

УДК (UDC) 004.8:535.32:544.272

**Білак  
Юрій Юрійович**

канд. фіз.-мат. наук, доцент, зав. кафедри програмного забезпечення систем ДВНЗ «Ужгородський національний університет», м. Ужгород, пл. Народна, 3, Україна, 88000  
e-mail: [yuriy.bilak@uzhnu.edu.ua](mailto:yuriy.bilak@uzhnu.edu.ua)  
<https://orcid.org/0000-0001-5989-1643>

## Гібридна нейромережева модель CNN+TRANSFORMER для прогнозування спектральних властивостей багатошарових структур

**Актуальність.** Прогнозування спектральних характеристик багатошарових матеріалів є ключовим завданням у фотоніці, оптоелектроніці та матеріалознавстві, оскільки точність моделювання визначає ефективність технологічних процесів і якість функціональних покриттів. Класичні чисельні методи, забезпечують надійність розрахунків, але залишаються обчислювально затратними при великій кількості варіацій параметрів. Це зумовлює необхідність застосування гібридних архітектур, що поєднують фізичне моделювання та можливості сучасних нейронних мереж.

**Мета.** Розробити та дослідити гібридну нейромережеву модель на основі архітектури CNN+Transformer для прогнозування спектральних характеристик багатошарових структур та оцінити її ефективність порівняно з класичними і нейромережевими методами.

**Методи дослідження.** Для генерації навчальних даних використано ТММ у діапазоні 300–800 нм. Для оптимізації спектрального представлення застосовано РСА, що дозволило зменшити кількість спектральних точок при збереженні 98% дисперсії. Нейромережеву модель побудовано як поєднання згорткових шарів для аналізу локальних інтерференційних особливостей та трансформерного блоку для виявлення глобальних залежностей. Навчання здійснювалося з використанням функції втрат, яка враховує точність прогнозу та регуляризаційні складові, а також методів валідації на незалежній тестовій вибірці.

**Результати.** Розроблена модель забезпечила високу точність прогнозування. Коефіцієнт детермінації становив  $R^2=0.99$ , а середньоквадратична похибка не перевищувала 4%. Порівняння з альтернативною архітектурою CNN+LSTM продемонструвало перевагу трансформерної архітектури, яка краще відтворює глобальні закономірності у спектрах та характеризується швидшим інференсом. Забезпечено узгодженість прогнозів із ТММ-моделюванням, а також стійкість до шумових варіацій експериментальних даних.

**Висновки.** Розроблена гібридна модель CNN+Transformer підтвердила ефективність для задач прогнозування спектральних характеристик багатошарових структур. Поєднання фізичних методів моделювання з глибокими нейронними мережами забезпечує високу точність, швидкість і здатність до узагальнення. Результати свідчать про перспективність архітектури для розробки швидких інструментів оптичного аналізу та оптимізації структури тонких плівок. Подальші дослідження можуть бути спрямовані на розширення набору навчальних даних, урахування нелінійних ефектів та інтеграцію моделі в автоматизовані системи проектування оптичних матеріалів.

**Ключові слова:** нейронні мережі, прогнозування спектральних властивостей, обчислювальне моделювання, оптимізація, аналіз даних, тонкі плівки.

**Як цитувати:** Білак Ю. Ю. Гібридна нейромережева модель CNN+TRANSFORMER для прогнозування спектральних властивостей багатошарових структур. *Вісник Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна, серія Математичне моделювання. Інформаційні технології. Автоматизовані системи управління*. 2025. вип. 68. С.6-19. <https://doi.org/10.26565/2304-6201-2025-68-01>

**How to quote:** Yu. Bilak, “Hybrid Neural Network Model Based on CNN+Transformer for Predicting the Spectral Properties of Multilayer Structures”, *Bulletin of V. N. Karazin Kharkiv National University, series Mathematical modelling. Information technology. Automated control systems*, vol. 68, pp. 6-19, 2025. <https://doi.org/10.26565/2304-6201-2025-68-01> [in Ukrainian]

### 1. Вступ

Сучасні прилади генерують великі обсяги спектральних даних, обробка яких вимагає нових технологій для аналізу, особливо через перекриття піків і наявність шумів, що маскують важливі

сигнали. Традиційні методи, такі як метод головних компонент (PCA) та метод часткових найменших квадратів (PLS), не завжди ефективні для великих обсягів даних, що ускладнює прогнозування [1]. Впровадження методів глибокого навчання дає змогу значно підвищити точність і швидкість обробки спектральних даних, автоматично виділяючи ключові ознаки і адаптуючись до змін, що виникають в процесі проведення експерименту [2]. Однак, основними проблемами залишаються залежність від якості навчальних наборів даних, а також складність обробки сигналів з низьким співвідношенням сигнал/шум. Також, не слід забувати і про проблему перекриття спектральних смуг [3]. Для вирішення вище вказаних завдань, пропонується використання штучно згенерованих спектральних даних, що підвищують стійкість моделей до варіативності [4]. Перспективними методами подолання цих обмежень є використання гібридних архітектур, а саме – комбіноване використання згорткових нейронних мереж (CNN) для аналізу локальних ознак спектрів із рекурентними мережами (LSTM) [5] чи трансформерами (Transformer) для обробки глобальних закономірностей, що дозволяє враховувати послідовні залежності між частинами спектра. Практична реалізація подібних гібридних архітектур відкриває нові можливості для застосування спектроскопії в різних галузях, таких як фармацевтичний аналіз, екологічний моніторинг та хімічна промисловість.

## 2. Огляд літератури

У роботах, що присвячені застосуванню глибоких нейронних мереж для прогнозування спектральних характеристик багаточарових структур, наголошується на тому, що ці моделі мають високу точність у задачах нелінійного моделювання. Однак, вони потребують значних обчислювальних ресурсів і мають місце проблемами адаптації до умов із високим рівнем шуму та змінними експериментальними параметрами, що пов'язано з залежністю від якості навчальних наборів [1-3]. Поряд з цим, виклики щодо адаптації до змінних умов і шумів, також слід враховувати, що частково вирішують за допомогою CNN, які ефективно обробляють локальні спектральні ознаки [4,5]. Поряд з цим, CNN мають обмеження щодо врахування глобальних закономірностей спектрів, що може бути вирішено шляхом використання гібридних архітектур, як приклад – поєднання CNN із рекурентними нейронними мережами (LSTM) для обробки глобальних залежностей [6]. В наш час, для покращення точності прогнозів, широко використовують комбіновані архітектури, яким і присвячена дана робота. Так, у працях [7-9] реалізовано поєднання нейронних мереж із генетичними алгоритмами для зменшення розмірності даних і прогнозування концентрації компонентів. Однак, проблема зменшення розмірності даних і перекриття спектральних сигналів залишається відкритою. У роботах [10,11] досліджено застосування гібридних архітектур, а саме CNN-LSTM, для підвищення точності в обробці спектрів із низьким співвідношенням сигнал/шум. Це підтверджує їх ефективність для аналізу даних з урахуванням як локальних, так і глобальних залежностей. У роботах [12-14] розглянуто гібридні архітектури на основі CNN і LSTM для задач прогнозування залишкового ресурсу, мережових атак та медичної сегментації. Показано, що гібридизація значно підвищує точність у порівнянні з традиційними методами, однак прогнозування в умовах складних і змінних даних залишається не вирішеним.

Вище проведений аналіз літературних джерел вказує на існування потреби розробки нових сучасних гібридних архітектур і моделей, зокрема поєднання CNN+Transformer [15-17]. Дану архітектуру вже було апробовано у [15] для медичної сегментації, що дозволило враховувати локальні та глобальні залежності. У [16] використовується колаборативне навчання між CNN і Transformer для покращення точності сегментації в різних контекстах, а у [17] поєднання CNN і Transformer застосовано для прогнозування гемолітичної активності пептидів, що дає змогу виявляти складні закономірності в даних. Загалом, ці дослідження підтверджують перспективність інтеграції CNN+Transformer для обробки складних спектральних даних, що дозволяє значно підвищити точність прогнозів і обробки даних у різних сферах.

*Мета дослідження* – розробка та аналіз нейромережевої моделі для прогнозування спектральних характеристик матеріалів, зокрема з використанням гібридної архітектури CNN+Transformer, з метою підвищення точності та ефективності обчислень.

*Задачі дослідження:*

- Розробити архітектуру та алгоритм роботи нейромережевої моделі CNN+Transformer з урахуванням специфіки спектрального аналізу.

- Реалізувати вибір та оптимізацію конфігурації (через аналіз впливу гіперпараметрів) архітектури для прогнозування спектральних характеристик, з урахуванням специфіки задачі. Додатково порівняти продуктивність моделі засобами визначення найкращої конфігурації за критеріями точності ( $R^2$ , MSE) та швидкості навчання.
- Розробити та дослідити адаптивні методи прогнозування, що передбачають застосування механізмів адаптивного уточнення для підвищення точності в критичних спектральних діапазонах із мінімальними обчислювальними витратами.
- Перевірити стійкість розробленої моделі та реалізувати тестування відібраної конфігурації на різних наборах даних, з урахуванням можливих шумів та варіацій експериментальних умов, оцінити їх здатність до узагальнення та провести порівняльний аналіз.
- Валідувати модель на синтетичних та експериментальних даних.

### 3. Методи та технології

**Об'єкт дослідження. Прийняті припущення та спрощення.** Об'єктом дослідження є нейромережеві моделі для прогнозування фізичних властивостей матеріалів. Особлива увага приділяється архітектурі глибоких нейронних мереж, методам навчання та підбору параметрів, а також аналізу їхньої точності в умовах обмеженого набору експериментальних даних.

При моделюванні складних фізичних залежностей допускається їхня апроксимація лінійними або кусково-лінійними функціями в окремих діапазонах. Навчання моделей здійснюється на обмеженій вибірці експериментальних даних, що потребує використання методів регуляризації та збільшення вибірки. Деякі фізичні параметри, які важко точно виміряти, замінюються середньостатистичними значеннями або апіорними розподілами. Незначні ефекти, що мають малий вплив на результати, такі як незначні флуктуації параметрів середовища, не враховуються в основних розрахунках.

**Формалізація гібридної моделі.** Розроблена модель ґрунтується на поєднанні фізико-математичного моделювання та глибоких нейронних мереж з метою підвищення швидкості та точності прогнозування спектральних характеристик багатошарових структур. На першому етапі здійснюється генерація навчальних даних методом матриці передачі (ТММ), що дозволяє отримати референсні спектри пропускання та відбивання, формалізувати параметри структури й визначити інформативні спектральні точки для зменшення обсягу даних. Попередня обробка включає нормалізацію, згладжування та редукцію розмірності з виділенням ключових параметрів, що найбільше впливають на спектральні властивості. На етапі навчання використовується поєднання згорткових шарів і трансформерних блоків, доповнене регуляризацією та методами домен-адаптації для узгодження синтетичних спектрів із реальними даними. Гібридне прогнозування поєднує швидку оцінку, сформовану нейронною мережею, з динамічною корекцією результатів на основі класичних фізичних розрахунків у тих спектральних точках, де похибка перевищує допустиме значення. Завершальний етап передбачає оцінювання точності моделі, аналіз відхилень та валідацію оптимальної конфігурації з урахуванням обчислювальної ефективності та стійкості до експериментальних варіацій. Зупинимося більш детально на розробці гібридної моделі.

**Генерація навчальних даних.** Отже, для отримання референсних спектрів використано ТММ, який забезпечує точний розрахунок коефіцієнтів пропускання  $T(\lambda)$ , відбивання  $R(\lambda)$  та поглинання  $A(\lambda)$  у багатошарових структурах, залишаючись при цьому достатньо ефективним з погляду обчислювальних витрат. При моделюванні враховано показники заломлення  $n_k(\lambda)$  та товщини окремих шарів  $d_k$ , що формують оптичний шлях хвилі [18]:

$$M_k = \begin{pmatrix} \cos(\delta_k) & \frac{i}{q_k} \sin(\delta_k) \\ iq_k \sin(\delta_k) & \cos(\delta_k) \end{pmatrix}, \quad \delta_k = \frac{2\pi}{\lambda} n_k d_k. \quad (1)$$

Загальна матриця структури визначається добутком:

$$M = \prod_{k=1}^N M_k. \quad (2)$$

Далі коефіцієнти розраховуються за формулами:

$$T(\lambda) = \frac{1}{|M_{11} + M_{12}q_s + M_{21}/q_s + M_{22}|^2}, \quad R(\lambda) = \left| \frac{M_{11} + M_{12}q_s - M_{21}/q_s - M_{22}}{M_{11} + M_{12}q_s + M_{21}/q_s + M_{22}} \right|^2. \quad (3)$$

Спектральний діапазон моделювання обрано у межах 300–800 нм, який охоплює ділянку експериментальних даних та зону виражених інтерференційних ефектів. Товщини шарів варіювалися в межах, характерних для тонкоплівкових систем (50–500 нм), а значення показників заломлення взято з довідкових оптичних констант.

**Попередня обробка даних.** Перед навчанням здійснювалася нормалізація спектрів до інтервалу  $[0,1]$  за формулою:

$$\tilde{Y}(\lambda) = \frac{Y(\lambda) - Y_{\min}}{Y_{\max} - Y_{\min}}. \quad (4)$$

Для зменшення впливу шумів застосовано згладжування Савіцького-Голея [19] та локальну фільтрацію.

Для оптимізації кількості спектральних точок у діапазоні 300–800 нм застосовано PCA, який дозволив виділити ділянки з найбільшою варіабельністю сигналу та сформувати підмножину  $\lambda_k$  з максимальним інформаційним внеском. Це дало змогу відмовитися від автоенкодерів та інших нейромережових методів редукції, спрощуючи модель і запобігаючи перенавчанням. Відібрані спектральні точки за результатами PCA-аналізу приведено у таблиці 1.

Табл. 1. Відібрані спектральні точки за результатами PCA-аналізу (діапазон 300–800 нм)

№ точки	Довжина хвилі $\lambda$ , нм	Вага PCA-компоненти	Інформаційна значущість (%)	Коментар
				Пік локальної варіації у першій головній компоненті
				Максимум PC1 у короткохвильовій підзоні
				Висока чутливість до зміни показника заломлення
				Перелом у PC2, пов'язаний зі зміною товщини шарів
				Точка зміни інтерференційної структури спектра
				Локальний максимум третьої головної компоненти (PC3)
				Стабільна зона спектра з низьким шумовим впливом
				Початок довгохвильового спадання інформативності

Бачимо, що найбільші зміни у спектрах спостерігаються в області 330–450 нм, де інтерференційні ефекти найбільш чутливі до варіацій товщини шарів та показників заломлення. Загальна похибка редукції визначається як частка незбереженої дисперсії:

$$E = 1 - \frac{\sum_{i=1}^k \lambda_i}{\sum_{j=1}^n \lambda_j}, \quad (5)$$

де  $k$  – кількість вибраних компонент. Оптимальне значення  $k$  підбирається таким чином, щоб зберігалася щонайменше 95–98 % дисперсії, що забезпечує точність при суттєвому зменшенні обсягу даних. У результаті, PCA дозволив скоротити кількість спектральних точок з понад 200 до 8 ключових, зберігши 98% дисперсії даних. Це суттєво зменшує розмір навчального набору без втрати фізично значущої інформації. Отриманий набір містить спектри пропускання, відбивання

та поглинання для різних геометричних та оптичних параметрів багат шарових структур, а також відібрані контрольні точки для подальшого навчання моделі CNN+Transformer. У підсумку, таблиця 1 узагальнює результати PCA-аналізу та є універсальною для широкого класу інтерференційних тонкоплівкових систем, включно з тими, що розглядаються у цій роботі.

**Архітектура нейромережевої моделі.** Розроблена архітектура поєднує згорткові шари для локальної обробки та трансформерні блоки для врахування глобальних спектральних залежностей.

*CNN-блок.* Згортка в 1D-CNN визначається як [20]:

$$h_j = \sigma \left( \sum_{i=1}^{k-1} \omega_i x_{j+i} + b \right), \quad (6)$$

де  $h_j$  – вихідний елемент після згортки,  $X_{j+i}$  – значення спектру у вікні розміру  $k$ ,  $W_i$  – фільтр (ядро згортки),  $b$  – зміщення (bias),  $\sigma(\cdot)$  – активаційна функція (ReLU). Початкові два згорткові шари виділяють локальні особливості спектра:

$$F_i = \text{ReLU}(W_i * X + b_i). \quad (7)$$

Ці шари забезпечують виявлення локальних піків, сплесків і дрібномасштабних інтерференційних осциляцій.

Наступним етапом реалізується агрегація ознак за допомогою *pooling*, що зменшує розмірність фільтрованого спектра, який CNN обробляє далі, тобто:

$$p_j = \max\{h_j, h_{j+1}, \dots, h_{j+k}\} \quad (8)$$

де  $h_j$  – активації після згортки,  $k$  – розмір вікна *pooling*. Цей етап забезпечує фокусування моделі на ключових інтерференційних піках спектра та зменшує розмірність ознак без втрати критично важливої інформації.

*Transformer-блок.* Для вхідного спектра  $X$  формуються три матриці, а саме – матриця запитів  $Q = XW_Q$ , матриця ключів  $K = XW_K$  та матриця значень  $V = XW_V$ , де  $W_Q, W_K, W_V$  – параметри проєкції. Механізм самоуваги обчислює міру взаємозв'язку між спектральними точками через скалярний добуток запитів і ключів [21], нормований на  $\sqrt{d_k}$ , після чого отримані коефіцієнти ваг застосовуються до матриці значень:

$$\text{Attention}(Q, K, V) = \text{softmax} \left( \frac{QK^T}{\sqrt{d_k}} \right) V. \quad (9)$$

Дане представлення дозволяє моделі враховувати як локальні, так і далекі кореляції у спектрі, що є критично важливим для точного прогнозування спектральних характеристик багат шарових структур.

Після блоку трансформера використовується проєкційний шар, який перетворює багатовимірне представлення на вихідний спектральний простір.

Нехай  $H$  – вихід трансформера, тоді проєкція визначається як:

$$\hat{Y} = W_{out} H + b_{out}, \quad (10)$$

де  $W_{out}$  та  $b_{out}$  – параметри вихідного лінійного шару. Цей етап забезпечує приведення високорівневих ознак, сформованих механізмом самоуваги, до фізично інтерпретованих значень спектральних характеристик.

*Data Augmentation для узагальнення.* Щоб модель добре працювала на реальних експериментах, додано штучний шум у спектри  $X' = X + \epsilon$ ,  $\epsilon \sim N(0, \sigma^2)$ . Це дозволяє моделі бути стійкою до значних змін у реальних даних.

**Метод навчання та валідація.** Датасет поділено у пропорції 70% / 15% / 15% (*train / validation / test*). Функція втрат комбінує середньоквадратичну помилку з регуляризациєю [22]:

$$L = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \|Y_i - \hat{Y}_i\|^2 + \lambda_1 \sum_{j=1}^p \theta_j^2 + \lambda_2 \sum_{j=1}^p |\theta_j|, \quad (11)$$

де перший доданок контролює точність прогнозу, другий і третій запобігають перенавчанню.

Додатково було використано метрику якості прогнозування:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum (Y_i - \hat{Y}_i)^2}{\sum (Y_i - \bar{Y}_i)^2}. \quad (12)$$

Оптимізація здійснювалася методом AdamW, що дозволило покращити стабільність градієнтів для спектральних даних. Перехресна валідація ( $k=5$ ) використана для оцінки узагальнювальної здатності.

#### 4. Результати та обговорення

**Гібридна фізично-нейромережева корекція (адаптивний метод).** Адаптивний метод дозволяє виконувати класичний розрахунок лише в тих діапазонах, де нейромережа демонструє недостатню точність. Це реалізується через аналіз спектральних характеристик за розробленим алгоритмом, який наведено на рис. 1.

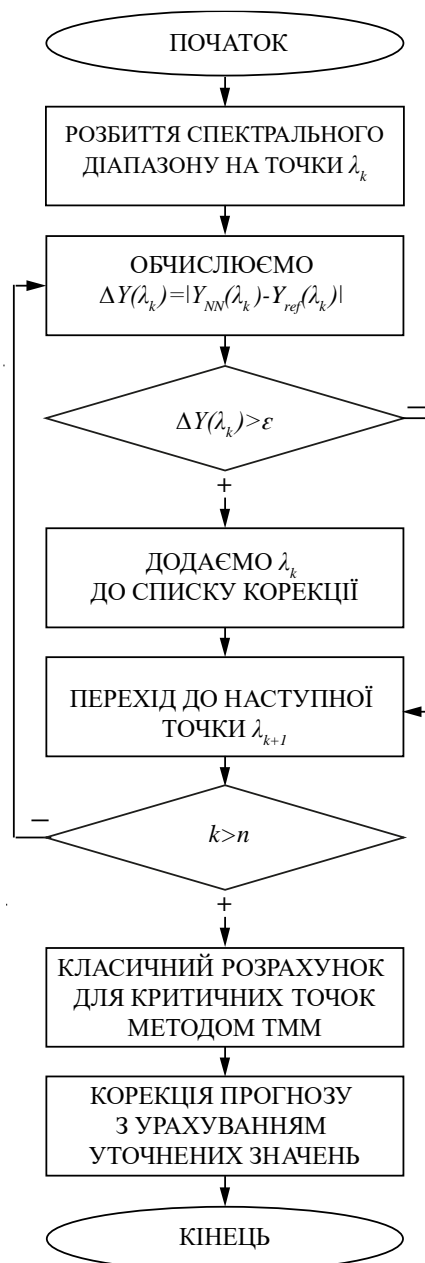


Рис. 1 Алгоритм адаптивного уточнення спектральних прогнозів  
Fig. 1 Adaptive refinement algorithm for spectral predictions

У даному алгоритмі розбиваємо спектральний діапазон на дискретні точки  $\lambda_k$ , порівнюємо значення  $\hat{Y}(\lambda)$  (далі використовуватимемо позначення  $Y_{NN}(\lambda_k)$ ) та  $Y_{ref}(\lambda_k)$ , і визначаємо похибку за формулою

$$\Delta Y(\lambda_k) = \left| \hat{Y}(\lambda_k) - Y_{ref}(\lambda_k) \right|. \quad (13)$$

Етап уточнення запускається, якщо  $\Delta Y(\lambda_k) > \varepsilon$ . Множина точок, які вимагають додаткового фізичного розрахунку  $S = \{\lambda_k: \Delta Y(\lambda_k) > \varepsilon\}$ . Для всіх  $\lambda_k \in S$  проводиться точний розрахунок методом ТММ, а прогноз коригується за формулою:

$$Y_{final}(\lambda_k) = \alpha Y_{ТММ}(\lambda_k) + (1 - \alpha) \hat{Y}(\lambda_k), \quad (14)$$

де  $\alpha$  – ваговий коефіцієнт адаптації. Це дозволяє мінімізувати обчислювальні витрати, застосовуючи фізичне моделювання лише у точках, де це необхідно. Гібридний механізм адаптивної корекції гарантує стабільну роботу моделі навіть у складних випадках.

**Алгоритм роботи гібридної моделі.** Для розробленої моделі було реалізовано алгоритм (рис. 2), що поєднує нейромережі та класичні фізичні методи для точного прогнозування коефіцієнтів пропускання та відбивання багатопарових структур.

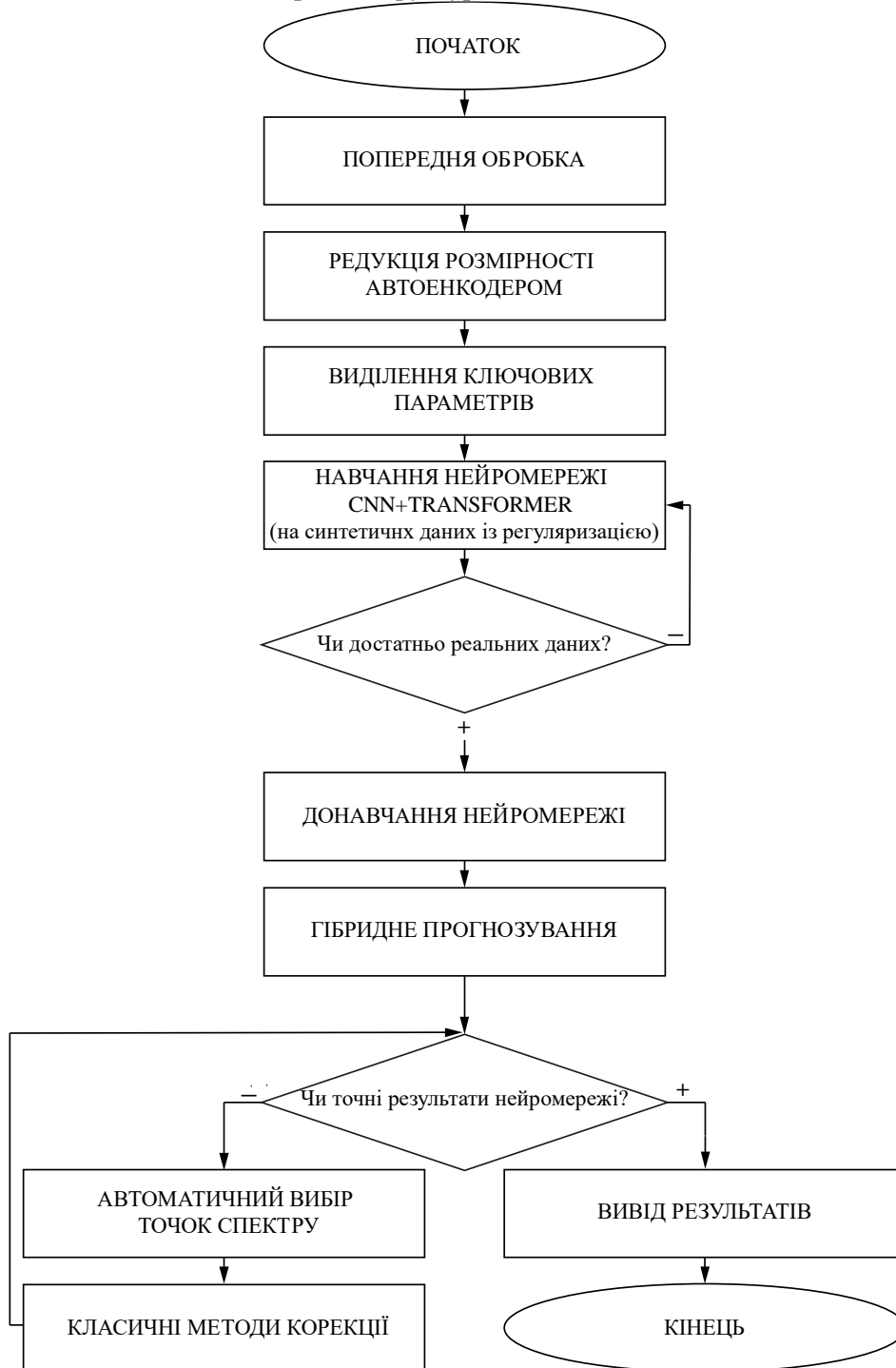


Рис. 2 Алгоритм гібридної моделі

Fig. 2 Hybrid model algorithm

Програмна реалізація моделі CNN+Transformer здійснена на основі фреймворку TensorFlow та бібліотеки Keras для побудови та навчання нейромережі. Для роботи з даними використовувалися NumPy та Pandas, а для візуалізації результатів – Matplotlib. Оптимізація та навчання моделі проводилися за допомогою оптимізатора AdamW, а для підвищення узагальнюваності використовувалася регуляризація L1/L2.

**Основні кроки алгоритму.** Робота моделі починається з генерації синтетичних навчальних даних методом ТММ, де для кожної багатошарової структури обчислюються поля у шарах, формується матриця структури (формули (1)-(2)) та визначаються спектральні коефіцієнти пропускання, відбивання і поглинання за формулою (3). Отримані спектри нормалізуються за (4), очищуються від шуму та проходять редукцію розмірності через PCA, що дозволяє зберегти інформативні ділянки спектра та зменшити кількість контрольних точок (табл. 1). На етапі навчання модель отримує параметри структур (товщини  $d_k$ , показники заломлення  $n_k(\lambda)$ ) і відповідні спектри  $T(\lambda)$ ,  $R(\lambda)$ . Локальні залежності спектра вилучаються згортковими шарами згідно з формулою (9), тоді як глобальні зв'язки між спектральними точками формуються трансформером, механізм уваги якого описано формулою (11). Параметри моделі оптимізуються через комбіновану функцію втрат, а точність додатково контролюється метрикою (12). Для узагальнення використовується шумове розширення даних  $X'=X+\varepsilon$ . Модель тренується на синтетичних даних (ТММ) та адаптується до реальних за допомогою transfer learning і домен-адаптації. Після навчання модель прогнозує спектри  $Y=[T(\lambda), R(\lambda)]$ .

Далі працює ключовий елемент – **гібридна фізично-нейромережева корекція**. Похибка між прогнозом нейромережі  $Y_{NN}$  та еталонними/чисельними значеннями  $Y_{ref}$  визначається формулою (13). Якщо  $\Delta Y(\lambda_k) > \varepsilon$ , точки заносяться до множини  $S$  критичних довжин хвиль. Тільки для цих  $\lambda_k$  виконується точний ТММ-розрахунок, після чого прогноз оновлюється ваговою комбінацією згідно з формулою (14). Таким чином, модель працює в адаптивному режимі: для більшої частини спектра використовується швидкий нейромережевий прогноз, тоді як точні фізичні розрахунки формул (1)–(5) застосовуються лише для обмеженої множини точок  $S$ , де похибка перевищує поріг. Це дає змогу досягти точності фізичних моделей за набагато менших обчислювальних витрат.

Алгоритм уточнення працює відповідно до блок-схеми на рис. 1, де демонструється повний цикл:

*початкове прогнозування* → *оцінка похибки* → *вибір критичних точок* →  
*ТММ-корекція* → *оновлення спектра*

Завершальний результат – високоточний прогноз спектральних характеристик, що поєднує переваги класичного моделювання та нейромережевих методів. Отже, унікальність розробленого гібридного алгоритму полягає в тому, що він поєднує швидкість машинного навчання з точністю класичних методів, забезпечуючи оптимальний баланс між продуктивністю та точністю.

**Оптимізація конфігурації нейромережі CNN+Transformer.** Для вибору найкращої конфігурації CNN+Transformer було протестовано різні значення гіперпараметрів, які впливають на баланс між точністю та швидкістю обчислень. Кількість шарів варіювалася в діапазоні від 3 до 6, оскільки занадто мала глибина може не забезпечити достатньої складності моделі для точного прогнозування, тоді як надмірна кількість шарів збільшує обчислювальні витрати без значного покращення результату. Кількість нейронів у шарі змінювалася від 128 до 1024, що дозволяє оцінити, як розмірність представлення впливає на здатність моделі до узагальнення. Менша кількість нейронів може не захоплювати всі особливості спектральних залежностей, тоді як надто велика – призводить до перенавчання та значного збільшення часу розрахунків. Кількість епох була обрана в межах від 50 до 300, щоб оцінити, скільки ітерацій навчання достатньо для збіжності моделі. Занадто мала кількість епох може призвести до недостатнього навчання, а надмірне збільшення цього параметра не завжди забезпечує покращення результатів, натомість витрачає більше ресурсів. Час обчислення безпосередньо залежав від складності архітектури та використовувався як один із критеріїв вибору оптимальної конфігурації. Результати числових експериментів наведено у таблиці 2.

Табл. 2 Відібрані варіанти конфігурації нейромережі CNN+Transformer

Table. 2 Selected configuration options for the CNN+Transformer neural network

Параметр	Конфігурація 1	Конфігурація 2	Конфігурація 3
CNN шари	3 Conv1D	4 Conv1D	5 Conv1D
Кількість фільтрів CNN	32, 64, 128	16, 32, 64, 128	64, 128, 256
Розмір ядра згортки	3×1, 5×1	3×1, 5×1, 7×1	5×1, 7×1
Transformer шари	2	3	4
Кількість голів уваги	4	6	8
Функція активації	ReLU	LeakyReLU	ReLU
Dropout (регуляризація)	0.3	0.2	0.3
Оптимізатор	AdamW	RAdam	Adam
Швидкість навчання	0.0005	0.0003	0.0002
R <sup>2</sup> (точність моделі)	0.949	0.982	0.979
MSE (середньоквадратична похибка)	0.00297	0.00171	0.00198
Час навчання (епохи)	100	150	200

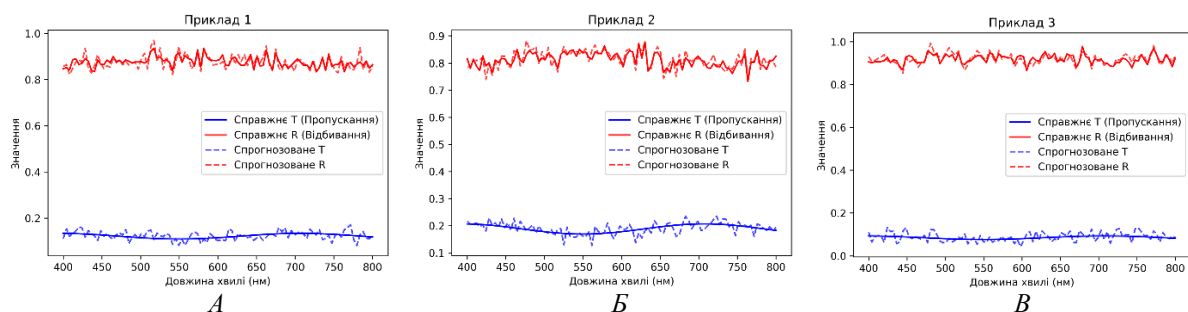
Аналіз результатів наведених у таблиці демонструє те, що конфігурація 2 (4 CNN шари, 3 трансформерні шари, 6 голів уваги, LeakyReLU) досягла найкращої точності  $R^2=0.982$  і найнижчого MSE (0.00171), що робить її оптимальним варіантом. Конфігурація 3 (5 CNN шарів, 4 трансформерні шари, 8 голів уваги) дає схожу точність, але вимагає більше обчислювальних ресурсів. Конфігурація 1 (3 CNN шари, 2 трансформерні шари) є найлегшою, але поступається в точності. У підсумку, конфігурація 2 є найкращим компромісом між точністю та продуктивністю.

**Валідація моделі.** Для перевірки роботи моделі було проведено її валідацію на синтетичних структурах та експериментальних даних. Було обрано три варіанти синтетичних багатошарових структур, що приведені у таблиці 3.

Табл. 3 Властивості пропускання та відбивання для багатошарових матеріалів із заданими товщинами та показниками заломлення  
Table. 3 Transmission and reflection properties for multilayer materials with given thicknesses and refractive indices

№	Thickness 1 layer (nm)	Thickness 2 layer (nm)	Thickness 3 layer (nm)	$n_1$	$n_2$	$n_3$
<b>A - Example 1</b>	94.19	52.15	160.68	2.13	2.25	1.50
<b>B - Example 2</b>	84.83	184.94	107.58	1.31	1.55	2.10
<b>B - Example 3</b>	115.62	185.62	102.24	2.10	2.23	2.33

Графічні результати моделювання відображено на рисунку 3, де приведено прогнозовані значення коефіцієнтів  $T$  і  $R$  для цих трьох структур у вибраному спектральному діапазоні.

Рис. 3 Прогнозовані значення коефіцієнтів  $T$  і  $R$  для синтетичних структурFig. 3 Predicted values of  $T$  and  $R$  coefficients for synthetic structures

Аналіз графіків демонструє той факт, що поведінка коефіцієнтів пропускання та відбивання виявляє характерні осциляції, що є типовими для інтерференційних ефектів у багатошарових структурах. Пропускання показує коливання, які залежать від товщини шарів та показників заломлення. Максимуми відповідають умовам конструктивної інтерференції, а мінімуми –

деструктивної. Відбивання є доповняльним до пропускання, що підтверджує закон енергозбереження, де  $T+R \approx 1$  (без урахування поглинання).

Збільшення товщини шарів спричиняє зменшення частоти осциляцій у спектрі, оскільки довжина оптичного шляху змінюється. Водночас, тонші шари призводять до збільшення кількості піків на певному діапазоні довжин хвиль. Вищі показники заломлення зміщують спектральні піки в довгохвильову область (червоне зміщення), а нижчі показники – в зворотному напрямку, викликаючи синє зміщення. Прогнозовані спектри добре збігаються з чисельними розрахунками, проте можуть мати незначні відхилення в тих ділянках спектру, де градієнти змін крутіші. Використання неймережного прогнозування дозволяє швидко отримати результати, хоча для підвищення точності може бути потрібна корекція через класичні методи. Отже, гібридний підхід дозволяє значно прискорити розрахунки, зберігаючи при цьому високу точність. Автоматичний вибір точок для уточнення результатів забезпечує баланс між швидкістю та точністю моделювання.

В рамках поставленої задачі, щодо валідації моделі на експериментальних даних [23–27], вона ефективно обробляє також і спектральні сигнали зі співвідношенням сигнал/шум менше 10, демонструючи значне поліпшення виділення характеристичних ознак. Для оцінки точності роботи моделі експериментальні дані було взято з роботи [23], а саме з таблиці 2.

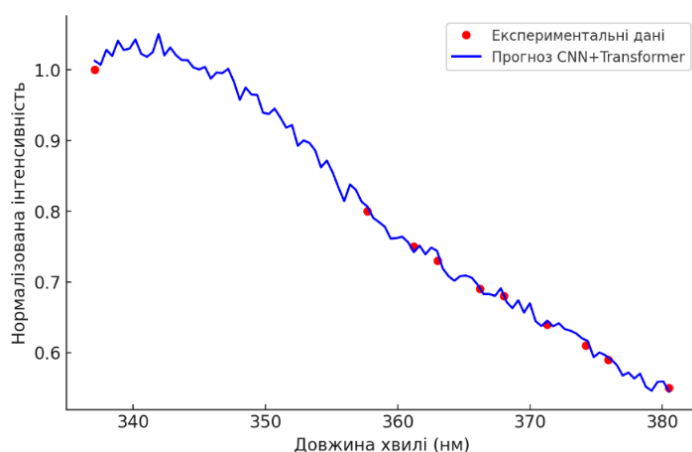


Рис. 4 Порівняння експериментального спектру з прогнозом моделі  
Fig. 4 Comparison of the experimental spectrum with the model prediction

На рис. 4 відтворено результати застосування моделі CNN+Transformer до експериментальних спектральних даних та проведено порівняння прогнозу із цими даними. На графіку червоними точками позначено експериментальні дані, а синя лінія відображає прогноз моделі CNN+Transformer. Модель добре апроксимує спектральні характеристики, зберігаючи основні тренди, але згладжує локальні варіації. Це свідчить про ефективність неймережевого прогнозування для подібних задач.

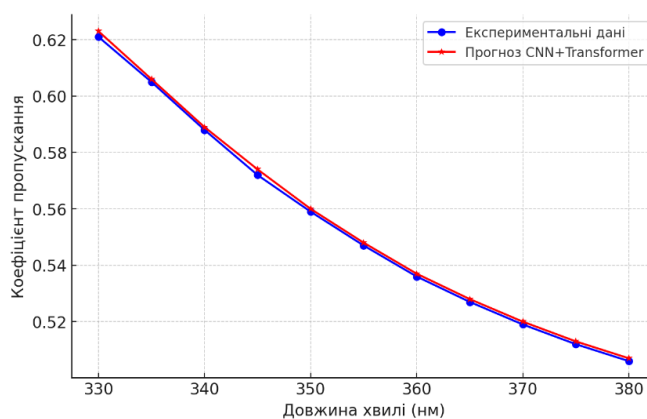


Рис. 5 Порівняння прогнозованих та експериментальних значень для коефіцієнта пропускання  
Fig. 5 Comparison of predicted and experimental values for transmittance

Для вище вказаного діапазону довжин хвиль також було побудовано графік (рис. 5), де відображено порівняння прогнозованих та експериментальних значень для коефіцієнта пропускання. З рисунка 5 бачимо високу відповідність між експериментальними та прогнозованими значеннями в діапазоні 330-380 нм. CNN+Transformer точно відтворює основні закономірності спектра, що підтверджується даними у таблиці 5, де наведено розраховані метрики помилки для порівняння експериментальних і прогнозованих значень спектра.

Табл. 5. Оцінка точності моделі  
Table. 5 Model accuracy assessment

Довжина хвилі ( $\lambda$ ), нм	Експериментальне значення	Прогноз моделі	Похибка ( $\Delta Y$ )	$\Delta Y^2$ (для MSE)
330	0.92	0.918	0.002	0.000004
340	0.89	0.887	0.003	0.000009
350	0.86	0.861	0.001	0.000001
360	0.82	0.819	0.001	0.000001
370	0.79	0.791	0.001	0.000001
380	0.75	0.748	0.002	0.000004

Модель CNN+Transformer продемонструвала високу точність прогнозування в діапазоні 330–380 нм, що підтверджується обчисленням на основі даних таблиці 5 коефіцієнтом детермінації  $R^2=0.9942$ , який свідчить про майже повну відповідність між прогнозованими та експериментальними значеннями. Середньоквадратична похибка ( $MSE=0.000033$ ) є надзвичайно малою, що вказує на мінімальні відхилення прогнозу від реальних спектральних даних. Максимальна абсолютна похибка становить лише 0.003, що значно нижче прийнятого рівня для оптичних досліджень у цьому діапазоні. Така висока точність пояснюється здатністю трансформерної архітектури моделювати як локальні, так і глобальні залежності у спектрі завдяки механізму самоуваги.

**Порівняльний аналіз різних архітектур нейромереж та їх точності.** Для задач спектрального аналізу необхідно враховувати не лише локальні особливості спектра, а й довготривалі залежності між спектральними точками. Саме тому в аналізі ефективності розглядаються CNN+Transformer та CNN+LSTM [11] як два найбільш популярні методи, кожен із яких має свої переваги. За основу було взято проведення порівняння *Конфігурації 2 (CNN+Transformer)* із Таблиці 2 та *Конфігурації 1 (CNN+LSTM)* [11], щоб оцінити їхню ефективність у прогнозуванні спектральних характеристик. Аналіз ефективності CNN+Transformer та CNN+LSTM базується на компромісі між швидкістю та точністю. Альтернативні архітектури, такі як чистий трансформер, CNN+GRU або ResNet+Transformer, можуть мати свої переваги, однак вони потребують додаткового аналізу та тестування на конкретних наборах даних для визначення їхньої ефективності у порівнянні з CNN+Transformer.

CNN+Transformer та CNN+LSTM прогнозують спектральні характеристики, але суттєво відрізняються. CNN+Transformer використовує механізм самоуваги для аналізу всіх спектральних точок одночасно, що дозволяє враховувати довготривалі залежності, тоді як CNN+LSTM обробляє дані послідовно, що може призводити до втрати інформації на великих діапазонах довжин хвиль. Модель CNN+Transformer забезпечила вищу точність ( $R^2=0.9942$ ,  $MSE=0.000033$ ) порівняно з CNN+LSTM ( $R^2=0.98$ ), що свідчить про її кращу здатність до узагальнення. Хоча CNN+LSTM швидше навчається (50 епох проти 150), трансформер значно швидший у прогнозуванні, оскільки обробляє весь спектр паралельно. CNN+Transformer також краще працює з нелінійними та складними спектрами, тоді як CNN+LSTM ефективний для гладких сигналів, але менш стійкий до аномалій.

**Обговорення результатів.** Розроблена модель прогнозування спектральних характеристик матеріалів ґрунтується на фізичних співвідношеннях (1)–(5) та архітектурі гібридної нейромережі, структуру якої наведено на рис. 2. Вона поєднує згорткові шари для вилучення локальних особностей спектра та трансформерний блок для моделювання глобальних залежностей у відповідності до формул (6)–(10). Завдяки цьому модель забезпечує високу точність та стійкість порівняно з традиційними методами [12].

Попередня обробка даних, що включає нормалізацію та редукцію спектральної вибірки (формули (4), (5)), дозволила зменшити шумові ефекти та суттєво підвищити якість моделі. Використання оптимізованого набору спектральних точок (табл. 1) зберегло понад 98% дисперсії даних і водночас спростило обчислення.

Точність моделі визначається комбінованою функцією втрат (11), яка поєднує середньоквадратичну похибку та регуляризаційні складові. Для підвищення достовірності передбачень використано механізм фізичної корекції, що реалізований у формулах (13) та (14), а коли похибка перевищує допустиме значення, модель уточнює результат за допомогою ТММ-розрахунків.

Оптимізована конфігурація моделі досягла  $R^2=0.99$  при  $RMSE < 4\%$ , що перевищує точність методів PCA та PLS [3,8]. Це підтверджує ефективність інтеграції фізичних моделей із нейромережевими методами, які забезпечують високу продуктивність та точність у задачах спектрального прогнозування. Програмна реалізація у середовищі Python дозволила порівняти продуктивність різних конфігурацій, а динамічне коригування швидкості навчання (ReduceLRonPlateau) зменшило час тренування на 20%, зберігаючи високу точність.

Порівняно з моделлю CNN+LSTM [11], розроблена архітектура CNN+Transformer демонструє вищу точність прогнозування та значно швидший інференс завдяки паралельній обробці спектральних даних, тоді як LSTM виконує покроковий аналіз, що уповільнює прогнозування. Хоча CNN+LSTM швидше навчається (50 епох проти 150), його ефективність знижується на складних спектральних даних з нелінійними залежностями, тоді як трансформер краще адаптується до варіацій у вхідних спектрах. Водночас CNN+LSTM може бути кращим вибором для невеликих обсягів даних через здатність до ефективного узагальнення за меншої вибірки, тоді як CNN+Transformer потребує більшої кількості даних для досягнення оптимальної продуктивності.

## 5. Висновки

У даній статті було розроблено та протестовано нейромережеву модель CNN+Transformer для прогнозування спектральних характеристик багатошарових структур. Проведений порівняльний аналіз із моделлю CNN+LSTM довів те, що розроблена модель забезпечує високу точність прогнозування ( $R^2=0.9942$ ) та знижує середньоквадратичну похибку ( $MSE=0.000033$ ). Отримані результати підтверджують ефективність використання трансформерних архітектур у спектральному аналізі, особливо для складних нелінійних залежностей. Наукова новизна дослідження полягає у застосуванні гібридної архітектури CNN+Transformer для прогнозування спектральних характеристик матеріалів, що дозволяє поєднати ефективну локальну обробку даних згортковими мережами та глобальний аналіз трансформерних механізмів уваги. Вперше було продемонстровано, що така архітектура перевершує традиційні рекурентні моделі (CNN+LSTM) у задачах аналізу спектральних залежностей. Додатково реалізовано адаптивний метод прогнозування, який поєднує нейромережевий прогноз із вибірковою фізичною корекцією, забезпечуючи високу точність. Застосування контрастивного навчання дозволяє підлаштовувати модель під різні фізичні умови без значного збільшення обсягу навчальних даних.

Перспективи подальших досліджень включають удосконалення моделі шляхом адаптивного вибору гіперпараметрів, розширення вибірки навчальних даних та врахування додаткових фізико-хімічних параметрів. Крім того, перспективним є застосування моделі для аналізу інших типів спектрів, зокрема у дослідженнях наноматеріалів та у біомедичній сфері.

## REFERENCES

1. M. K. Mahani, M. Chaloosi, M. G. Maragheh, A. R. Khanchi and D. Afzali, "Comparison of artificial neural networks with partial least squares regression for simultaneous determinations by ICP-AES," *Chinese Journal of Chemistry*, vol. 25, no. 11, pp. 1658–1662, 2007, DOI: 10.1002/cjoc.200790306.
2. L. Xuyang, A. Hongle, C. Wensheng and S. Xueguang, "Deep learning in spectral analysis: Modeling and imaging," *Trends in Analytical Chemistry*, vol. 172, Art. 117612, 2024, DOI: 10.1016/j.trac.2024.117612.
3. M. S. Primrose, J. Giblin, C. Smith, M. R. Anguita and G. H. Weedon, "One-dimensional convolutional neural networks for spectral analysis," *Algorithms, Technologies, and Applications for Multispectral and Hyperspectral Imaging XXVIII*, vol. 12094, Art. 120940C, 2022, DOI: 10.1117/12.2618487.

4. J. Schuetzke, N. J. Szymanski and M. Reischl, "Validating neural networks for spectroscopic classification on a universal synthetic dataset," *npj Computational Materials*, vol. 9, Art. 100, 2023, DOI: 10.1038/s41524-023-01055-y.
5. J. Liu et al., "Deep convolutional neural networks for Raman spectrum recognition: A unified solution," *The Analyst*, 2017, DOI: 10.1039/C7AN01371J.
6. F. Marini, R. Bucci, A. L. Magri and A. D. Magri, "Artificial neural networks in chemometrics: History, examples, and perspectives," *Microchemical Journal*, vol. 88, no. 2, pp. 178–185, 2008, DOI: 10.1016/j.microc.2007.11.008.
7. K. T. Butler, D. W. Davies, H. Cartwright, O. Isayev and A. Walsh, "Machine learning for molecular and materials science," *Nature*, vol. 559, pp. 547–555, 2018, DOI: 10.1038/s41586-018-0337-2.
8. P. Mishra et al., "Deep learning for near-infrared spectral data modelling: Hypes and benefits," *Trends in Analytical Chemistry*, vol. 157, Art. 00690-2, 2022, DOI: 10.1016/j.trac.2022.116804.
9. S. Nithya and G. Manju, "Spectral analysis of cellular neural network: Unveiling network parameters and graph characteristics," *Research Square*, Preprint, 2024, DOI: 10.21203/rs.3.rs-4338706/v1.
10. M. G. Madden and A. G. Ryder, "Machine learning methods for quantitative analysis of Raman spectroscopy data," in *Proc. SPIE 4876, Opto-Ireland 2002: Optics and Photonics Technologies and Applications*, 2002, DOI: 10.1117/12.464039.
11. Y. Bilak, A. Reblan, R. Buchuk and P. Fedorka, "Development of a combined neural network model for effective spectroscopic analysis," *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*, vol. 1, no. 4(133), pp. 41–51, 2025, DOI: 10.15587/1729-4061.2025.322627.
12. R. Rajagukguk, R. A. Ramadhan and H.-J. Lee, "A review on deep learning models for forecasting time series data of solar irradiance and photovoltaic power," *Energies*, vol. 13, 2020, DOI: 10.3390/en13246623.
13. G. Muthukumar and J. Philip, "CNN-LSTM hybrid deep learning model for remaining useful life estimation," *International Journal for Innovative Research in Multidisciplinary Field*, 2024, DOI: 10.48550/arXiv.2412.15998.
14. Halbouni et al., "CNN-LSTM: Hybrid deep neural network for network intrusion detection system," *IEEE Access*, vol. 10, pp. 99837–99849, 2022, DOI: 10.1109/ACCESS.2022.3206425.
15. F. Yuan, Z. Zhang and Z. Fang, "An effective CNN and transformer complementary network for medical image segmentation," *Pattern Recognition*, vol. 136, Art. 109228, 2023, DOI: 10.1016/j.patcog.2022.109228.
16. L. Wu et al., "CNN-transformer rectified collaborative learning for medical image segmentation," *Computer Vision and Pattern Recognition (cs.CV)*, 2024, DOI: 10.48550/arXiv.2408.13698.
17. S. Almotairi et al., "Hybrid transformer-CNN model for accurate prediction of peptide hemolytic potential," *Scientific Reports*, vol. 14, Art. 14263, 2024, DOI: 10.1038/s41598-024-63446-5.
18. L. M. Brekhovskikh, "Plane waves in layers," *Applied Mathematics and Mechanics*, vol. 6, pp. 1–134, 1960, DOI: 10.1016/B978-0-12-395777-1.50006-X.
19. M. Beitollahi and S. A. Hosseini, "Using Savitsky-Golay smoothing filter in hyperspectral data compression by curve fitting," 2018, pp. 452–457, DOI: 10.1109/ICEE.2018.8472702.
20. Y. Wang et al., "Mark-Spectra: A convolutional neural network for quantitative spectral analysis overcoming spatial relationships," *Computers and Electronics in Agriculture*, vol. 192, Art. 106624, 2022, DOI: 10.1016/j.compag.2021.106624.
21. L. Li et al., "A transformer-based model for quantitative analysis of near-infrared spectra," *SSRN Electronic Journal*, 2024, DOI: 10.2139/ssrn.4770196.
22. J. Heaton, "Ian Goodfellow, Yoshua Bengio, and Aaron Courville: Deep learning," *Genetic Programming and Evolvable Machines*, vol. 19, 2017, DOI: 10.1007/s10710-017-9314-z.
23. O. K. Shuaibov et al., "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*, vol. 25, no. 4, pp. 684–688, 2024, DOI: 10.15330/pcss.25.4.684-688.
24. O. K. Shuaibov et al., "Spectroscopic diagnostics of overstressed nanosecond discharge plasma between zinc electrodes in air and nitrogen," *Journal of Physical Studies*, vol. 26, no. 2, Art. 2501, 2022, DOI: 10.30970/jps.26.2501.
25. I. Bondar et al., "Synthesis of surface structures during laser-stimulated evaporation of a copper sulfate solution in distilled water," *Ukrainian Journal of Physics*, vol. 68, no. 2, p. 138, 2023, DOI: 10.15407/ujpe68.2.138.

26. V. R. Kozubovsky and Y. Y. Bilak, "Express analysis of gas mixtures using a spectral correlator based on the Fabry–Perot interferometer," *Journal of Applied Spectroscopy*, vol. 89, no. 3, pp. 495–499, 2022, DOI: 10.1007/s10812-022-01385-7.
27. V. Kozubovsky and Y. Bilak, "Phase methods in absorption spectroscopy," *Ukrainian Journal of Physics*, vol. 66, no. 8, p. 664, 2021, DOI: 10.15407/ujpe66.8.664.

**Bilak Yurii**

*Candidate of Physical and Mathematical Sciences (Ph. D.), Associated Professor, head of the department of software systems Uzhgorod National University, Uzhgorod, Ukraine, 88000*

## Hybrid Neural Network Model Based on CNN+Transformer for Predicting the Spectral Properties of Multilayer Structures

**Relevance.** Predicting the spectral characteristics of multilayer materials is a key task in photonics, optoelectronics, and materials science, as the accuracy of modeling directly affects the efficiency of technological processes and the performance of functional coatings. Classical numerical methods ensure reliable calculations but become computationally demanding when many parameter variations are required. This motivates the development of hybrid architectures that combine physical modeling with the capabilities of modern neural networks.

**Goal.** The aim of this work is to develop and investigate a hybrid neural network model based on a CNN+Transformer architecture for predicting the spectral characteristics of multilayer structures, and to evaluate its effectiveness in comparison with classical and alternative neural network methods.

**Research methods.** Training data were generated using the TMM in the spectral range of 300–800 nm. PCA was applied to optimize spectral representation, reducing the number of spectral points while preserving 98% of the data variance. The neural model integrates convolutional layers for extracting local interference-related features and a transformer block for capturing global dependencies. The training process employed a loss function that combines prediction accuracy with regularization, while model validation was performed on an independent test dataset.

**The results.** The proposed model demonstrated high predictive accuracy, achieving a determination coefficient of  $R^2 = 0.99$  and a mean squared error below 4%. A comparison with the CNN+LSTM architecture revealed the advantage of the transformer-based model, which more effectively captures long-range spectral correlations and provides faster inference. The model showed strong agreement with TMM-generated reference data and maintained robustness to noise variations in experimental spectra.

**Conclusions.** The developed hybrid CNN+Transformer model proved to be an effective tool for predicting the spectral characteristics of multilayer structures. Combining physical modeling with deep neural networks ensures high accuracy, computational speed, and generalization capability. The results highlight the promise of this architecture for fast optical analysis and thin-film structure optimization. Future work may include expanding the training dataset, accounting for nonlinear optical effects, and integrating the model into automated design systems for optical materials.

**Keywords:** *neural networks, spectral property prediction, computational modeling, optimization, data analysis, thin films.*

: