

УДК 004.9:535:519.6

DOI [https://doi.org/10.24144/2616-7700.2026.49\(2\).139-145](https://doi.org/10.24144/2616-7700.2026.49(2).139-145)**Ю. Ю. Білак**

ДВНЗ «Ужгородський національний університет»,  
завідувач кафедри програмного забезпечення систем,  
кандидат фізико-математичних наук, доцент  
[yuriy.bilak@uzhnu.edu.ua](mailto:yuriy.bilak@uzhnu.edu.ua)  
ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-5989-1643>

## ІНФОРМАЦІЙНА ТЕХНОЛОГІЯ СПЕКТРАЛЬНОГО АНАЛІЗУ ТА ПАРАМЕТРИЧНОГО СИНТЕЗУ БАГАТОШАРОВИХ ТОНКИХ ПЛІВОК НА ОСНОВІ СЦЕНАРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ

Актуальність дослідження зумовлена потребою підвищення точності спектрального аналізу та ідентифікації параметрів багатошарових тонких плівок в умовах варіативності вхідних даних і обмежених обчислювальних ресурсів. Метою роботи є розроблення інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок на основі сценарного моделювання, що забезпечує статистично обґрунтовану оцінку точності та стабільності результатів.

У роботі виконано аналіз сучасних методів, побудовано структурну модель технології, сформовано обчислювальні процедури та організовано серію сценарних експериментів. Використано методи математичного моделювання, розв'язання обернених задач, моделі хвильової оптики (зокрема ТММ та його узагальнення) і чисельні методи оптимізації.

За результатами експериментів (120 сценаріїв) досягнуто зниження середньої похибки ідентифікації до 2.3% (проти 3.9–5.8% для альтернативних методів), а також зменшення варіативності результатів. Це підтверджує ефективність розробленої інформаційної технології та доцільність використання сценарного моделювання для оцінювання точності.

Подальші дослідження спрямовані на розширення технології для нелінійних і неоднорідних структур та інтеграцію з нейромережевими моделями.

**Ключові слова:** інформаційна технологія, спектральний аналіз, багатошарові тонкі плівки, параметричний синтез, сценарне моделювання, адаптивні алгоритми, оптимізація.

**1. Вступ.** Сучасний розвиток оптоелектроніки та нанотехнологій зумовлює потребу у високоточному спектральному аналізі багатошарових тонких плівок, які характеризуються складною структурою та чутливістю до параметричних змін. Такі задачі є оберненими, нелінійними та високорозмірними, що ускладнює їх розв'язання класичними чисельними методами (ТММ, FEM, FDTD) та обмежує їх ефективність в умовах варіативності вхідних даних. Це зумовлює необхідність використання інтегрованих та гібридних підходів, зокрема з елементами машинного навчання. Особливістю сучасних методів та моделей є перехід до сценарного моделювання, яке дозволяє оцінювати поведінку моделей у множині різнорідних умов та забезпечує статистично обґрунтовану оцінку точності й стабільності результатів. Водночас, існуючі рішення не забезпечують достатнього рівня інтеграції фізичних, чисельних і data-driven моделей у єдиному обчислювальному середовищі, що обмежує їх практичну ефективність.

Метою роботи є розроблення інформаційної технології спектрального аналізу багатошарових тонких плівок на основі сценарного моделювання, яка за-

безпечує підвищення точності та стабільності ідентифікації параметрів за рахунок адаптивної організації обчислювальних процесів. Для досягнення мети вирішуються задачі аналізу існуючих методів, побудови архітектури технології, формалізації моделей, організації сценарних обчислювальних експериментів та оцінки ефективності запропонованого підходу.

**2. Огляд літератури.** Сучасні дослідження моделювання багатопарових тонкоплівкових структур базуються на положеннях хвильової оптики та чисельного аналізу. Фізично обґрунтовані методи, зокрема матричні методи, забезпечують точне обчислення спектральних характеристик і широко застосовуються на практиці [1, 2]. Спектроскопічні методи, зокрема еліпсометрія, є чутливими до параметрів структури та дозволяють їх непряме визначення [3], але орієнтовані переважно на прямі задачі та мають обмежену стійкість до шумів і корельованості параметрів.

Задачі спектрального аналізу належать до класу некоректних обернених задач, що ускладнює їх розв'язання традиційними методами. Сучасні методи оберненого проектування формалізують синтез як оптимізаційну задачу [4], а методи глибокого навчання забезпечують апроксимацію обернених операторів і прискорення обчислень [5, 6]. В той же час такі методи мають обмежену інтерпретованість, залежать від навчальних даних і не гарантують стабільності поза їх межами.

Методи оцінювання невизначеності, зокрема на основі Монте-Карло, дозволяють отримувати статистично обґрунтовані оцінки точності та стійкості [7, 8], проте зазвичай застосовуються ізольовано й не інтегруються з фізичними та нейромережевими моделями в межах єдиної системи. Гібридні інформаційні методи, що поєднують фізичні моделі та машинне навчання [9], частково вирішують цю проблему, однак питання узгодження моделей, сценарного керування обчисленнями та забезпечення стабільності залишаються відкритими.

Отже, існуючі методи не забезпечують комплексної інтеграції фізичних, чисельних і data-driven моделей у єдиному адаптивному середовищі. Недостатня системність у методах сценарного моделювання та статистичного оцінювання точності обмежує ефективність аналізу й визначає необхідність розроблення відповідної інформаційної технології.

**3. Методи та моделі.** У статті розроблено інформаційну технологію спектрального аналізу та параметричного синтезу багатопарових плівок у вигляді інформаційної системи

$$IT = \langle D, M, A, S, U \rangle,$$

що інтегрує моделі, алгоритми та засоби керування в єдиному адаптивному середовищі. Технологія поєднує фізично обґрунтовані чисельні методи (ТММ, FEM, FDTD) з гібридними та нейромережевими моделями, які виконують попереднє опрацювання спектрів, виділення спектральних ознак, нейромережеву апроксимацію та ініціалізацію оптимізації. Реалізовано адаптивний вибір і узгодження моделей залежно від параметрів задачі.

Параметричний синтез формалізовано як задачу мінімізації функціонала нев'язки, що розв'язується комбінованими методами оптимізації із нейромережевою підтримкою та зменшенням розмірності. Обчислення організовані за принципами модульності, адаптивності та паралелізму з централізованим керуванням, що забезпечує підвищення точності, стійкості та ефективності розв'язання



основні потоки даних: передавання експериментальних спектрів до множини  $D$ , їх використання в моделях  $M$ , подальша трансформація в алгоритми  $A$ , реалізація в середовищі  $S$  та подання результатів користувачу  $U$ . Двонаправлені зв'язки відображають узгодження між даними, моделями, алгоритмами та програмною реалізацією, а також інтерактивну взаємодію з користувачем. Пунктирні стрілки відповідають зворотним і керуючим впливам, що забезпечують адаптивність системи: передавання керуючих параметрів від користувача, налаштування процедур обробки спектрів та ітераційний зворотний зв'язок між алгоритмами і експериментальними даними.

Зупинимося на функціональному призначенні модулів інформаційної технології.

*Модуль попереднього опрацювання даних та обчислення хвильових процесів.* Забезпечує підготовку вхідних спектральних даних до аналізу та їх фізичну узгодженість. Виконує нормалізацію, фільтрацію шуму, інтерполяцію, виділення інформативної спектральної області та первинну оцінку параметрів структури. Формує коректний параметричний простір  $P \in \Omega$ . Додатково, реалізує чисельне обчислення хвильових процесів у багатошарових структурах, включно з розрахунком полів та інтерференційних ефектів.

*Модуль спектрального аналізу.* Призначений для розв'язання прямих спектральних задач і обчислення спектральних характеристик багатошарових плівок. Забезпечує обчислення спектрів пропускання, відбивання та поглинання з урахуванням неоднорідностей, дисперсії та складної геометрії. Реалізує як класичні чисельні методи, так і гібридні та нейромережеві моделі, формуючи відображення  $P \rightarrow S(\lambda)$ .

*Модуль параметричного синтезу.* Розв'язує обернені задачі спектроскопії шляхом мінімізації функціонала нев'язки  $J(P)$ . Виконує відновлення параметрів структури (товщини, показники заломлення тощо) із використанням методів оптимізації та роботи з зашумленими даними. Реалізує керований спектральний синтез на основі інформативної підмножини спектра та гібридних фізично-обґрунтованих моделей. Формально:  $S(\lambda) \rightarrow P^*$ .

*Модуль нейромережевого прогнозування та апроксимації.* Забезпечує прискорення та узагальнення обчислень за рахунок нейромережевих моделей. Виконує апроксимацію обернених операторів, прогнозування спектральних характеристик, апроксимацію параметрів за спектрами та побудову surrogate-моделей для заміни ресурсоємних чисельних методів. Реалізує відображення  $S(\lambda) \rightarrow \hat{P}$  та  $P \rightarrow S^*(\lambda)$ , інтегруючи physics-informed методи.

Наведена чотирирівнева структура відображає концептуально-функціональну організацію інформаційної технології. На рівні програмної реалізації, кожен модуль декомонується на набір програмних компонентів, що забезпечують виконання відповідних моделей, алгоритмів і процедур обробки даних. Така декомпозиція узгоджує функціональну модель із програмною архітектурою та забезпечує модульність, адаптивність і масштабованість.

Взаємодія модулів утворює замкнений обчислювальний конвеєр  $P \rightarrow S(\lambda) \rightarrow P^*$ ,  $S(\lambda) \rightarrow \hat{P}$ , або  $P \rightarrow S(\lambda) \rightarrow P^* \rightarrow \hat{P}^{(k+1)}$ . Подальше уточнення параметрів здійснюється через ітераційний процес  $P^{(k+1)} = \arg \min J(P^{(k)})$ . Це формує двоконтурну структуру: фізичний (чисельне обчислення) та нейромережевий (апроксимація) контури, що забезпечує баланс точності та швидкодії. Обчи-

слювальна інфраструктура підтримує паралельні обчислення (CPU/GPU), пакетну обробку та розподіл задач, інтегровані без виділення окремого модуля керування ресурсами.

На концептуальному рівні виділяються три узгоджені шари:

1. методологічний — визначає логіку та послідовність обчислень;
2. реалізаційний — забезпечує програмну імплементацію модулів;
3. інтерактивний — реалізує взаємодію користувача із системою.

Обмін даними здійснюється через уніфіковані формати (JSON, HDF5), а керування — централізованим модулем у середовищі Python. Замкнений зворотний зв'язок між фізичними моделями та нейромережами забезпечує самонавчання і адаптацію системи до нових умов без повного переналаштування.

**4. Результати.** У роботі проведено серію обчислювальних експериментів із 120 сценаріями, що охоплюють різні комбінації параметрів багат шарових структур та умов моделювання. Кожен сценарій відповідає окремій реалізації задачі спектрального аналізу та параметричного синтезу, що дало змогу отримати статистично обґрунтовану оцінку ефективності методів.

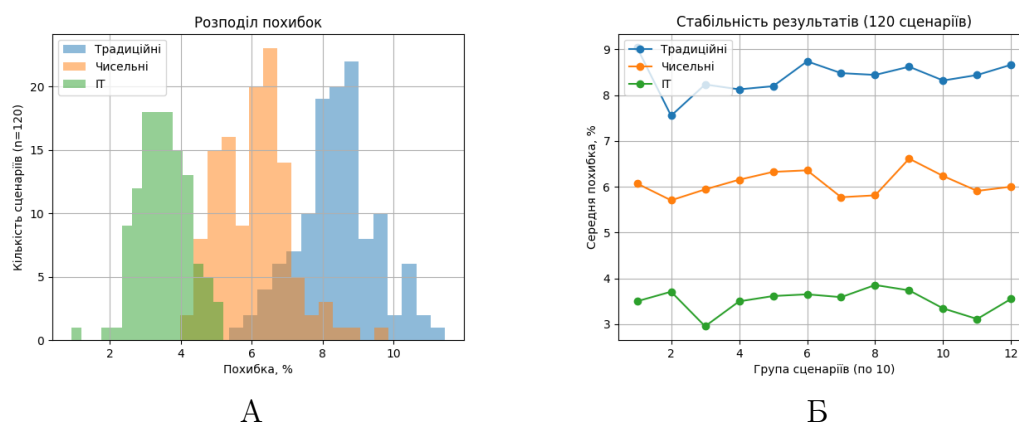


Рис. 2. Порівняння похибки ідентифікації параметрів (А) та агрегований графік по сценаріях (по 10 сценаріїв у групі) (Б).

Гістограма похибок, що відображена на рисунку 2А показує, що для традиційних методів характерне зміщення розподілу в область більших значень та значна дисперсія результатів. Чисельні методи демонструють покращення, однак зберігають суттєву варіативність. Розроблена інформаційна технологія забезпечує найвужчий розподіл і концентрацію похибок у низькому діапазоні, що свідчить про підвищену точність і стабільність. Агрегований графік по сценаріях (по 10 сценаріїв у групі), зображений на рисунку 2Б демонструє, що розроблена технологія забезпечує найменші середні значення похибки на всіх групах. При цьому варіативність між групами мінімальна, що підтверджує стійкість методу до змін умов задачі. Загалом результати експериментів демонструють, що розроблена інформаційна технологія забезпечує зменшення середньої похибки з 8–9% до 3–4%.

**5. Висновки.** У роботі розроблено інформаційну технологію спектрального аналізу багат шарових тонких плівок на основі сценарного моделювання, що

поєднує фізичні та чисельні методи та моделі в єдиній обчислювальній структурі. Технологія орієнтована на підвищення точності та стабільності ідентифікації параметрів у задачах спектрального аналізу. Проведені обчислювальні експерименти (120 сценаріїв), що охоплюють варіативні умови моделювання, підтвердили ефективність розробленої технології. Отримано зниження середньої похибки ідентифікації до 2.3% (покращення на 40–60% порівняно з традиційними методами), а також зменшення варіативності результатів, що свідчить про підвищення стійкості. Результати демонструють, що використання сценарного моделювання дозволяє отримати статистично обґрунтовану оцінку точності та забезпечує надійність аналізу в умовах змінних вхідних даних і складних структур. Розроблена інформаційна технологія може бути ефективно застосована в задачах спектроскопії, оптоелектроніки та аналізу тонкоплівкових систем і створює основу для подальшого розвитку методів інтелектуальної обробки спектральних даних.

---

### Конфлікт інтересів

---

Автор заявляє, що не має конфлікту інтересів щодо даного дослідження, включаючи фінансовий, особистий, авторський або будь-який інший, який міг би вплинути на дослідження, а також на результати, представлені в даній статті.

---

### Фінансування

---

Дослідження було проведено без фінансової підтримки.

---

### Доступність даних

---

Усі дані доступні в цифровій або графічній формі в основному тексті рукопису.

---

### Використання штучного інтелекту

---

Автор підтверджує, що при створенні даної роботи він не використовував технології штучного інтелекту.

---

Авторські права ©



(2026). Білак Ю. Ю. Ця робота ліцензується відповідно до Creative Commons Attribution 4.0 International License.

---

### Список використаної літератури

1. Melnyk, I., & Klymko, T. (2022). Optical modeling and characterization of multilayer coatings. *Ukrainian Journal of Physics*. <https://doi.org/10.15407/ujpe67.6.515> [in Ukrainian].
2. Khan, M., & et al. (2022). Optimization techniques for multilayer thin-film design: A review. *Coatings*. <https://doi.org/10.3390/coatings12040567>
3. Huang, Y., & et al. (2020). Review of characterization of perovskite films by spectroscopic

- ellipsometry. *Solar Energy*. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2020.10.066>
4. Molesky, S., & et al. (2021). Inverse design in nanophotonics. *Nature Photonics*. <https://doi.org/10.1038/s41566-021-00788-9>
  5. Liu, Y., & et al. (2023). Deep learning for inverse problems in photonics: Recent advances and perspectives. *Nanophotonics*. <https://doi.org/10.1515/nanoph-2022-0407>
  6. Han, J. H., & et al. (2024). Efficient inverse design of optical multilayer nano-thin films using neural networks. *Nanoscale*. <https://doi.org/10.1039/D4NR01667J>
  7. Du, W., & Su, J. (2022). Uncertainty quantification for numerical solutions of nonlinear PDEs using multi-fidelity Monte Carlo method. *Applied Sciences*. <https://doi.org/10.3390/app12147045>
  8. Stammer, P., Burigo, L., Jäkel, O., Frank, M., & Wahl, N. (2023). Multivariate error modeling and uncertainty quantification using importance weighting for Monte Carlo simulations. *Journal of Computational Physics*. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2022.111725>
  9. Bilak, Y. Y. (2025). Information system based on a complex model using machine learning for spectral analysis. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv*. <https://doi.org/10.17721/1812-5409.2025/1.14> [in Ukrainian].

### **Bilak Y. Y.** Information technology for spectral analysis and parametric synthesis of multilayer thin films based on scenario modeling.

The relevance of this study is driven by the need to improve the accuracy of spectral analysis and parameter identification of multilayer thin films under conditions of input data variability and limited computational resources. The aim of the work is to develop an information technology for spectral analysis and parametric synthesis of multilayer thin films based on scenario modeling, providing a statistically justified assessment of accuracy and stability of results.

The study includes an analysis of modern methods, the development of a structural model of the proposed technology, the formulation of computational procedures, and the organization of a series of scenario-based experiments. The methods of mathematical modeling, inverse problem solving, wave optics models (in particular the Transfer Matrix Method (TMM) and its generalizations), and numerical optimization techniques are applied.

Experimental results (120 scenarios) demonstrate a reduction in the mean identification error to 2.3% (compared to 3.9–5.8% for alternative methods), as well as a decrease in result variability. This confirms the effectiveness of the proposed information technology and the applicability of scenario modeling for accuracy assessment.

Further research is aimed at extending the proposed technology to nonlinear and inhomogeneous structures and integrating it with neural network-based models.

**Keywords:** information technology, spectral analysis, multilayer thin films, parametric synthesis, scenario modeling, adaptive algorithms, optimization.

Отримано: 03.04.2026

Прийнято: 20.04.2026

Опубліковано: 30.04.2026