



СПЕКТРАЛЬНИЙ АНАЛІЗ ТА ПАРАМЕТРИЧНИЙ СИНТЕЗ БАГАТОШАРОВИХ ОПТИЧНИХ СТРУКТУР З АДАПТИВНОЮ ОРГАНІЗАЦІЄЮ ОБЧИСЛЮВАЛЬНИХ ПРОЦЕСІВ

Досліджено особливості засобів організації обчислювальних процесів у задачах спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок. Застосовано методи математичного моделювання, методи хвильової оптики, зокрема – метод матриць передачі та його узагальнення, чисельні методи розв'язання обернених задач спектроскопії, а також ітераційні алгоритми оптимізації параметрів багатошарових структур з елементами адаптивного керування обчислювальними процесами. Встановлено, що використання ізольованих чисельних методів у задачах спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок обмежується високою обчислювальною складністю та чутливістю до варіацій вхідних даних. Виявлено доцільність інтеграції фізичних, чисельних і нейромережових моделей у межах єдиного обчислювального середовища для підвищення точності та ефективності ідентифікації параметрів багатошарових структур. Запропоновано засоби організації обчислювальних процесів, що забезпечують адаптивний вибір чисельних моделей спектрального аналізу, алгоритмів оптимізації та параметрів обчислення, залежно від характеристик задачі аналізу та синтезу. Охарактеризовано структуру інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу у вигляді впорядкованої системи з узгодженими множинами даних, моделей хвильового та спектрального аналізу, алгоритмів оптимізації параметрів, обчислювального середовища та засобів адаптивного керування обчислювальними процесами. З'ясовано, що використання засобів адаптивного вибору інформативної спектральної області та динамічного уточнення параметрів обчислення дає змогу зменшити розмірність задачі аналізу спектральних характеристик за рахунок виділення інформативної спектральної області та підвищити стійкість розв'язання обернених задач ідентифікації параметрів. Проведено різні спостереження обчислювального експерименту (понад 120 сценаріїв), внаслідок яких встановлено зниження середньої похибки ідентифікації параметрів багатошарових тонких плівок до 2,3 % порівняно з 3,9-5,8 % для альтернативних способів. Оцінено вплив засобів адаптивного керування обчислювальними процесами на ефективність обчислень, що проявляється у скороченні тривалості виконання до 35 % та зменшенні кількості ітерацій до 12-15. Виявлено підвищення швидкості збіжності ітераційних алгоритмів параметричного синтезу багатошарових тонких плівок та зниження чутливості результатів до варіацій вхідних даних. З'ясовано, що інтеграція нейромережових компонентів забезпечує пришвидшення обчислювальних процедур і покращення узагальнювальної здатності моделей спектрального аналізу та параметричного синтезу. Отримані результати підтверджують ефективність розроблених засобів організації обчислювальних процесів та доцільність їх застосування для розв'язання складних обернених задач спектроскопії. Подальші дослідження доцільно спрямувати на розширення застосування розробленої інформаційної технології та засобів організації обчислювальних процесів для нелінійних і неоднорідних структур та поглиблення інтеграції з нейромережевими архітектурами.

Ключові слова: інформаційна технологія; обернені задачі; хвильова оптика; метод матриць передачі; гібридні моделі; нейромережева апроксимація; ідентифікація параметрів багатошарових тонких плівок; обчислювальна ефективність; засоби обчислювальних технологій.

Вступ / Introduction

Сучасний розвиток оптоелектроніки, нанотехнологій та матеріалознавства зумовлює зростання потреби у високоточному спектральному аналізі та параметричному синтезі багатошарових тонких плівок, які широко застосовуються в інтерференційних покриттях, сенсорних системах та функціональних наноструктурах. Спек-

тральні характеристики таких багатошарових тонкоплівкових структур формуються внаслідок складної взаємодії електромагнітного випромінювання з багатошаровим середовищем, що визначається сукупністю фізичних параметрів багатошарової структури, зокрема – товщинами шарів, показниками заломлення та властивостями міжшарових інтерфейсів. Аналіз та параметрич-

© Copyright 2026 by the author(s)

Білак Юрій Юрійович, канд. фіз.-мат. наук, доцент, завідувач кафедри програмного забезпечення систем.

Email: yuriy.bilak@uzhnu.edu.ua; <https://orcid.org/0000-0001-5989-1643>

Реблян Антоніна Муратівна, д-р філософії, ст. викладач, кафедра програмного забезпечення систем.

Email: antonina.reblan@uzhnu.edu.ua; <https://orcid.org/0000-0002-2875-2197>

Цитування за ДСТУ: Білак Ю. Ю., Реблян А. М. Спектральний аналіз та параметричний синтез багатошарових оптичних структур з адаптивною організацією обчислювальних процесів. Науковий вісник НЛТУ України. 2026, т. 36, № 3. С. 169–179.

Citation APA: Bilak, Yu. Yu., & Reblan, A. M. (2026). Spectral analysis and parametric synthesis of multilayer optical structures with adaptive organisation of computational processes. *Scientific Bulletin of UNFU*, 36(3), 169–179. <https://doi.org/10.36930/40360318>

ний синтез багатошарових тонкоплівкових структур, пов'язаний з розв'язанням обернених задач спектроскопії, яким характерні висока розмірність параметричного простору, нелінійність та потенційна нестійкість. Традиційні методи їх розв'язування базуються на використанні класичних чисельних методів, зокрема – методу матриці передачі, методу скінченних елементів та методу скінченних різниць у часовій області.

Водночас, останніми роками активно розвиваються гібридні моделі, що ґрунтуються на використанні класичних чисельних методів із методами машинного навчання та нейромережевого аналізу спектральних даних. Окрім цього, спектральний аналіз та параметричний синтез багатошарових оптичних структур – це науковий підхід для створення розумного скла, лінз та дзеркал, які вміють керувати світлом. За допомогою цих методів інженери розраховують товщину та матеріал ультратонких плівок, щоб їхня поверхня пропускала або відбивала тільки потрібні кольори. Ця технологія поєднує закони фізики світла та можливості штучного інтелекту, щоб розраховувати ідеальні параметри кожного шару плівки.

Незважаючи на значну кількість досліджень у цій галузі, наявні рішення здебільшого реалізують окремі способи аналізу або синтезу багатошарових тонких плівок, та не забезпечують їх ефективної інтеграції в єдиному обчислювальному середовищі. Окрім цього, недостатньо дослідженими залишаються питання організації обчислювальних процесів, узгодження різнорідних моделей та ефективного використання обчислювальних ресурсів у розв'язанні задач спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок. З огляду на це, актуальним є завдання розроблення засобів організації обчислювальних процесів, як складової інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок, що забезпечують інтеграцію фізичних, чисельних і нейромережевих моделей у єдине адаптивне обчислювальне середовище для підвищення ефективності спектрального аналізу та ідентифікації параметрів багатошарових структур.

Об'єкт дослідження – обчислювальні процеси спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок.

Предмет дослідження – методи, моделі та засоби організації обчислювальних процесів спектрального аналізу і параметричного синтезу багатошарових оптичних структур, що забезпечують підвищення точності, ефективності та адаптивності обчислень.

Мета роботи – розробити методику спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок і засобів організації обчислювальних процесів у її межах, що забезпечать підвищення ефективності, адаптивності та масштабованості обчислень за рахунок узгодженого використання різнорідних моделей і алгоритмів.

Для досягнення зазначеної мети визначено такі основні завдання дослідження:

- проаналізувати наявні методи спектрального аналізу та синтезу багатошарових тонкоплівкових структур, що дасть змогу виявити їхні обмеження, визначити напрями підвищення ефективності та обґрунтувати необхідність інтеграції різнорідних моделей і алгоритмів;
- формалізувати методи і моделі обчислювального процесу, що дасть змогу забезпечити їх інтеграцію, узгодженість й адаптивне використання залежно від умов задачі;

- розробити засоби організації адаптивного керування обчисленнями та дослідити ефективність інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових оптичних структур, що дасть змогу підвищити точність ідентифікації параметрів багатошарових оптичних структур, зменшити обчислювальні витрати та забезпечити стійкість результатів.

Аналіз останніх досліджень та публікацій. Розвиток методів спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок пов'язаний із активним використанням чисельного моделювання, методів оптимізації їх параметрів та алгоритмів штучного інтелекту. У роботі [12] проаналізовано сучасні програмні засоби для моделювання тонкоплівкових структур, зокрема – підходи на основі методу матриці передачі, FDTD та чисельного аналізу спектральних характеристик. Показано, що такі методи забезпечують високу точність під час розв'язання прямих задач, однак у задачах параметричної ідентифікації та оптимізації багатошарових тонкоплівкових структур потребують значних обчислювальних ресурсів. Також відзначено недостатню адаптивність більшості наявних програмних систем до зміни параметрів експерименту та умов моделювання.

У монографії [8] розглянуто фізичні основи формування багатошарових тонкоплівкових фільтрів і наведено класичні методи обчислення їх оптичних характеристик. Основним інструментом спектрального аналізу визначено метод матриць передачі, який і сьогодні залишається базовим методом у задачах моделювання багатошарових тонкоплівкових структур. Водночас, автори зазначають, що використання таких моделей у задачах синтезу багатошарових тонких плівок супроводжується значними обчислювальними витратами та залежністю результатів від точності початкових параметрів структури й умов моделювання.

Подальший розвиток чисельних методів пов'язаний із використанням електромагнітного моделювання на основі FDTD-підходів. У роботі [10] запропоновано програмний пакет MEER, який дає змогу виконувати детальний аналіз складних фотонних структур із високою просторовою точністю. Такі методи забезпечують адекватне відтворення електромагнітних процесів, однак застосування FDTD-методів в обернених задачах спектроскопії характерне значними часовими витратами та складністю оптимізації параметрів багатошарових структур у багатовимірних параметричних просторах. У дослідженні [1] запропоновано гібридну модель спектрального аналізу багатошарових структур на основі комбінування RCWA та FDTD-підходів. Показано, що поєднання різних методів електромагнітного моделювання дає змогу підвищити точність аналізу складних неоднорідних структур зі збереженням прийнятної обчислювальної ефективності.

Сучасний напрям розвитку систем спектрального аналізу пов'язаний із використанням градієнтних та ад'юнктних методів оптимізації параметрів багатошарових структур. У роботі [15] запропоновано застосування градієнтної оптимізації для проектування антиблікових покриттів зі змінним показником заломлення. Отримані результати демонструють покращення спектральних характеристик тонкоплівкових систем, проте ефективність такого методу істотно залежить від вибору початкових умов і параметрів функціоналу неув'яз-

ки. У роботі [11] досліджено ад'юнктний метод оптимізації параметрів електромагнітних структур. Показано, що цей метод забезпечує ефективне обчислення градієнтів у задачах синтезу фотонних структур, однак орієнтований переважно на фіксовані моделі та практично не враховує засобів механізмів адаптивного керування обчислювальними процесами.

Окремий напрям досліджень пов'язаний із задачами оберненого проектування нанофотонних структур. У роботі [6] запропоновано інтеграцію процедур оптимізації параметрів багатошарових структур, безпосередньо в процес електромагнітного моделювання з урахуванням технологічних обмежень виготовлення. Такий метод дає змогу пришвидшити збіжність ітераційних алгоритмів пошуку розв'язку, однак проблема локальних мінімумів і залежності результатів від параметрів моделі залишається актуальною.

Перспективним напрямом розвитку інформаційних технологій спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових оптичних структур є використання методів машинного навчання та нейромережових моделей спектральної ідентифікації й прогнозування параметрів багатошарових структур. У роботі [7] показано, що нейронні мережі здатні апроксимувати складні нелінійні залежності між параметрами структури та її спектральними характеристиками, що істотно пришвидшує обчислення. Водночас, такі моделі потребують великих обсягів навчальних даних і мають обмежену здатність до узагальнення за межами навчальної вибірки. У дослідженні [9] розглянуто сучасні data-driven підходи до оберненого проектування у нанофотоніці. Автори відзначають перспективність поєднання фізичних моделей із методами машинного навчання, однак наголошують на недостатній інтеграції різнорідних методів у межах єдиного інформаційного середовища.

Подальший розвиток цього напрямку пов'язаний із використанням методів машинного навчання, орієнтованих на врахування фізичних закономірностей. У роботі [13] показано, що поєднання фізичних моделей і нейромережових методів дає змогу підвищити точність моделювання оптичних структур та фотонних матеріалів. При цьому, більшість наявних рішень орієнтовані на окремі прикладні задачі й не забезпечують комплексної організації обчислювальних процесів.

Отже, аналіз сучасних досліджень показує, що наявні методи спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок забезпечують або високу точність моделювання, або значну швидкість обчислень. Водночас, питання інтеграції фізичних, чисельних і нейромережових методів у межах єдиної інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових оптичних структур залишаються недостатньо опрацьованими. Подальшого дослідження потребують також задачі розроблення засобів адаптивної організації обчислювальних процесів, узгодження різнорідних моделей і раціонального використання обчислювальних ресурсів під час спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок.

Матеріали та методи дослідження. У роботі застосовано комплекс теоретичних і чисельних методів дослідження, спрямованих на розроблення інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок. Теоретичною ос-

новою дослідження є методи електромагнітного моделювання багатошарових тонкоплівкових структур, спектрального аналізу, параметричної ідентифікації, ітераційної оптимізації параметрів структури та елементи машинного навчання. Дослідження виконано з використанням моделей хвильової оптики та сучасних програмних засобів чисельного аналізу, орієнтованих на адаптивне керування обчислювальними процесами, підвищення точності моделювання та оптимізацію використання обчислювальних ресурсів у задачах аналізу й синтезу тонкоплівкових структур.

Результати дослідження та їх обговорення / Research results and their discussion

У межах розробленої інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок ключовим завданням була формалізація та узгодження різнорідних методів попереднього опрацювання даних, моделювання і оптимізації параметрів структур та цільових функцій в єдиному обчислювальному середовищі. Реалізована інформаційна технологія базується на поєднанні фізично обґрунтованих чисельних моделей, нейромережових методів опрацювання спектральної інформації та засобів адаптивного керування обчислювальними процесами.

Інформаційну технологію спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових оптичних структур подано у вигляді впорядкованої системи:

$$IT = \langle D, M, A, S, U \rangle, \quad (1)$$

де: $D = \{d_i, i = \overline{1, n_D}\}$ – множина вхідних спектральних відгуків (експериментальних або синтетичних); $M = \{m_i, i = \overline{1, n_M}\}$ – множина моделей спектрального аналізу; $A = \{a_i, i = \overline{1, n_A}\}$ – множина алгоритмів оброблення вхідних даних, аналізу та синтезу багатошарових тонких плівок; $S = \{s_i, i = \overline{1, n_S}\}$ – структура обчислювального середовища; $U = \{u_i, i = \overline{1, n_U}\}$ – засоби керування обчислювальними процесами. На відміну від традиційних підходів, у розробленій технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових оптичних структур компоненти M , A та U взаємодіють у межах єдиного адаптивного контуру, що забезпечує динамічний вибір моделей спектрального аналізу і алгоритмів оберненого відображення та процедур параметричного синтезу залежно від властивостей вхідних даних та поточного стану обчислювального процесу.

Для моделювання спектральних характеристик багатошарових тонкоплівкових структур використовується сукупність взаємодоповнювальних чисельних методів, кожен з яких ефективний за певних умов. Базовою є модель на основі методу матриці передачі, що забезпечує ефективне обчислення спектральних характеристик для шаруватих структур із плоскими межами. Для складніших геометрій та неоднорідних середовищ застосовуються методи скінченних елементів та скінченних різниць у часовій області, а також розроблені гібридні моделі, які дають змогу враховувати локальні особливості розподілу електромагнітного поля. Окрім цього, у межах розробленої інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових оптичних структур, ці методи не використовуються ізольовано. Замість цього, реалізовано підхід їх адаптивного поєднання, за якого вибір конкретного ме-

тоду чи моделі визначається характеристиками задачі, зокрема – геометрією структури, діапазоном довжин хвиль та необхідною точністю розрахунку. Узгодження отриманих результатів дослідження здійснюється через передачу граничних умов та нормалізацію спектральних характеристик.

Для підвищення ефективності оброблення спектральних даних у складі інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових оптичних структур використовуються чисельні методи, розроблені гібридні та нейромережеві моделі, орієнтовані на вилучення інформативних ознак та апроксимацію складних нелінійних залежностей. Зокрема, застосовуються згорткові нейронні мережі для аналізу локальних спектральних особливостей, а також рекурентні або гібридні архітектури для врахування глобальних залежностей у спектрі. Нейромережеві моделі виконують такі функції, як попереднє опрацювання та згладжування спектральних даних, виділення інформативних ознак, швидке оцінювання параметрів структури, прогнозування спектральних параметрів багатошарових тонкоплівкових структур, ініціалізація чисельних алгоритмів синтезу багатошарових тонких плівок та апроксимація параметрів тонких плівок. Особливістю реалізованої інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок є інтеграція нейромережевих моделей у загальний обчислювальний процес, що дає змогу використовувати їх не як заміну фізичних моделей, а як засіб їх пришвидшення та стабілізації.

Задача параметричного синтезу багатошарових тонких плівок формалізується як задача мінімізації функціонала неув'язки між експериментальним та модельованим спектрами. У межах розробленої інформаційної технології, зазначена вище задача розв'язується із застосуванням комбінованих варіацій, що поєднують градієнтні та евристичні методи оптимізації параметрів структури. Ключовою особливістю є організація замкненого ітераційного процесу, у якому результати спектрального аналізу використовуються для корекції параметрів моделі, а нейромережеві компоненти забезпечу-

ють адаптивне уточнення початкових наближень та напрямів пошуку. Додатково, використовується розроблений метод зменшення розмірності задачі за рахунок відбору інформативних ділянок спектра, що дає змогу підвищити стійкість розв'язання оберненої задачі та зменшити обчислювальні витрати.

Розроблені засоби організації обчислювальних процесів в інформаційній технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок базуються на принципах адаптивності, модульності та паралелізму. Адаптивність забезпечується за рахунок динамічного вибору методів моделювання залежно від складності задачі та доступних обчислювальних ресурсів. Модульність дає змогу незалежно реалізовувати та комбінувати окремі компоненти системи, зокрема – фізичні моделі, нейромережеві блоки та алгоритми оптимізації параметрів структури. Паралельна організація обчислень реалізується на рівні незалежних задач спектрального моделювання, що дає змогу ефективно використовувати сучасні багатоядерні та графічні обчислювальні системи. Керування обчислювальним процесом здійснюється за допомогою спеціалізованого модуля, який реалізує розподіл обчислювальних ресурсів, планування виконання задач, вибір оптимальних моделей та контроль збіжності та точності результатів. Отже, розроблені методи та моделі формують основу інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок, яка забезпечує інтеграцію фізичних, чисельних та нейромережевих підходів у єдиному обчислювальному середовищі, що дає змогу підвищити ефективність опрацювання спектральних даних, забезпечити адаптивність обчислювальних процесів та покращити точність розв'язання обернених задач.

На рис. 1 зображено причинно-наслідкову структуру розробленої інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових оптичних структур. Ця технологія поєднує закони фізики світла та можливості штучного інтелекту, щоб розраховувати ідеальні параметри кожного шару плівки.

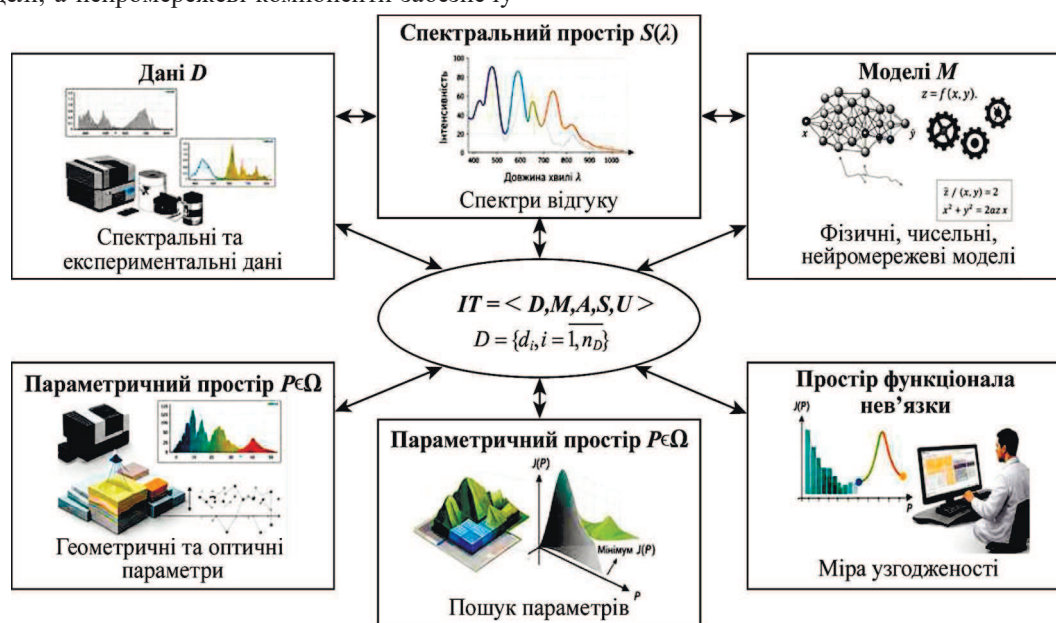


Рис. 1. Причинно-наслідкова структура інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових оптичних структур / Cause-and-effect structure of the information technology underlying spectral analysis and parametric synthesis of multilayer optical structures

Функціонування інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових оптичних структур відбувається у трьох взаємопов'язаних просторах, а саме параметричному просторі $P \in \Omega$, що описує геометричні та оптичні характеристики багатошарової структури, спектральному просторі $S(\lambda)$, який відображає результати взаємодії електромагнітного випромінювання із системою та просторі функціонала неув'язки $J(P)$, що визначає міру узгодженості між експериментальними та модельними спектрами. Потрібно зазначити, що саме введення простору функціонала неув'язки забезпечує можливість формалізації задачі параметричного синтезу багатошарових тонких плівок як задачі оптимізації параметрів структури.

Структура інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових оптичних структур базується на таких основних принципах:

1. *Гібридність (physics + data-driven)*. Технологія поєднує фізично обґрунтовані чисельні методи (TMM, RCWA, FEM, FDTD) з неймережевими моделями. При цьому гібридизація реалізується не як проста комбінація, а як взаємопроникнення моделей, де результати фізичного моделювання використовуються для навчання та корекції неймережових компонентів.

2. *Модульність*. Розроблена інформаційна технологія структурована у вигляді взаємодіючих функціональних модулів (використано модульний принцип організації), що забезпечує можливість незалежного розвитку, заміни та розширення окремих компонентів.
3. *Адаптивність*. Передбачає динамічну зміну області спектрального аналізу (інформативна підмножина), параметрів регуляризації та дискретизації обчислювальної сітки, що дає змогу зменшити обчислювальні витрати без втрати точності.
4. *Замкнений обчислювальний контур*. Результати кожного етапу використовуються для уточнення попередніх, що формує ітераційний процес збіжності до узгодженого розв'язку.
5. *Паралельність і масштабованість*. Обчислення організовані з урахуванням можливостей паралельного оброблення (CPU/GPU), однак ці механізми інтегровані в алгоритмічні та програмні компоненти і не виділяються в окремий функціональний модуль. Тобто, керування ресурсами – це властивість реалізації, а не окрема функціональна сутність засобів розробленої інформаційної технології.

На рис. 2 зображено структурну схему розробленої інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових оптичних структур.

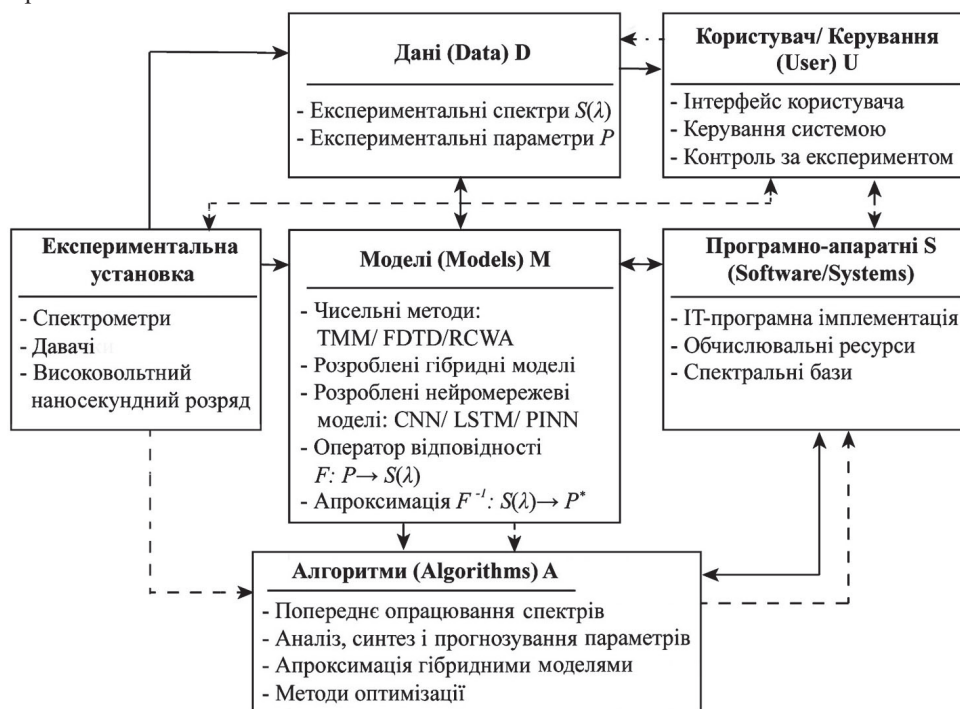


Рис. 2. Структурна схема інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових оптичних структур / Functional diagram of the information technology for spectral analysis and parametric synthesis of multilayer optical structures

У поданій структурній схемі стрілки відображають структуру інформаційних та керівних взаємозв'язків між складовими розробленої інформаційної технології. Суцільні стрілки характеризують основні інформаційні потоки: передавання експериментальних спектральних даних і параметрів структури із вимірювальної установки до множини даних D , подальше використання цих даних у математичних моделях M , а також трансформацію моделей в алгоритмічні процедури A з їх реалізацією у програмно-апаратному середовищі S і відображенням результатів користувачу U . Двонаправлені суцільні зв'язки відображають взаємну узгодженість між даними та моделями, алгоритмами та програмною реалізацією, а також інтерактивну взаємодію з користувачем. Пунктирні стрілки відображають зворотні та керів-

ні впливи, що забезпечують адаптивність системи. Вони реалізують передачу керівних параметрів обчислювальних засобів від користувача до даних та експериментальної установки, процедур попереднього оброблення і підготовки спектральної інформації, а також ітераційний зворотний зв'язок між алгоритмами та експериментом.

На рис. 3 зображено функціональну схему взаємодії модулів інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових оптичних структур, що реалізована у вигляді чотирьох ключових взаємопов'язаних модулів. Ця схема взаємодії описує, як чотири ключові блоки працюють разом для створення та аналізу оптичних покриттів (наприклад, лінз чи дзеркал).

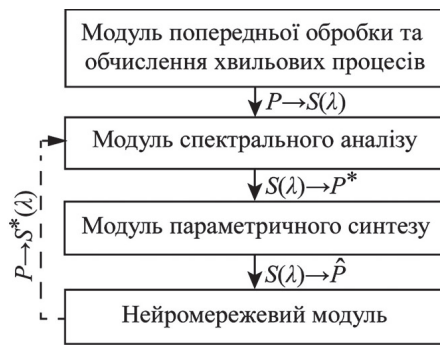


Рис. 3. Функціональна схема взаємодії модулів інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатопшарових оптичних структур / Functional diagram of the interaction between information technology modules for spectral analysis and parametric synthesis of multilayer optical structures

1. *Модуль попереднього опрацювання даних та обчислення хвильових процесів.* Призначений для підготовки вхідних даних до подальшого спектрального аналізу та забезпечення їх фізичної узгодженості. Основні функції модуля містять: нормалізацію спектральних даних (приведення до безрозмірного або еталонного вигляду), фільтрацію шуму та згладжування сигналів, інтеполяцію спектрів, виділення інформативної спектральної області, а також початкову оцінку параметрів багатопшарової тонкоплівкової структури (показників заломлення, товщини шарів тощо). Додатково реалізується узгодження експериментальних і модельних даних та формування коректного вхідного параметричного простору $P \in \Omega$ для подальшого моделювання хвильових процесів. Окрім цього, модуль виконує обчислення хвильових процесів у багатопшарових тонкоплівкових структурах із використанням чисельних та розроблених гібридних методів. Зокрема, здійснюється розрахунок просторово-частотних розподілів електромагнітних полів (карт полів), аналіз інтерференційних ефектів і локалізації енергії в шарах структури. Модуль також забезпечує формування фізично обґрунтованого параметричного простору $P \in \Omega$ та узгодження експериментальних і модельних даних перед переходом до модуля спектрального аналізу.

2. *Модуль спектрального аналізу.* Забезпечує розв'язання прямих задач і обчислення спектральних характеристик багатопшарових тонких плівок. До його основних функцій відносять обчислення спектрів пропускання, відбивання та поглинання, моделювання хвильових процесів із використанням чисельних методів, врахування неоднорідностей, дисперсії та фрактальних меж і формування синтетичних спектральних даних. У межах реалізованих у дисертаційній роботі моделей, модуль також підтримує універсальну модель спектральної відповідності на основі оператора відповідності, гібридну RCWA-FDTD модель для структур із фрактальними межами, а також нейромережеву CNN+LSTM модель для апроксимації спектральних залежностей і аналізу часо-частотних характеристик. Отже, у цьому модулі поєднано фізично обґрунтовані та data-driven підходи в єдиній обчислювальній інфраструктурі. Цей модуль формує відображення:

$$P \rightarrow S(\lambda). \quad (2)$$

3. *Модуль параметричного синтезу багатопшарових тонких плівок.* Реалізує розв'язання обернених задач спе-

ктроскопії та ідентифікацію параметрів структури. Його основні функції – це мінімізація функціоналу неув'язки $J(P)$, відновлення товщин шарів, показників заломлення та інших параметрів тонкоплівкової структури, використання методів оптимізації (градієнтні, генетичні, регуляризаційні) та робота з неповними та зашумленими спектральними даними. Додатково, реалізовано метод керованого спектрального синтезу багатопшарових тонких плівок на основі адаптивної інформативної підмножини спектральних даних, модель синтезу багатопшарових тонких плівок з урахуванням спектральної чутливості їх параметрів, а також гібридну фізично обґрунтовану автоенкодерну модель зі спектральною консистентністю, що забезпечує узгодження фізичних обмежень із даними навчання. Розроблена модель дає змогу реалізувати як прямий, так й інверсний аналіз спектральних структур у єдиному обчислювальному середовищі формально:

$$S(\lambda) \rightarrow P^*. \quad (3)$$

Цей модуль є центральним у задачах керованого параметричного синтезу багатопшарових тонких плівок.

4. *Модуль нейромережевого прогнозування та апроксимації.* Забезпечує нейромережеве узагальнення та пришвидшення обчислювальних процесів. Його основні функції – це апроксимація обернених операторів, прогнозування спектральних характеристик, побудова surrogate-моделей для заміни обчислювально дорогих чисельних методів, а також інтеграція physics-informed архітектур. Цей модуль реалізує відображення:

$$S(\lambda) \rightarrow \hat{P}, P \rightarrow S^*(\lambda), \quad (4)$$

та виступає як пришвиджувальний і узагальнювальний компонент технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатопшарових оптичних структур.

Потрібно зазначити, що наведена вище чотирирівнева структура інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатопшарових тонких плівок, відображає її концептуально-функціональну організацію. На рівні програмної реалізації, кожен із зазначених модулів декомпонується на сукупність взаємопов'язаних програмних компонентів, які забезпечують реалізацію відповідних методів, моделей та засобів інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатопшарових оптичних структур, а також процедур оброблення даних. Ця декомпозиція, водночас, дає змогу узгодити високорівневу функціональну модель інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатопшарових оптичних структур з її програмною архітектурою, зберігаючи принципи модульності, адаптивності та масштабованості. Як бачимо з рис. 2 та 3, взаємодія модулів організована у вигляді замкнутого обчислювального конвеєра:

$$P \rightarrow S(\lambda) \rightarrow P^*, S(\lambda) \rightarrow \hat{P}, \text{ або } P \rightarrow S(\lambda) \rightarrow P^* \rightarrow \hat{P}^{(k+1)}. \quad (5)$$

Подальше уточнення обчислених параметрів структури здійснюється через ітераційний процес:

$$P^{(k+1)} = \arg \min J(P^{(k)}), \quad (6)$$

з урахуванням як фізичних моделей, так і нейромережевих оцінок, що формує *двоконтурну структуру*: фізичний контур (чисельний розрахунок та моделювання), нейромережевий контур (нейромережеве наближення), що забезпечує баланс між точністю та швидкодією.

Обчислювальна інфраструктура розробленої інформаційної технології спектрального аналізу та парамет-

ричного синтезу багат шарових тонких плівок реалізує паралельні обчислення та розподіл ресурсів на рівні алгоритмів спектрального аналізу, параметричного синтезу та програмної реалізації у вигляді паралелізації розрахунків спектрів, пакетного оброблення параметричних наборів і використання GPU для функціонування нейромережових моделей оброблення та апроксимації спектральних даних. При цьому керування ресурсами не виділяється як окремий модуль, а інтегрується в логіку функціонування кожного з компонентів системи. Розроблена структура дає змогу реалізувати замкнений адаптивний цикл моделювання, аналізу, синтезу багат шарових тонких плівок та оптимізації параметрів багат шарових тонких плівок із підвищеною точністю, стійкістю та обчислювальною ефективністю.

На концептуальному рівні зв'язок між технологією та системою можна подати у вигляді трьох узгоджених рівнів:

- *Методологічний рівень*: визначає логіку, послідовність і взаємозалежність етапів обчислень, аналізу та оптимізації параметрів моделі; формує базові принципи побудови моделей, алгоритмів і процедур оброблення даних.
- *Реалізаційний рівень*: відповідає за програмну реалізацію інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багат шарових тонких плівок, враховуючи модулі обчислення хвильових і спектральних процесів, параметричного синтезу багат шарових тонких плівок та нейромережового аналізу, оптимізацію параметрів багат шарових структур і візуалізацію результатів.
- *Інтерактивний рівень*: забезпечує взаємодію користувача з технологією через систему – через графічний інтерфейс, базу знань і сценарії автоматизованих обчислень.

У системі реалізовано повну підтримку циклу, закладеного технологією: *вхідні дані* → *формалізація* → *чисельний розрахунок* → *спектральний аналіз* → *прогнозування* → *параметричний синтез* → *оптимізація* → *валідація*.

Кожен із цих етапів відповідає певному модулю системи (попереднього опрацювання та чисельного розрахунку, спектральному, синтезу багат шарових тонких плівок, нейромережовому), а взаємодія між ними забезпечується через уніфіковані формати обміну даними (JSON, HDF5) і централізований керівний модуль, що координує виконання задач у середовищах Python, TensorFlow, MATLAB або C++. Особливістю розробленої інформаційної технології є *наявність замкнутого зворотного зв'язку між рівнями*: результати обчислень використовуються для навчання нейромереж, а вихідні дані нейромережового аналізу – для уточнення параметрів чисельних моделей, що створює механізм самонавчання системи, який забезпечує адаптацію до нових типів задач і експериментальних умов без потреби повного переналаштування.

На рис. 4 подано схему організації обчислювальних процесів розробленої інформаційної технології, яка реалізує послідовно-ітераційний спосіб розв'язання задачі спектрального аналізу та ідентифікації параметрів багат шарових оптичних структур.

Вхідні спектральні дані проходять етап попереднього опрацювання, після чого здійснюється адаптивний вибір моделі та параметрів обчислення. Центральним елементом є обчислювальний модуль, у межах якого реалізується безпосереднє моделювання спектра та оцінювання функціоналу неув'язки. Ітераційний контур

оптимізації параметрів забезпечує їх уточнення з урахуванням критеріїв збіжності, а модуль керування обчислювальними процесами координує взаємодію компонентів та адаптує обчислювальний процес. Така організація дає змогу підвищити ефективність використання обчислювальних ресурсів і забезпечити стійкість розв'язання задачі за умов варіативності вхідних даних.



Рис. 4. Схема обчислювальних процесів розробленої інформаційної технології / Scheme of computational processes of the developed information technology

Експеримент. У межах дослідження проведено серію обчислювальних експериментів, що охоплює понад 100 варіантів багат шарових тонкопліткових структур із різною кількістю шарів, оптичними параметрами та умовами збудження. Для кожного експерименту виконано ідентифікацію параметрів структури на основі аналізу спектральних характеристик із використанням розробленої інформаційної технології. Отримані результати узагальнено у вигляді гістограм розподілу похибки (рис. 5), залежностей тривалості обчислення (рис. 6) та характеристик збіжності алгоритмів оптимізації параметрів моделі (рис. 7). Це дало змогу оцінити не тільки середні показники точності, але й варіативність результатів за різних умов моделювання. Зокрема, кожен експеримент відповідає окремому набору параметрів структури, що забезпечує репрезентативність вибірки та можливість статистично обґрунтованого порівняння ефективності.

На рис. 5 запропоновано гістограму розподілу похибки ідентифікації параметрів багат шарових тонких плівок, отриману за результатами серії обчислювальних експериментів, що відрізняються їх параметрами та умовами моделювання. Видно, що для традиційних ме-

тодів розподіл є зміщеним в область більших значень похибки та характерний значною варіативністю, що свідчить про нестійкість результатів у разі зміни умов задачі. Для чисельних методів спостерігається певне покращення точності, однак розподіл залишається достатньо широким, що вказує на залежність результатів від вибору параметрів моделювання та обмежену узагальнювальну здатність.

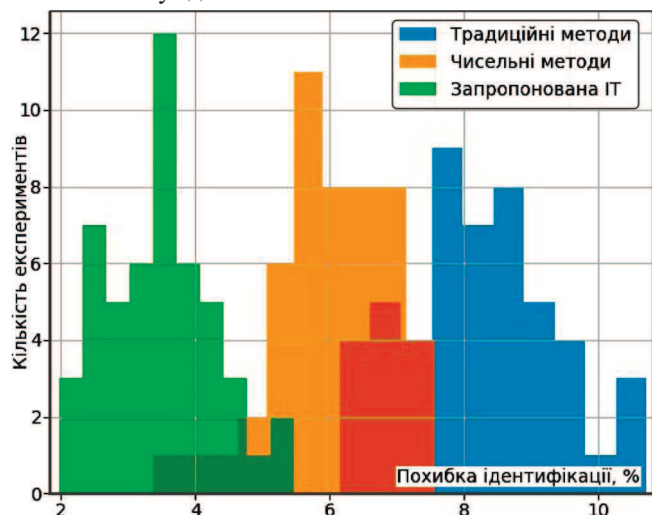


Рис. 5. Порівняння похибки ідентифікації параметрів багатошарових тонких плівок для різних методів / Comparison of the identification error of multilayer thin film parameters for different methods

Натомість, для розробленої інформаційної технології розподіл похибки є компактнішим і зосередженим у діапазоні менших значень, що свідчить про зниження чутливості результатів до варіацій вхідних даних та підвищення стійкості процесу ідентифікації параметрів багатошарових тонких плівок. Зменшення дисперсії розподілу підтверджує стабільність роботи розробленої інформаційної технології за умов різномірних експериментальних сценаріїв. Отримані результати демонструють, що використання засобів адаптивної організації обчислювальних процесів та інтеграції різномірних моделей дає змогу забезпечити не тільки підвищення середньої точності, але й покращення відтворюваності результатів.

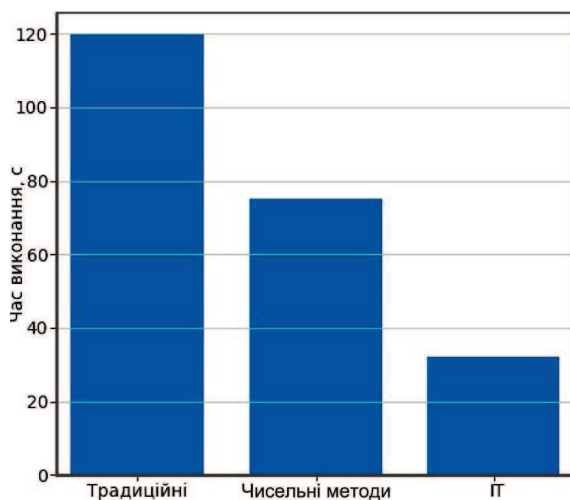


Рис. 6. Порівняння тривалості виконання обчислень для різних методів спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок / Comparison of computational times for different spectral analysis and parametric synthesis methods

На рис. 6 зображено порівняння тривалості виконання обчислень для різних методів спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок. Тривалість обчислень для тонких плівок найбільше залежить від обраного математичного методу: найпростіші формули дають відповідь за частки секунди, а складний пошук структури через комп'ютерний перебір може тривати годинами.

Отримані результати демонструють істотне зменшення тривалості виконання обчислень за використання інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок, що досягається за рахунок адаптивного вибору моделей та паралельної організації обчислювальних процесів.

На рис. 7 зображено порівняння збіжності алгоритмів параметричного синтезу багатошарових тонких плівок для традиційних методів та розробленої інформаційної технології.

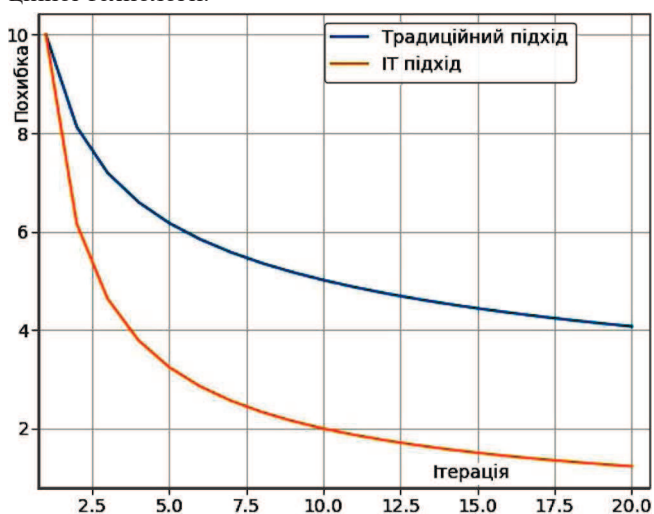


Рис. 7. Порівняння збіжності алгоритмів параметричного синтезу багатошарових тонких плівок для традиційних методів та розробленої інформаційної технології / Comparison of the convergence of parametric synthesis algorithms for multilayer thin films using traditional methods and the developed information technology

Крива збіжності для розробленої інформаційної технології характерна швидшим зменшенням похибки, що підтверджує ефективність реалізованих засобів адаптивного керування обчислювальним процесом та покращену стійкість розв'язання задачі.

Отже, у процесі експериментального дослідження проведено оцінювання ефективності розробленої інформаційної технології у задачах спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок. Порівняння здійснювалося з традиційними методами та класичними чисельними методами. Результати показали, що використання розробленої інформаційної технології забезпечує істотне зменшення похибки ідентифікації параметрів багатошарових тонких плівок. Зокрема, середнє значення похибки знижується від 8-9 % – для традиційних методів до 3-4 % – за використання розробленої інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок. Аналіз обчислювальної ефективності свідчить про зменшення тривалості виконання обчислень більш ніж у 2 рази за рахунок реалізації засобів адаптивної організації обчислювальних процесів та використання розроблених гібридних фізико-нейромереже-

вих моделей у складі інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок. Дослідження збіжності алгоритмів оптимізації параметрів моделі показало, що технологія характеризується швидшою стабілізацією розв'язку, що підтверджує ефективність засобів адаптивного керування обчислювальним процесом.

Новизна роботи полягає у розробленні інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок, а також супутніх засобів організації обчислювальних процесів, яка відрізняється інтеграцією фізичних, чисельних та нейромережових моделей у єдине адаптивне обчислювальне середовище з динамічним розподілом обчислювальних ресурсів, що забезпечує підвищення ефективності та масштабованості обчислень.

Унікальність дослідження полягає у розробленні інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових оптичних структур, що інтегрує фізично обґрунтовані моделі спектрального аналізу із засобами адаптивної організації обчислювальних процесів. На відміну від наявних рішень, розроблена технологія поєднує вибір моделі, процес ідентифікації параметрів багатошарових тонких плівок та керування обчисленнями в єдину узгоджену структуру, що забезпечує підвищення ефективності розв'язання обернених задач. Додатковою відмінністю є використання адаптивних засобів керування обчисленнями, які дають змогу динамічно змінювати параметри обчислювального процесу залежно від характеристик вхідних даних.

Щодо переваг, розроблена інформаційна технологія забезпечує підвищення точності ідентифікації параметрів багатошарових тонких плівок за рахунок комплексного використання фізичних моделей та ітераційних методів оптимізації параметрів моделі. Реалізовані адаптивні засоби організації обчислювальних процесів дають змогу зменшити обчислювальні витрати та підвищити швидкодію. Важливою перевагою є підвищена стійкість до варіацій вхідних даних, що забезпечує стабільність результатів за різних умов моделювання. Інтегрована структура розробленої інформаційної технології сприяє її масштабованості та можливості подальшого розширення.

До недоліків можна віднести підвищену складність реалізації, пов'язану з необхідністю узгодження різноманітних моделей і алгоритмів у межах єдиної системи. Окрім цього, ефективність інформаційної технології частково залежить від якості початкових наближень та вибору параметрів адаптивних процедур, що може потребувати додаткового налаштування. Обчислювальна модель також залишається чутливою до систематичних похибок у вхідних спектральних даних. Обмеження інформаційної технології полягають у тому, що вона орієнтована на аналіз плоскопаралельних багатошарових тонкоплівкових структур і може потребувати модифікації для випадків складних геометрій або неоднорідних середовищ. Використання класичних моделей хвильової оптики обмежує точність у разі сильного розсіювання або нелінійних ефектів. Крім цього, застосування інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових оптичних структур передбачає наявність достатньо інформативних спектральних даних, що може обмежувати її ефективність у задачах із високим рівнем шуму або неповними вимі-

рюваннями. Незважаючи на зазначене вище, розроблена інформаційна технологія демонструє істотні переваги у задачах спектрального аналізу та ідентифікації параметрів багатошарових оптичних структур і її можна розглядати як основу для подальшого розвитку нейромережових систем оброблення спектроскопічних даних.

Перспективи подальших етапів дослідження пов'язані з розширенням функціональних можливостей розробленої інформаційної технології та підвищенням її універсальності. Зокрема, доцільним є поширення підходу у разі неоднорідних і нелінійних багатошарових тонкоплівкових структур, а також урахування ефектів розсіювання та анізотропії середовищ. Окремим напрямом є інтеграція нейромережових методів для розв'язання обернених задач спектроскопії, що дасть змогу підвищити швидкість ідентифікації параметрів багатошарових тонких плівок та зменшити залежність від початкових наближень. Важливим також є розвиток гібридних обчислювальних методів із використанням паралельних та розподілених обчислень для опрацювання великих обсягів спектральних даних. Подальші дослідження можуть бути спрямовані на вдосконалення адаптивних засобів керування обчислювальним процесом, зокрема – автоматизацію вибору моделей і параметрів їх оптимізації. Практичний інтерес становить розроблення програмних засобів на основі цієї інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових оптичних структур для використання у прикладних задачах оптоелектроніки та матеріалознавства.

Обговорення результатів дослідження. Отримані результати дослідження свідчать, що розроблена інформаційна технологія спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок забезпечує підвищення ефективності організації обчислювальних процесів завдяки поєднанню фізичних моделей, чисельних методів та елементів машинного навчання в єдиному адаптивному середовищі.

У дослідженні [16] автори розглянули сучасні методи для оптимізації багатошарових тонкоплівкових структур із використанням еволюційних алгоритмів та чисельного моделювання. Показано, що такі методи забезпечують високу точність параметричного синтезу багатошарових тонких плівок, але характерні значними обчислювальними витратами у разі збільшення кількості параметрів структури.

У роботі [18] досліджено застосування гібридних алгоритмів оптимізації моделей для задач проектування фотонних структур. Тут автори відзначають, що поєднання чисельних методів із алгоритмами машинного навчання дає змогу скоротити час пошуку оптимального розв'язку, проте проблема адаптивного вибору моделей залишається недостатньо опрацьованою.

У роботі [17] проаналізовано використання фізично-інформованих нейронних мереж у задачах електромагнітного моделювання. Отримані результати демонструють підвищення точності апроксимації складних фізичних процесів, однак запропоновані рішення орієнтовані переважно на окремі задачі моделювання та не враховують комплексної організації обчислювальних процесів.

У дослідженні [4] автори розглянули методи пришвидшення процесу спектрального аналізу багатошарових оптичних структур на основі сурогатних моделей машинного навчання, що виконують апроксимацію

спектрального відгуку. Показано, що використання апроксимаційних нейромережових моделей дає змогу істотно зменшити час обчислень, однак точність результатів значною мірою залежить від обсягу та якості навчальної вибірки.

У роботі [14] досліджено сучасні програмні платформи для моделювання фотонних та нанофотонних систем, де вказують на ефективність інтеграції чисельних методів із засобами оптимізації параметрів моделі, проте більшість наявних систем мають обмежені можливості адаптивного керування обчислювальними ресурсами.

У роботі [3] запропоновано метод багатокритеріальної оптимізації тонкоплівкових структур із використанням паралельних обчислень. Отримані результати підтверджують можливість скорочення часу розрахунків, однак застосування таких підходів потребує значних апаратних ресурсів і складної організації обчислювального середовища.

У дослідженні [2] автори проаналізували застосування методів глибинного навчання для обернених задач фотоніки. Показано, що нейромережові моделі здатні ефективно прогнозувати спектральні характеристики складних структур, проте їх використання супроводжується ризиком втрати точності поза межами навчальної вибірки.

У роботі [5] розглянуто адаптивні методи організації обчислювальних процесів у задачах чисельного моделювання фізичних систем. Автори відзначають, що адаптивне керування вибором моделей та алгоритмів оптимізації дає змогу підвищити ефективність використання обчислювальних ресурсів, водночас питання інтеграції таких методів у задачах спектрального аналізу багатошарових тонкоплівкових структур залишаються недостатньо дослідженими.

Отже, результати порівняльного аналізу свідчать, що сучасні методи спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок здебільшого орієнтовані або на підвищення точності моделювання, або на скорочення тривалості обчислень. Водночас, недостатньо уваги приділено комплексній інтеграції фізичних, чисельних і нейромережових методів у межах єдиного адаптивного інформаційного середовища. Це підтверджує доцільність проведення дослідження, спрямованого на розроблення інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових оптичних структур.

Отже, внаслідок виконаної роботи можна сформулювати такі наукову новизну та практичну значущість результатів дослідження.

Наукова новизна отриманих результатів дослідження – отримала подальший розвиток методика спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок, яка, на відміну від наявних методик, інтегрує фізичні методи, чисельні та нейромережові моделі в єдине адаптивне обчислювальне середовище з динамічним керуванням вибором моделей і алгоритмів параметричної оптимізації, що сукупно забезпечує підвищення точності та стійкості розв'язання задач параметричного синтезу багатошарових оптичних структур.

Практична значущість результатів дослідження – можна застосувати для підвищення ефективності чисельного моделювання та ідентифікації параметрів ба-

гатошарових тонких плівок, що дає змогу зменшити обчислювальні витрати, скоротити тривалість розрахунків та підвищити точність спектрального аналізу, а також можна застосувати під час розроблення програмних систем для задач оптоелектроніки та матеріалознавства.

Висновки / Conclusions

Розроблено методику спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок і засобів організації обчислювальних процесів у її межах, що забезпечило підвищення ефективності, адаптивності та масштабованості обчислень за рахунок узгодженого використання різномірних моделей і алгоритмів. За результатами проведеного дослідження можна зробити такі основні висновки.

1. Розроблено засоби організації обчислювальних процесів у межах інформаційної технології спектрального аналізу та параметричного синтезу багатошарових тонких плівок, яка забезпечує інтеграцію фізичного моделювання спектральних характеристик, чисельних методів та адаптивних механізмів оптимізації в межах єдиного обчислювального середовища.
2. Проведено різні спостереження обчислювального експерименту для дослідження ефективності розробленої інформаційної технології у задачах спектрального аналізу та параметричної ідентифікації багатошарових тонкоплівкових структур, які підтвердили підвищення точності та стійкості обчислювальних процесів.
3. Встановлено, що використання адаптивного керування вибором моделей та параметрів обчислення дає змогу знизити середню похибку ідентифікації параметрів багатошарових оптичних структур до 2,3 %, що забезпечує покращення результатів на 40-60 % порівняно з традиційними підходами.
4. З'ясовано, що застосування розроблених засобів адаптивної організації обчислювальних процесів дає змогу підвищити швидкість більш ніж у 2 рази та скоротити час виконання обчислень до 35 % завдяки оптимізації процедур параметричного синтезу багатошарових тонких плівок та зменшенню кількості ітерацій.
5. Запропоновано можливість практичного застосування розробленої інформаційної технології у задачах спектроскопії, оптоелектроніки, моделювання оптичних покриттів і проєктування функціональних тонкоплівкових структур, а також для подальшого розвитку інтелектуальних систем оброблення спектральних даних.

References

1. Bilak, Y., Saibert, F., & Reblan, A. (2026). Hybrid model for spectral analysis of multilayered structures with fractal boundaries: A combination of RCWA and FDTD. *Recent Advances in Computer Science and Communications*, 19(3). <https://doi.org/10.2174/0126662558387349250422062604>
2. Deng, Y., Ren, S., Malof, J., & Padilla, Willie J. (2022). Deep inverse photonic design: A tutorial. *Photonics and Nanostructures – Fundamentals and Applications*, 52, article ID 101070. <https://doi.org/10.1016/j.photonics.2022.101070>
3. Hammond, A. M., Chen, Z., Lin, Z., & others. (2023). Inverse-designed lithium niobate nanophotonics. *ACS Photonics* 10(4), 1019–1026. <https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.3c00040>
4. Hao, Y., Liuge, D., Xiao, X., & Jia, Zh. (2024). Deep learning methods for solving non-uniqueness of inverse design in photonics. *Optics Communications*, 554, article ID 130122. <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2023.130122>
5. Khaireh-Walieh, A., Langevin, D., Bennet, P., & others. (2023). A newcomers guide to deep learning for inverse design in nanophotonics. *arXiv*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2307.08618>
6. Lalau-Keraly, C. M., Bhargava, S., Miller, O. D., & Yablono-vitch, E. (2013). Adjoint shape optimization applied to electro-

- magnetic design. *Optics Express*, 21, 21693–21701. <https://doi.org/10.1364/OE.21.021693>
7. Ma, W., Liu, Z., Kudyshev, Z. A., Boltasseva, A., Cai, W., & Liu, Y. (2020). Deep learning for the design of nanophotonic structures. *Nature Photonics*, 14(2), 77–90. <https://doi.org/10.1038/s41566-020-0685-y>
 8. Macleod, H. A. (2010). *Thin-Film Optical Filters* (4th ed.). CRC Press, 240 p. <https://doi.org/10.1201/9781420073034>
 9. Molesky, S., et al. (2018). Inverse design in nanophotonics. *Nature Photonics*, 12, 659–670. <https://doi.org/10.1038/s41566-018-0246-9>
 10. Oskooi, A. F., Roundy, D., Ibanescu, M., Bermel, P., Joannopoulos, J. D., & Johnson, S. G. (2010). MEEP: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method. *Computer Physics Communications*, 181(3), 687–702. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2009.11.008>
 11. Piggott, A. Y., Petykiewicz, J., Su, L., & Vučković, J. (2017). Fabrication-constrained nanophotonic inverse design. *Scientific Reports*, 7, article ID 1786. <https://doi.org/10.1038/s41598-017-01939-2>
 12. Salgado-Conrado, L., et al. (2024). A review of simulation tools for thin-film solar cells. *Materials*, 17(21), article ID 5213. <https://doi.org/10.3390/ma17215213>
 13. Sarkar, S., Ji, A., Jermain, Z., Lipton, R., Brongersma, M., Dayal, K., & Noh, H. Y. (2023). Physics-informed machine learning for photonics and optical materials. *Advanced Photonics Research*, 4, article ID 2300158. <https://doi.org/10.1002/adpr.202300158>
 14. So, S., Badloe, T., Noh, J., Rho, J., & Bravo-Abad, J. (2020). Deep learning enabled inverse design in nanophotonics. *Nanophotonics*, 9(5), 1041–1057. <https://doi.org/10.1515/nanoph-2019-0474>
 15. Southwell, W. H. (1983). Gradient-index antireflection coatings. *Optics Letters*, 8(11), 584–586. <https://doi.org/10.1364/OL.8.000584>
 16. Wiecha, P. R., Arbouet, A., Girard, C., & Muskens, O. L. (2021). Deep learning in nano-photonics: Inverse design and beyond. *Photonics Research*, 9(5), B182–B200. <https://doi.org/10.1364/PRJ.415960>
 17. Yao, K., Unni, R., & Zheng, Y. (2018). Intelligent nanophotonics: Merging photonics and artificial intelligence at the nanoscale. *Nanophotonics*, 8, 339–366. <https://doi.org/10.1515/nanoph-2018-0183>
 18. Yeung, C., Pham, B., Tsai, R., Piggott, A. Y., Raman, A., & Soljačić, M. (2022). DeepAdjoint: An all-in-one photonic inverse design framework integrating data-driven machine learning with optimization algorithms. *ACS Photonics*, 9(12), 4385–4394. <https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.2c00968>

Yu. Yu. Bilak, A. M. Reblan

Uzhhorod National University, Uzhhorod, Ukraine

SPECTRAL ANALYSIS AND PARAMETRIC SYNTHESIS OF MULTILAYER OPTICAL STRUCTURES WITH ADAPTIVE ORGANISATION OF COMPUTATIONAL PROCESSES

The study considers computational process organization tools for solving inverse spectroscopy problems in multilayer optical systems under conditions of limited data and computational resources. Wave optics methods, in particular the transfer matrix method and its extensions, were used in combination with numerical methods for model parameter optimization and data-driven components for adaptive control of computational processes. The developed information technology for spectral analysis and parametric synthesis of multilayer thin films integrates heterogeneous models within a unified computational environment that dynamically adjusts model selection, spectral resolution, and parametric optimization strategies depending on the problem conditions. As a result, a consistent combination of direct spectral modeling and inverse parameter identification of multilayer optical structures is achieved within a closed computational loop. It was established that conventional numerical methods are characterized by high sensitivity to input data variations and significant computational costs, whereas their hybrid integration improves computational stability and efficiency. In addition, the use of adaptive mechanisms for informative spectral region selection and dynamic refinement of computational parameters makes it possible to identify informative spectral intervals, reduce the dimensionality of spectral analysis problems, and improve algorithm convergence. Computational experiments involving more than 120 scenarios demonstrated a reduction in the average parameter identification error of multilayer optical structures to approximately 2.3 %, compared to 3.9–5.8 % for baseline methods. At the same time, computation time was reduced by up to 35 %, while convergence was achieved within 12–15 iterations. Furthermore, the integration of neural network components improves the generalization capability of the models and accelerates the approximation of nonlinear dependencies. The obtained results demonstrate improved stability, scalability, and efficiency of computational resource utilization. The developed information technology can be applied to the analysis and parameter reconstruction of complex multilayer thin-film structures. Future research should focus on extending the information technology for spectral analysis and parametric synthesis to nonlinear and inhomogeneous media, as well as on integration with physics-informed neural networks. In addition, the developed information technology can serve as a basis for creating neural-network computational systems for the design of advanced optical materials.

Keywords: information technology; inverse problems; wave optics; transfer matrix method; hybrid models; neural network approximation; parameter identification of multilayer thin films; computational efficiency; computational technology tools.