**Слайди 1–2**  
Колеги, вітаю!

Тема моєї доповіді — **Параметризація рухливості носіїв заряду в кремнії з використанням машинного навчання**.

Рухливість носіїв заряду — це ключова характеристика напівпровідників, яка визначає їхню електропровідність, швидкодію та ефективність використання у сучасних електронних і оптоелектронних пристроях.

Мета моєї роботи полягала в тому, щоб:

1. Порівняти основні моделі, що використовуються для опису рухливості носіїв зарядув кремнії залежно від температури та концентрації домішок;
2. Розробити та оптимізувати моделі машинного навчання, зокрема з використанням алгоритму **символьної регресії**, для точної, простої та швидкої оцінки рухливості електронів та дірок у кремнії.

**Слайд 3**

Відомо, що рухливість визначається низкою механізмів розсіяння та для її опису розроблено чимало моделей. Для оцінки рухливості носіїв у кремнії найчастіше застосовуються моделі **Arora** та **Klaassen,** які грунтуються на апрокимації експериментальних залежностей

**Слайд 4**

Модель Arora демонструє добру точність у середньому діапазоні температур і концентрацій, але помітно втрачає точність на крайових значеннях.

**Слайди 5–6**  
Модель Klaassen є більш універсальною та охоплює ширший діапазон умов, однак вимагає понад 20 емпіричних параметрів і складних обчислень, що знижує її практичну зручність.

Ці обмеження спонукали нас до пошуку гнучкішого та водночас точного підходу.

**Слайди 7**  
Було реалізовано такі методи машинного навчання, як **Random Forest**, **Gradient Boosting**, **SVM,** **нейронні мережі** та **символьна регресія**.

**Слайд 8**  
Для аналізу ми сформували навчальний датасет на основі моделі Klaassen, який вважається фізично найбільш коректною.

Набір даних охоплює широкий діапазон температур і концентрацій домішок. Для класичних ML-моделей були застосовані попередні перетворення — **стандартизація** або **нормування**.

**Слайд 9**

Оцінювання якості моделей та точності передбачень здійснювалося за метриками:

* **MSE** (середньоквадратична помилка),
* **MAPE** (середня абсолютна відносна похибка),
* **MAX Error** (максимальна абсолютна похибка).

Крім того, розглядалися медіаннє та середнє значення відносної похибки

**Слайд 10**  
Підбір гіперпараметрів здійснювався за допомогою бібліотеки **Optuna**.

**Слайд 11**  
На цьому слайді наведено оптимальні гіперпараметри для моделей, побудованих з використанням алгоритму Random Forest, та типові результати їхньої оцінки на тестовому наборі даних. Видно, що отримані передбачення мають достатньо високу точність незалежно від попередньої обробки даних

**Слайди 12–14**  
Аналогічні результати продемонстровано й для інших моделей. Для окремих моделей, зокрема SVM та DNN, стандартизація істотно покращувала результати порівняно з нормуванням.

Хоча ці моделі забезпечили високу точність, однак важливо відзначити, що всі вони моделі працюють як **"чорні ящики"** — вони просто видають числові значення без зрозумілого аналітичного пояснення. Крім того, для їх використання необхідне встановлення та налаштування відповідного програмного забезпечення, що не завжди зручно або можливо.

Ці фактори знову ж таки спонукали нас шукати точніший і простіший підхід.

**Слайд 15**  
Таким підходом стала **символьна регресія** — метод машинного навчання, що базується на **генетичному програмуванні**.

Його мета — знаходити **компактні, точні й аналітично зрозумілі** формули, які описують залежність рухливості від температури та концентрації домішок.

На відміну від класичних ML-моделей, символьна регресія не є "чорним ящиком" — вона видає рівняння, які можна аналізувати й безпосередньо використовувати у фізичних розрахунках.

**Слайд 16**  
На цьому слайді представлені результати для **електронів** — основних (ліворуч) та неосновних (праворуч) носіїв.

Запропоновані символьною регресією формули значно **простішi**, ніж вирази з моделі Klaassen, яка використовувалась для побудови датасету.

При цьому досягнута похибка не перевищувала **1.2%** та **1.1%** відповідно, а для більшості значень температури та концентрації легантів біла менше 0,15%.

**Слайд 17**  
Аналогічні результати отримано й для **дірок**:

* для основних носіїв похибка склала **1.5%**,
* для неосновних — лише **0.6%**.

При цьому похибки сконцентровані **локально** і не охоплюють увесь датасет, що свідчить про **добру здатність до узагальнення**.

**Слайд 18**  
На наступному слайді зведено результати передбачень величини рухливості для різних моделей. Як видко, в більшості випадків точність прогнозів виразів отриманих з використанням символьної регресії є найвищою.

В цій таблиці також наведено результати розрахунків виконаних, відповідно до моделі **Arora.** Як видно, формули, отримані методом **символьної регресії**, показують **значно кращу точність**, ніж модель Arora, яка досі широко використовується для оцінки рухливості. Зазначимо, що ми також провели розрахунки, в яких одночасно з моделлю Arora також враховували розсіяння носій-носій відповідно до теорії Dorkel. Проте виявилося, що для використаних концентрації носіїв поправки, пов’язані з врахуванням додаткового механізму розсіяння не перевищують 0,07%.

Слайд 19

* Проведено розрахунки рухливості основних та неосновних носіїв заряду у монокристалічному кремнії відповідно до теорії Klaassen, теорії Arora та теорії Arora з врахуванням розсіяння носій-носій відповідно до теорії Dorkel та порівняно точність отриманих величин.
* Розроблено та налаштовано моделі машинного навчання для оцінки рухливості електронів та дірок у n-Si та p-Si з використанням алгоритмів випадкового лісу, градієнтного бустинга, опорних векторів, глибоких нейронних мереж та символьної регресії; проведенно порівняння точності прогнозів вказаних моделей у порівнянні з теорією Klaassen та показано доцільність застосування підходів Support Vector Regression та Deep Neural Network з попередньою стандартизацією вхідних даних, а також Symbolic Regression.
* Запропоновано аналітичні вирази для опису рухливості електронів та дірок у монокристалічному кремнії для діапазону температур 200-500 K та діапазону концентрації легуючої домішки (бор або фосфор) 1013-1019 см-3; показано, що середня відносна похибка запропонованих виразів від теорії Klaassen не перевищує 0,14%, а абсолютна - 0,71 см2/B с; водночас вирази містять суттєво меншу кількість параметрів та більш зручні для використання.