких як рефракція, пропускання та поглинання світла. Проте сучасні методи аналізу мають ряд обмежень, зокрема щодо швидкості та точності розрахунків, що є особливо актуальним для складних систем.

Для підвищення ефективності аналізу важливо розробити нові підходи, що поєднують переваги традиційних та сучасних методів. Одним із таких підходів є інтеграція ітераційних методів з глибинними нейронними мережами для попереднього навчання, що дозволяє значно підвищити точність результатів, зокрема в умовах впливу шуму на дані. Враховуючи це, виникає необхідність у розробці гібридного алгоритму оберненого аналізу, який брав до уваги фізичні обмеження та оптимізував параметри для досягнення більш надійних результатів. У зв'язку з цим, створення моделі, яка поєднувала б ці підходи, є важливим етапом для подальшого вдосконалення аналізу багатошарових структур та досягнення високої ефективності в їх вивченні.

Формулювання мети дослідження

Мета роботи полягає у розробці та апробації гібридної моделі оберненого аналізу для визначення параметрів багатошарових структур за їх спектральними характеристиками, що поєднує класичні ітераційні методи з нелінійними поправками та глибинними нейронними мережами, забезпечуючи високу точність та адаптивність до експериментальних умов.

Аналіз останніх досліджень і публікацій

Огляд літератури, присвячений спектральному аналізу багатошарових структур і оптичних покриттів, поєднує знання з фізики, матеріалознавства, математичного моделювання та чисельних методів. Ця міждисциплінарна тематика спрямована на вирішення актуальних завдань, що виникають у процесі розробки сучасних оптичних та електронних пристроїв, таких як сонячні елементи, оптичні покриття та датчики. У контексті створення гібридної моделі оберненого аналізу для оцінки спектральних характеристик багатошарових структур ключовим є застосування сучасних підходів до обробки спектральних даних, що дозволяють ефективно враховувати складність таких систем. Зокрема, у [1] наведено результати досліджень із застосуванням глибоких нейронних мереж для спектрального аналізу, де продемонстровано їхню здатність виділяти ключові ознаки в даних. Водночас зазначено, що їх ефективність значною мірою залежить від якості навчального набору даних, особливо в умовах високого рівня шуму та змінних експериментальних параметрів. У [2] описано метод автоматичної нормалізації спектрів, який дозволяє зменшити вплив шумів і базових зсувів. Цей підхід є цінним для попередньої обробки даних, хоча залишається проблема врахування змін у реальних умовах, таких як використання різного обладнання. Вирішення цієї проблеми передбачає застосування синтетичних спектрів, як це продемонстровано у [3], де створено набір даних для тестування моделей машинного навчання. Ефективність згорткових нейронних мереж (CNN) для аналізу локальних спектральних ознак показано у [4]. CNN дозволяють обробляти локальні особливості, наприклад піки, але мають обмеження щодо моделювання глобальних закономірностей. Для подолання цих обмежень у [4] та [5]

запропоновано інтеграцію CNN із рекурентними нейронними мережами (LSTM), що дозволяє враховувати як локальні, так і глобальні залежності спектральних даних. Дослідження [6] підкреслює важливість комбінованих методів, таких як генетичні алгоритми для зменшення розмірності даних та нейронні мережі для прогнозування концентрації компонентів. Це забезпечує вищу точність порівняно зі стандартними статистичними підходами. У [7] додатково розглянуто архітектури штучних нейронних мереж (ANN), які є ефективними у виявленні складних закономірностей, однак вимагають значних обчислювальних ресурсів і великих навчальних вибірок. Загальні досягнення у застосуванні машинного навчання для спектрального аналізу узагальнено в [8], де акцентується на перспективі створення точніших моделей і прискорення процесів моделювання. Це включає інтеграцію сучасних оптимізаторів, таких як AdamW, для швидкої та стабільної збіжності [9].

Поряд з цим, класичні підходи до спектрального аналізу, зокрема через рівняння безперервності зарядів в органічних сонячних елементах з багатошаровими гетероструктурами, дозволяють вивчати динаміку екситонів і їх взаємодію з активним шаром, що критично важливо для покращення ефективності генерації зарядів. Дослідження фокусуються на впливі таких параметрів, як відстань між парами електронів і дірок, на ймовірність дисоціації екситонів і енергію зв'язку, що має прямий вплив на квантову ефективність і фотонне поглинання [10]. Плазмові технології в полімерних покриттях, зокрема використання RF-потужності для отримання полі(3-метилтіофену) через плазмову полімерацію, дозволяють створювати матеріали з кон'югованою хімічною структурою. Це має важливе застосування в оптичних та провідних технологіях, особливо у виготовленні оптичних сенсорів і пристроїв, де фізичні властивості плівок, отриманих через плазмову полімерацію, є визначальними для їх спектральних характеристик [11]. Чисельні методи та математичне моделювання антивідбивних структур, зокрема методи FDTD (метод скінченних різниць у часовій області) та FEM (метод скінчених елементів), дозволяють моделювати антивідбивні покриття з багатошаровими субхвильовими структурами. Ці методи ефективно прогнозують характеристики відбиття в залежності від геометрії структури і дозволяють значно зменшити відбиття та блимання в оптичних пристроях [12,13]. Фрактальний аналіз поверхонь тонких плівок, застосовуваний для вивчення механізмів їх росту залежно від умов депонування, дає змогу оптимізувати властивості поверхонь для покращення їх практичних характеристик. Зокрема, використання методу RCWA (метод строгого аналізу хвильових компонент) сприяє глибшому розумінню топографії поверхонь і дозволяє моделювати та оптимізувати спектральні властивості багатошарових структур [14]. Інші дослідження, зокрема вивчення спектрально-просторової інформації через гіперспектральні зображення і багатошарові графи, покращують ефективність сегментації та класифікації спектральних даних, що є важливим для обробки зображень у таких сферах, як екологія та геоінформатика [15]. Крім того, методики виявлення пошкоджень за допомогою механічних хвиль використовують спектральні методи для моделювання пошкоджень в структурах, що дозволяє оцінити ефективність цих методів для практичних застосувань [16]. Використання глибокого навчання в спектральному аналізі, зокрема методів трансферного навчання, аугментації даних і суперечливих мереж, відкриває нові можливості для автоматичного аналізу складних спектральних даних, що є важливим для розвитку гібридних моделей оберненого аналізу [17]. Нарешті, застосування багатошарових структур з фотопоглинальними шарами для відновлення спектральної інформації в видимому діапазоні має значення для сенсорних і фотодетекційних систем [18], а моделювання зворотних задач для дифузійних процесів в багатошарових структурах дозволяє прогнозувати зовнішні граничні умови на основі спектральних спостережень, що є важливим для ефективного аналізу та оцінки спектральних характеристик таких структур [19].

Таким чином, об'єднання різноманітних методів математичного моделювання, чисельних підходів та новітніх технологій дозволяє ефективно вивчати і розвивати багатошарові структури, що мають широке застосування в оптиці, сенсорах і новітніх матеріалах.

Викладення основного матеріалу дослідження

Одним з новітніх підходів до моделювання багатошарових структур є *гібридна модель оберненого аналізу (Hybrid Inverse Analysis Model)* за її спектральними характеристиками. Ця модель поєднує ітераційні методи з нелінійними поправками, що дозволяють підвищити точність розрахунків, і глибинні нейронні мережі для попереднього навчання на спектральних даних. Завдяки такому поєднанню модель здатна адаптуватися до варіацій геометрії шарів та їх оптичних властивостей. Існуючі аналоги, такі як методи оберненого аналізу, вже давно використовуються в спектроскопії та інтерферометрії, зокрема за допомогою градієнтних або генетичних алгоритмів. Глибокі нейронні мережі також знайшли застосування для оцінки параметрів багатошарових структур, наприклад, для відновлення товщини шарів за спектральними даними. Новизна запропонованого підходу може полягати в гібридизації класичних і нейронних методів, що дозволить значно підвищити точність аналізу. Крім того, використання адаптивного навчання на невеликих наборах даних із можливістю донавчання моделі дозволить підвищити точність навіть у випадках, коли вихідні дані мають низьку якість або містять значний шум.

Hybrid Inverse Analysis Model (HIAM) призначена для оцінки параметрів багатошарових структур за їх спектральними характеристиками. Вона поєднує ітераційні методи з нелінійними поправками для підвищення точності розрахунків і глибинні нейронні мережі, що попередньо навчаються на спектральних даних. Це дозволяє моделі адаптуватися до змін у геометрії шарів і їхніх оптичних властивостей.

Математична основа методу. Основне рівняння, яке використовується в моделі, може бути описане як:

$$\hat{P} = \arg\min_{P} \left\| S_{\exp} - S_{model}(P) \right\|^2 + \lambda R(P),$$

де $\hat{P}$ – оцінені параметри багатошарової структури (наприклад, товщина та показник заломлення шарів), $S_{\exp}$ – експериментально виміряний спектр, $S_{model}(P)$ – спектр, обчислений на основі моделі для параметрів P; $R(P)$ – регуляризаційний термін, що враховує фізичні обмеження, λ – ваговий коефіцієнт регуляризації.

Зупинимося детальніше на математичній основі гібридного підходу оберненого аналізу.

Постановка задачі. Мета полягає у відновленні параметрів $P = \{p_1, p_2, \ldots, p_n\}$, що описують багатошарову структуру (наприклад, товщина шарів d_i, показник заломлення n_i), на основі виміряного спектра $S_{\exp}(\nu)$. Це досягається шляхом мінімізації різниці між виміряним спектром $S_{\exp}$ та змодельованим спектром $S_{model}(P)$.

Функція втрат розраховується за формулою [20]:

$$L(P) = \left\| S_{\exp} - S_{model}(P) \right\|^2 + \lambda R(P),$$

де $\|\cdot\|^2$ – евклідова норма (квадрат суми відхилень), $R(P)$ – регуляризаційний термін для стабілізації рішення, λ – ваговий коефіцієнт регуляризації.

Моделювання спектра. Змодельований спектр $S_{model}(P)$ обчислюється на основі фізичних моделей, наприклад, через коефіцієнти пропускання та відбиття багатошарової структури. Для кожної частоти ν застосовується формула Френеля [21]:

$$T(\nu) = \frac{\left| t_{12} t_{23} \cdots t_{n-1,n} \right|^2}{\left| 1 + r_{12} r_{23} \cdots r_{n-1,n} \cdot e^{2i\phi} \right|^2},$$

де t_{ij} – коефіцієнти пропускання та відбиття між шарами i та j, $\phi = (2\pi d_i n_i \nu)/c$ – фазовий зсув, c – швидкість світла. Змодельований спектр S_{model} є функцією цих коефіцієнтів.

Регуляризація. Регуляризаційний термін $R(P)$ дозволяє враховувати фізичні обмеження параметрів. Нами враховано обмеження на товщину шарів за формулою:

$$R(P) = \sum_{i=1}^{n} \max(0, d_i - d_{\max})^2 + \max(0, d_{\min} - d_i)^2,$$

та обмеження на гладкість між сусідніми параметрами:

$$R(P) = \sum_{i=1}^{n-1} (d_i - d_{i+1})^2.$$

Градієнтний спуск. Для мінімізації обчислень використовуємо ітераційні методи. Мінімізація функції втрат реалізується методом градієнтного спуску [22]:

$$P^{(k+1)} = P^{(k)} - \eta \Delta_P L(P^{(k)}),$$

де η – швидкість навчання, $\Delta_P L(P)$ – градієнт функції втрат що розраховується за формулою:

$$\nabla_P L(P) = -2(S_{\exp} - S_{\mathrm{mod}el}(P)) \cdot \frac{\partial S_{model}(P)}{\partial P} + \lambda \frac{\partial R(P)}{\partial P}.$$

Глибинна нейронна мережа для ініціалізації. Глибинна нейронна мережа (комбінована модель CNN+LSTM) використовується для попереднього навчання на наборі спектральних даних $\{S_i, P_i\}$. Вона оцінює початкові значення параметрів P, що значно зменшує кількість ітерацій:

$$P_{init} = NN(S_{\exp}),$$

де $NN(\cdot)$ – модель нейронної мережі.

Алгоритм моделювання НІАМ

1. Попереднє навчання. Попереднє навчання нейронної мережі реалізується збором набору даних $\{S_i, P_i\}$ та навчанням мережі прогнозувати параметри P за спектрами S.
2. Ініціалізація параметрів. Для нового спектра $S_{\exp}$, отримати початкове значення параметрів: $P_{init} = NN(S_{\exp})$.
3. Ітераційна оптимізація. Використовуючи градієнтний спуск, мінімізувати $L(P)$:

$$P^{(k+1)} = P^{(k)} - \eta \Delta_P L(P^{(k)}).$$

4. Оцінка якості. Обчислити різницю між виміряним і змодельованим спектрами:

$$\Delta = \| S_{\exp} - S_{model}(P_{opt}) \|.$$

Унікальність розробленої моделі полягає у поєднанні класичних методів оберненого аналізу з глибинними нейронними мережами, що забезпечує ефективне використання фізично обґрунтованого моделювання та нейронних мереж. Це дозволяє зменшити залежність від великих обсягів даних завдяки адаптивному навчанню та донавчанню. Глибока нейронна мережа враховує нелінійності у спектрах, тоді як ітераційні методи уточнюють параметри до заданої точності. Регуляризація стабілізує розрахунки навіть у випадках із шумними або варіативними даними. Ця методика є адаптивною до умов реальних експериментів і демонструє високу ефективність у складних багатошарових структурах.

Алгоритм моделювання спектральних характеристик багатошарових структур було програмно реалізовано на мові програмування *Python* [23] із використанням бібліотек *NumPy* для роботи з багатовимірними масивами даних, *SciPy* для чисельних обчислень, *Matplotlib* для візуалізації результатів, а також *TensorFlow* і *Keras* для побудови та навчання глибинних нейронних мереж.

Апробація моделі. Для проведення апробації запропонованої гібридної моделі оберненого аналізу, було виконано кілька ключових етапів. Спершу було *згенеровано синтетичні дані*, які імітують багатошарові структури, із заданими параметрами, такими як товщина шарів і показники заломлення, для обчислення відповідних спектрів за допомогою моделі. Для моделювання реальних експериментальних умов додано шум. Наступним кроком стало *навчання глибокої нейронної мережі* (CNN+LSTM) на основі синтетичних даних, що дозволило прогнозувати параметри багатошарової структури за вхідним спектром. Ініціалізовані таким чином параметри піддали *ітераційній оптимізації* з мінімізацією функції втрат. Для *оцінки точності* відновлені параметри порівняли з реальними значеннями для синтетичних даних, розрахувавши середньоквадратичну похибку (RMSE) та коефіцієнт детермінації (R^2). На завершення було виконано візуалізацію, що включала графіки змодельованих спектрів, а також залежності точності від рівня шуму й кількості шарів.

Основні результати. З використанням штучного інтелекту (ШІ) було побудовано типовий графік роботи моделі, який наочно демонструє результати аналізу спектральних даних. На рисунку 1 представлені експериментальні дані (синя шумова лінія), теоретичний спектр (червона пунктирна лінія) та відновлений спектр, отриманий за допомогою моделі (зелена лінія).

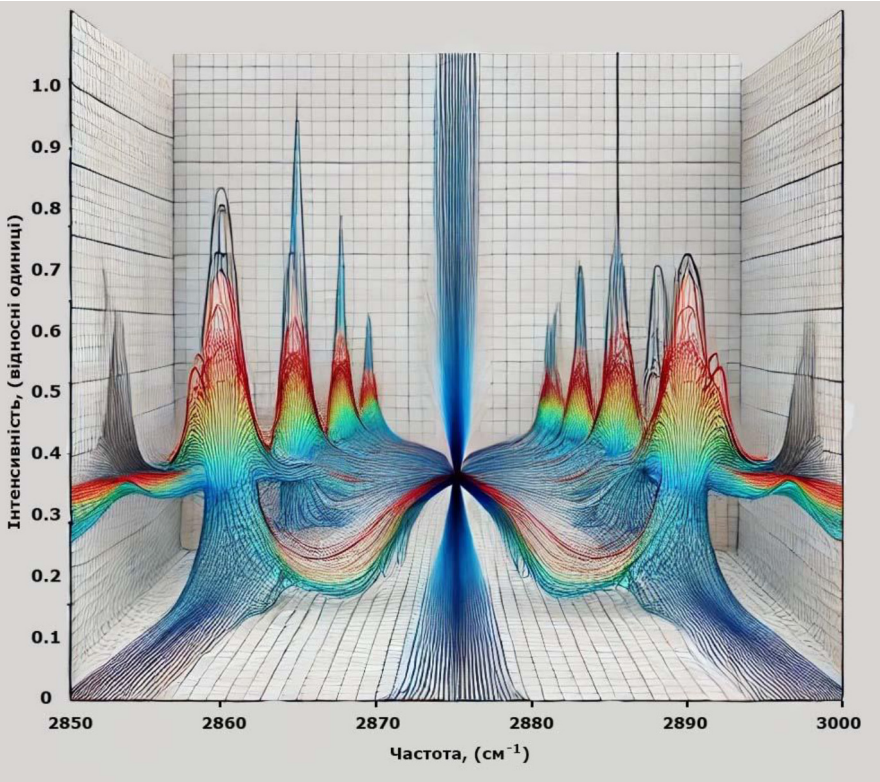

Рис. 1. Результати аналізу спектральних даних змодельовані ШІ

Графік демонструє ефективність роботи моделі гібридного оберненого аналізу для спектральних даних. Експериментальні дані (синя шумова лінія) відображають реальні умови спектрального аналізу, що супроводжуються шумами та нерівностями. Це ілюструє складність задачі для класичних методів. Теоретичний спектр (червона пунктирна лінія) служить як еталон, що дозволяє оцінити точність роботи моделі. Він відображає ідеальний сигнал

без шумів. Відновлений спектр (зелена лінія) збігається з теоретичним спектром, демонструючи здатність моделі коректно відновлювати параметри навіть за умов шуму. Загалом модель показує високу точність у відновленні спектра, що підтверджується близькістю зеленої лінії до червоної. Це свідчить про ефективність запропонованого підходу, який поєднує фізично обґрунтовані ітераційні методи та попередньо навчені глибинні нейронні мережі.

Наступний етап апробації було проведено на синтетичних даних, спеціально створених для перевірки моделі HIAM, зокрема для оцінки точності та стійкості моделі до шуму. Результати апробації наведено на рис. 2.

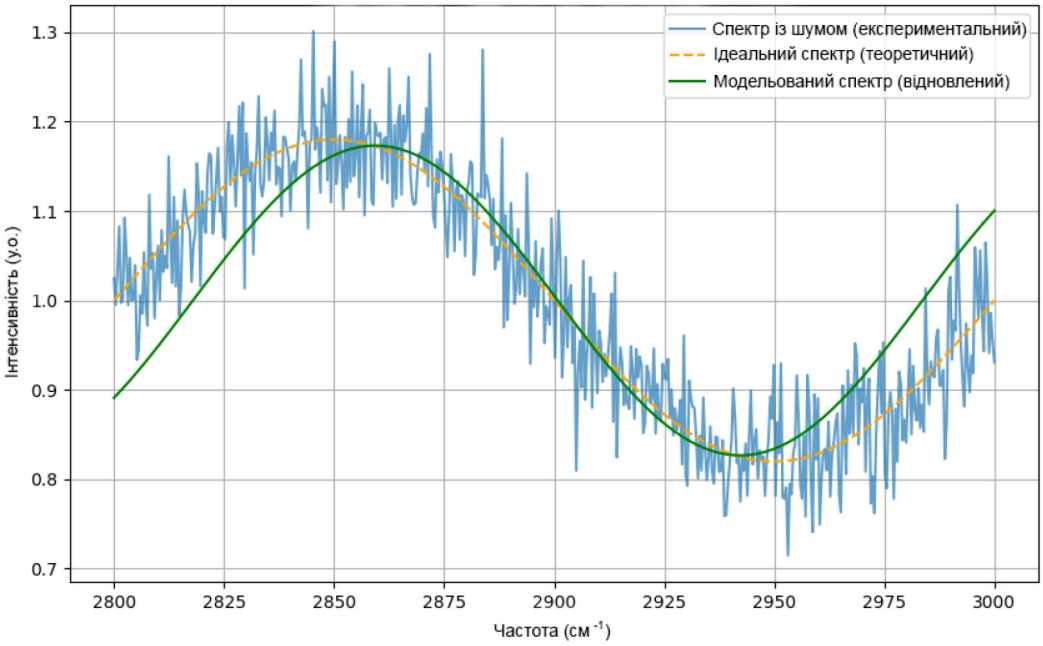

Рис. 2. Результати аналізу синтетичних спектральних даних: експериментальні, теоретичні та відновлені спектри

На графіку апробації HIAM зображені три ключові компоненти:

– синя лінія (Noisy Spectrum – Experimental) це синтетичні спектральні дані, до яких додано випадковий шум, що імітує реальні експериментальні умови. Дані були створені шляхом обчислення спектральних характеристик багатошарової структури за допомогою формули Френеля, після чого додано шум для ускладнення аналізу;

– помаранчева пунктирна лінія (True Spectrum – Theoretical) це ідеальний спектр, розрахований на основі фізичних властивостей структури без врахування шуму. Він відображає справжні характеристики моделі і використовується як еталон для оцінки точності;

– зелена лінія (Modeled Spectrum – Recovered) є результатом, що отриманий моделлю після оптимізації параметрів (товщини шару і показника заломлення) для мінімізації різниці між експериментальним і теоретичним спектрами.

Зелена лінія, яка є результатом роботи моделі, добре збігається з теоретичним спектром, що свідчить про високу ефективність запропонованого підходу. Відновлений спектр зберігає форму теоретичного навіть при значному рівні шуму в експериментальних даних, що підтверджує здатність моделі успішно компенсувати шум і точно відтворювати фізичну залежність. У деяких діапазонах (наприклад, ближче до країв графіка) можна спостерігати незначні відхилення між зеленою і помаранчевою лініями, що може бути пов'язано з обмеженнями моделі, такими як складність нелінійних поправок або недостатнє навчання. Таким чином, HIAM демонструє високу здатність адаптуватися до шуму і точно відновлювати спектральні характеристики багатошарових структур. Ці результати підтверджують її ефективність і можливість застосування для аналізу реальних експериментальних даних у спектроскопії. Однак для подальшого зменшення відхилень між теоретичним і змодельованим спектрами може бути доцільним удосконалення алгоритму, наприклад, через оптимізацію параметрів або додаткове навчання.

Щодо практичного впровадження, запропонований метод має значний потенціал у спектроскопії, оптичному моделюванні та розробці фотонних пристроїв. Його можна застосовувати для проєктування оптичних покриттів, сенсорів або фотонних кристалів. Висока стійкість до шуму робить HIAM придатною для реальних експериментальних умов, а здатність працювати із невеликими наборами даних розширює її використання в умовах обмежених ресурсів. Так, у роботі [24] досліджено плазмові параметри надшвидких розрядів, і HIAM може допомогти покращити оцінку спектральних характеристик таких розрядів у складних матеріалах, таких як халкопірити. У праці

[25], присвяченій синтезу поверхневих структур при лазерному випаровуванні, модель може бути корисною для прогнозування спектральних властивостей структур, а в [26] розглядається синтез плівок оксиду вольфраму, де НІАМ може допомогти в оцінці їх спектральних характеристик. У роботах [27, 28] досліджено спектроскопічну діагностику плазми надшвидких розрядів між цинковими електродами в повітрі і азоті та умов осадження селенових тонких плівок із плазми перенапругового наносекундного розряду, відповідно, де модель може бути корисною для оцінки спектральних властивостей таких плівок. У роботі [29] описано експрес-аналіз газових сумішей за допомогою спектрального корелятора на основі інтерферометра Фабрі-Перо, де НІАМ також може бути застосована.

Висновки

У результаті проведеного дослідження було проведено аналіз сучасних методів аналізу багатошарових структур, виявлено їх переваги та обмеження. Розроблено нову математичну модель, яка інтегрує ітераційні методи з використанням глибинних нейронних мереж для попереднього навчання. Реалізовано алгоритм гібридного підходу оберненого аналізу, що враховує фізичні обмеження та оптимізацію параметрів, який програмно реалізовано на Python. Апробація моделі на синтетичних даних продемонструвала її здатність ефективно оцінювати точність і стійкість до шуму. Проведений аналіз результатів показав високу ефективність розробленої моделі порівняно з існуючими підходами та вказав на можливості її подальшого вдосконалення.

Серед обмежень і викликів виділяється необхідність якісних навчальних даних для досягнення високої точності. У разі їх нестачі можлива втрата ефективності моделі. Крім того, навчання нейронної мережі є тривалим процесом, що може ускладнювати використання моделі в умовах обмеженого часу. У випадках сильних варіацій оптичних властивостей або геометрії шарів можуть виникати похибки через складність нелінійних поправок.

Загалом, НІАМ демонструє ефективність у задачах відновлення параметрів багатошарових структур за їх спектральними характеристиками. Поєднання класичних методів та сучасного машинного навчання дозволяє досягти високої точності й стабільності навіть за складних умов. Подальший розвиток цього підходу, зокрема оптимізація алгоритмів та розширення бази навчальних даних, може значно підвищити його ефективність і зробити незамінним інструментом у галузі аналізу оптичних структур.

Список використаної літератури

1. Xuyang, L., Hongle, A., Wensheng, C., Xueguang, S. (2024). Deep learning in spectral analysis: Modeling and imaging. *Trends in Analytical Chemistry, 172*, Article 117612. https://doi.org/10.1016/j.trac.2024.117612

2. Mishra, P., Passos, D., Marini, F., Xu, J., Amigo, M. J., Gowen, et al. (2022). Deep learning for near-infrared spectral data modelling: Hypes and benefits. *Trends in Analytical Chemistry, 157*(2), 10.1016/s0731-7085(01), Article 00690-2. https://doi.org/10.1016/j.trac.2022.116804

3. Schuetzke, J., Szymanski, N. J., Reischl, M. (2023). Validating neural networks for spectroscopic classification on a universal synthetic dataset. *npj Comput Mater, 9*(100). https://doi.org/10.1038/s41524-023-01055-y

4. Primrose, M. S., Giblin, J., Smith, C., Anguita, M. R., Weedon, G. H. (2022). One dimensional convolutional neural networks for spectral analysis. *Algorithms, Technologies, and Applications for Multispectral and Hyperspectral Imaging XXVIII*, 120940C. https://doi.org/10.1117/12.2618487

5. Liu, J., Osadchy, M., Ashton, L., Foster, M., Solomone, C. J., Gibson, S. J. (2017). Deep convolutional neural networks for Raman spectrum recognition: a unified solution. *The Analyst, 21*. https://doi.org/10.1039/C7AN01371J.

6. Madden, M. G., Ryder, A. G. (2002). Machine learning methods for quantitative analysis of Raman spectroscopy data. *Proc. SPIE 4876*, Opto-Ireland 2002: Optics and Photonics Technologies and Applications. https://doi.org/10.1117/12.464039

7. Butler, K. T., Davies, D. W., Cartwright, H., Isayev, O., Walsh, A. (2018). Machine learning for molecular and materials science. *Nature, 559*, 547–555. https://doi.org/10.1038/s41586-018-0337-2

8. Mahani, M. K., Chaloosi, M., Maragheh, M. G., Khanchi, A. R., Afzali, D. (2007). Comparison of Artificial Neural Networks with Partial Least Squares Regression for Simultaneous Determinations by ICP-AES. *Chinese Journal of Chemistry, 25*(11), 1658–1662. https://doi.org/10.1002/cjoc.200790306

9. Marini, F., Bucci, R., Magrì, A. L., Magrì, A. D. (2008). Artificial neural networks in chemometrics: History, examples and perspectives. *Microchemical Journal, 88*(2), 178–185. https://doi.org/10.1016/j.microc.2007.11.008

10. Born, M., & Wolf, E. (1999). *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference, and Diffraction of Light*. Cambridge University Press. https://doi.org/10.1017/CBO9781139644181

11. Vassallo, E., Laguardia, L., Catellani, M., Cremona, A., Dellera, F., Ghezzi, F. (2007). Characterization of Poly(3-Methylthiophene)-like Films Produced by Plasma Polymerization. *Plasma Processes and Polymers, 4*, S801–S805. https://doi.org/10.1002/ppap.200731909

12. Han, K., Chang, C. H. (2014). Numerical Modeling of Sub-Wavelength Anti-Reflective Structures for Solar Module Applications. *Nanomaterials, 4*(1), 87–128. https://doi.org/10.3390/nano4010087

13. Zhou, W., Cao, Y., Zhao, H., Li, Z., Feng, P., & Feng, F. (2022). Fractal Analysis on Surface Topography of Thin Films: A Review. *Fractal and Fractional, 6*(3), 135. https://doi.org/10.3390/fractalfract6030135

14. Zhang, S., Deng, Q., Ding, Z. (2022). Multilayer graph spectral analysis for hyperspectral images. *EURASIP Journal on Advances in Signal Processing*. https://doi.org/10.1186/s13634-022-00926-8

15. Palacz, M. (2018). Spectral Methods for Modelling of Wave Propagation in Structures in Terms of Damage Detection – A Review. *Applied Sciences, 8*(7), 1124. https://doi.org/10.3390/app8071124

16. Xuyang, L., Hongle, A., Wensheng, C., Xueguang, S. (2024). Deep learning in spectral analysis: Modeling and imaging. *TrAC Trends in Analytical Chemistry, 172*, Article 117612. https://doi.org/10.1016/j.trac.2024.117612

17. Parrein, P., Moussy, N., Poupinet, L., Gidon, P. (2009). Multilayer structure for a spectral imaging sensor. *Applied Optics, 48*, 653–657. https://doi.org/10.1364/AO.48.000653

18. Koleva, M. N., Vulkov, L. G. (2024). Numerical Solution of External Boundary Conditions Inverse Multilayer Diffusion Problems. *Symmetry, 16*(10), 1396. https://doi.org/10.3390/sym16101396

19. Nishawala, V. V., Ostoja-Starzewski, M., Porcu, E., Shen, L. (2020). Random Fields with Fractal and Hurst Effects in Mechanics. In: Altenbach, H., Öchsner, A. (eds) *Encyclopedia of Continuum Mechanics*. Springer. https://doi.org/10.1007/978-3-662-55771-6_74

20. Terven, J., Cordova-Esparza, D. M., Ramirez-Pedraza, A., Chávez Urbiola, E. (2023). Loss Functions and Metrics in Deep Learning. A Review. https://doi.org/10.48550/arXiv.2307.02694

21. Paschotta, R. (2025). Fresnel Equations. *RP Photonics Encyclopedia*. Retrieved January 19, 2025. https://doi.org/10.61835/tql

22. Zhang, J. (2019). Gradient Descent Based Optimization Algorithms for Deep Learning Models Training. *arXiv*. Retrieved January 19, 2025. https://doi.org/10.48550/arXiv.1903.03614

23. Downey, A. B. (2017). *Modeling and Simulation in Python*. Green Tea Press. Needham, Massachusetts. 228 p. https://greenteapress.com/wp/modsimpy/ https://allendowney.github.io/ModSimPy/

24. Shuaibov, A., Minya, A., Malinina, A., Gritsak, R., Malinin, A., Bilak, Yu., Vatrala, M. (2022). Characteristics and Plasma Parameters of the Overstressed Nanosecond Discharge in Air between an Aluminum Electrode and a Chalcopyrite Electrode (CuInSe2). *Surface Engineering and Applied Electrochemistry, 58*(4), 369–385. https://doi.org/10.3103/S1068375522040123

25. Bondar, I., Suran, V., Minya, O., Shuaibov, O., Bilak, Yu., Shevera, I., Malinina, A., Krasilinets, V. (2023). Synthesis of surface structures during laser-stimulated evaporation of a copper sulfate solution in distilled water. *Ukrainian Journal of Physics, 68*(2), 138. https://doi.org/10.15407/ujpe68.2.138

26. Shuaibov, O., Hrytsak, R., Minya, O., Malinina, A., Shevera, I., Bilak, Yu., Homoki, Z. (2024). Conditions for pulsed gas-discharge synthesis of thin tungsten oxide films from a plasma mixture of air with tungsten vapors. *Physics and Chemistry of Solid State, 25*(4), 684–688. https://doi.org/10.15330/pcss.25.4.684-688

27. Shuaibov, O. K., Hrytsak, R. V., Minya, O. I., Malinina, A. A., Bilak, Yu. Yu., & Homoki, Z. T. (2022). *Spectroscopic diagnostics of overstressed nanosecond discharge plasma between zinc electrodes in air and nitrogen. Journal of Physical Studies, 26*(2), 2501(8 p.). https://doi.org/10.30970/jps.26.2501

28. Shuaibov, O., Minya, O., Hrytsak, R., Malinina, A., Malinin, O., Bilak, Y., & Homoki, Z. (2024). *Conditions for the deposition of selenium thin films from the plasma of an overvoltaged nanosecond discharge. J. Clin Bio Med Adv, 3*(1), 01-09.

30. Kozubovsky, V. R., & Bilak, Yu. Yu. (2022). *Express analysis of gas mixtures using a spectral correlator based on the Fabry–Perot interferometer. Journal of Applied Spectroscopy, 89*(3), 495–499. https://doi.org/10.1007/s10812-022-01385-7

References

1. Xuyang, L., Hongle, A., Wensheng, C., & Xueguang, S. (2024). Deep learning in spectral analysis: Modeling and imaging. *Trends in Analytical Chemistry, 172*, Article 117612. https://doi.org/10.1016/j.trac.2024.117612

2. Mishra, P., Passos, D., Marini, F., Xu, J., Amigo, M. J., Gowen, et al. (2022). Deep learning for near-infrared spectral data modelling: Hypes and benefits. *Trends in Analytical Chemistry, 157*(2), Article 00690-2. https://doi.org/10.1016/j.trac.2022.116804

3. Schuetzke, J., Szymanski, N. J., & Reischl, M. (2023). Validating neural networks for spectroscopic classification on a universal synthetic dataset. *npj Computational Materials, 9*(100). https://doi.org/10.1038/s41524-023-01055-y

4. Primrose, M. S., Giblin, J., Smith, C., Anguita, M. R., & Weedon, G. H. (2022). One dimensional convolutional neural networks for spectral analysis. *Algorithms, Technologies, and Applications for Multispectral and Hyperspectral Imaging XXVIII*, 120940C. https://doi.org/10.1117/12.2618487

5. Liu, J., Osadchy, M., Ashton, L., Foster, M., Solomone, C. J., & Gibson, S. J. (2017). Deep convolutional neural networks for Raman spectrum recognition: A unified solution. *The Analyst, 21*. https://doi.org/10.1039/C7AN01371J

6. Madden, M. G., & Ryder, A. G. (2002). Machine learning methods for quantitative analysis of Raman spectroscopy data. *Proceedings of SPIE 4876*, Opto-Ireland 2002: Optics and Photonics Technologies and Applications. https://doi.org/10.1117/12.464039

7. Butler, K. T., Davies, D. W., Cartwright, H., Isayev, O., & Walsh, A. (2018). Machine learning for molecular and materials science. *Nature, 559*, 547–555. https://doi.org/10.1038/s41586-018-0337-2

8. Mahani, M. K., Chaloosi, M., Maragheh, M. G., Khanchi, A. R., & Afzali, D. (2007). Comparison of artificial neural networks with partial least squares regression for simultaneous determinations by ICP-AES. *Chinese Journal of Chemistry, 25*(11), 1658–1662. https://doi.org/10.1002/cjoc.200790306

9. Marini, F., Bucci, R., Magrì, A. L., & Magrì, A. D. (2008). Artificial neural networks in chemometrics: History, examples, and perspectives. *Microchemical Journal, 88*(2), 178–185. https://doi.org/10.1016/j.microc.2007.11.008

10. Born, M., & Wolf, E. (1999). *Principles of optics: Electromagnetic theory of propagation, interference, and diffraction of light*. Cambridge University Press. https://doi.org/10.1017/CBO9781139644181

11. Vassallo, E., Laguardia, L., Catellani, M., Cremona, A., Dellera, F., & Ghezzi, F. (2007). Characterization of Poly(3-Methylthiophene)-like films produced by plasma polymerization. *Plasma Processes and Polymers, 4*, S801-S805. https://doi.org/10.1002/ppap.200731909

12. Han, K., & Chang, C. H. (2014). Numerical modeling of sub-wavelength anti-reflective structures for solar module applications. *Nanomaterials, 4*(1), 87–128. https://doi.org/10.3390/nano4010087

13. Zhou, W., Cao, Y., Zhao, H., Li, Z., Feng, P., & Feng, F. (2022). Fractal analysis on surface topography of thin films: A review. *Fractal and Fractional, 6*(3), 135. https://doi.org/10.3390/fractalfract6030135

14. Zhang, S., Deng, Q., & Ding, Z. (2022). Multilayer graph spectral analysis for hyperspectral images. *EURASIP Journal on Advances in Signal Processing*. https://doi.org/10.1186/s13634-022-00926-8

15. Palacz, M. (2018). Spectral methods for modelling of wave propagation in structures in terms of damage detection – A review. *Applied Sciences, 8*(7), 1124. https://doi.org/10.3390/app8071124

16. Xuyang, L., Hongle, A., Wensheng, C., & Xueguang, S. (2024). Deep learning in spectral analysis: Modeling and imaging. *TrAC Trends in Analytical Chemistry, 172*, Article 117612. https://doi.org/10.1016/j.trac.2024.117612

17. Parrein, P., Moussy, N., Poupinet, L., & Gidon, P. (2009). Multilayer structure for a spectral imaging sensor. *Applied Optics, 48*, 653–657. https://doi.org/10.1364/AO.48.000653

18. Koleva, M. N., & Vulkov, L. G. (2024). Numerical solution of external boundary conditions inverse multilayer diffusion problems. *Symmetry, 16*(10), 1396. https://doi.org/10.3390/sym16101396

19. Nishawala, V. V., Ostoja-Starzewski, M., Porcu, E., & Shen, L. (2020). Random fields with fractal and Hurst effects in mechanics. In H. Altenbach & A. Öchsner (Eds.), *Encyclopedia of continuum mechanics*. Springer. https://doi.org/10.1007/978-3-662-55771-6_74

20. Terven, J., Cordova-Esparza, D. M., Ramirez-Pedraza, A., & Chávez Urbiola, E. (2023). Loss functions and metrics in deep learning: A review. https://doi.org/10.48550/arXiv.2307.02694

21. Paschotta, R. (2025). Fresnel equations. *RP Photonics Encyclopedia*. Retrieved January 19, 2025, from https://doi.org/10.61835/tql

22. Zhang, J. (2019). Gradient descent-based optimization algorithms for deep learning models training. *arXiv*. Retrieved January 19, 2025, from https://doi.org/10.48550/arXiv.1903.03614

23. Downey, A. B. (2017). *Modeling and simulation in Python*. Green Tea Press. https://greenteapress.com/wp/modsimpy/ https://allendowney.github.io/ModSimPy/

24. Shuaibov, A., Minya, A., Malinina, A., Gritsak, R., Malinin, A., Bilak, Y., & Vatrala, M. (2022). Characteristics and plasma parameters of the overstressed nanosecond discharge in air between an aluminum electrode and a chalcopyrite electrode (CuInSe2). *Surface Engineering and Applied Electrochemistry, 58*(4), 369–385. https://doi.org/10.3103/S1068375522040123

25. Bondar, I., Suran, V., Minya, O., Shuaibov, O., Bilak, Y., Shevera, I., Malinina, A., & Krasilinets, V. (2023). Synthesis of surface structures during laser-stimulated evaporation of a copper sulfate solution in distilled water. *Ukrainian Journal of Physics, 68*(2), 138. https://doi.org/10.15407/ujpe68.2.138

26. Shuaibov, O., Hrytsak, R., Minya, O., Malinina, A., Shevera, I., Bilak, Y., & Homoki, Z. (2024). Conditions for pulsed gas-discharge synthesis of thin tungsten oxide films from a plasma mixture of air with tungsten vapors. *Physics and Chemistry of Solid State, 25*(4), 684–688. https://doi.org/10.15330/pcss.25.4.684-688

27. Shuaibov, O. K., Hrytsak, R. V., Minya, O. I., Malinina, A. A., Bilak, Yu. Yu., & Homoki, Z. T. (2022). Spectroscopic diagnostics of overstressed nanosecond discharge plasma between zinc electrodes in air and nitrogen. *Journal of Physical Studies, 26*(2), 2501(8 p.). https://doi.org/10.30970/jps.26.2501

28. Shuaibov, O., Minya, O., Hrytsak, R., Malinina, A., Malinin, O., Bilak, Y., & Homoki, Z. (2024). Conditions for the deposition of selenium thin films from the plasma of an overvoltaged nanosecond discharge. *J. Clin Bio Med Adv, 3*(1), 01–09.

29. Kozubovsky, V. R., & Bilak, Yu. Yu. (2022). Express analysis of gas mixtures using a spectral correlator based on the Fabry–Perot interferometer. *Journal of Applied Spectroscopy, 89*(3), 495–499. https://doi.org/10.1007/s10812-022-01385-7