

DOI: <https://doi.org/10.36910/6775-2524-0560-2026-63-10>

УДК 004.4:519.6

Бомба Андрій Ярославович, д.т.н., професор

<https://orcid.org/0000-0001-5528-4192>

Мороз Ігор Петрович, к.ф.-м.н., доцент

<https://orcid.org/0000-0001-6381-2266>

Лістєв Захар Сергійович, аспірант

<https://orcid.org/0009-0001-1846-4191>

Національний університет водного господарства та природокористування, м. Рівне, Україна

ЗАСТОСУВАННЯ КІБЕРМАТЕМАТИЧНОГО ПІДХІДУ ДО МОДЕЛЮВАННЯ ХАРАКТЕРИСТИК P–I–N СТРУКТУР

Бомба А.Я., Мороз І.П., Лістєв З.С. Застосування кіберматематичного підходу до моделювання характеристик p–i–n структур. Розглядається проблема математичного моделювання стаціонарних процесів переносу заряду в напівпровідникових p–i–n-структурах. Дрейфово-дифузійна модель, яка описує формування електронно-діркової плазми у власній області, формується у вигляді нелінійної сингулярно збуреної крайової задачі. Наявність малого параметра при старших похідних зумовлює багатомасштабну структуру розв'язку з вузькими прикордонними шарами поблизу контактів, що створює значні труднощі для класичних чисельних методів. Для подолання цих труднощів запропоновано гібридний підхід, який поєднує метод примежових поправок теорії сингулярних збурень із фізично-інформованими нейронними мережами (PINN). На основі асимптотичного розкладу вихідна задача зводиться до рекурентної послідовності простіших підзадач для регулярної складової та поправок примежового шару, кожна з яких розв'язується за допомогою PINN, реалізованих у бібліотеці DeepXDE. Така декомпозиція дозволяє нейронній мережі апроксимувати окремо плавні та швидко змінні складові, що підвищує точність, стійкість та фізичну інтерпретованість розв'язку. Проведено низку обчислювальних експериментів, які підтвердили ефективність запропонованого підходу. Отримані результати узгоджуються з відомими аналітичними розв'язками та експериментальними даними. Розглянуто також обмеження методу (чутливість до вибору вагових коефіцієнтів, розподілу точок колокації, малого параметра) та перспективи подальших досліджень, зокрема розширення на багатовимірні, нестационарні та обернені задачі. Запропонована методологія інтерпретується як елемент кіберматематичного моделювання, де класичні математичні методи інтегруються з інтелектуальними обчислювальними технологіями в єдиному процесі.

Ключові слова: кіберматематичне моделювання, p–i–n-структура, сингулярно збурена задача, метод примежових поправок, фізично-інформовані нейронні мережі (PINN), дрейфово-дифузійна модель, асимптотичний аналіз.

Bomba A., Moroz I., Listiev Z. Application of a Cybernetic Mathematical Approach for Modeling the Characteristics of p–i–n Structures. The paper addresses the problem of mathematical modeling of stationary charge transport processes in semiconductor p–i–n structures. The drift-diffusion model, which describes the formation of electron-hole plasma in the intrinsic region, is formulated as a nonlinear singularly perturbed boundary value problem. The presence of a small parameter multiplying the highest derivatives leads to a multiscale solution structure with narrow boundary layers near the contacts, which creates significant difficulties for classical numerical methods. To overcome these difficulties, a hybrid approach combining the method of boundary corrections from singular perturbation theory with physics-informed neural networks (PINNs) is proposed. Based on an asymptotic expansion, the original problem is reduced to a recurrent sequence of simpler subproblems for the regular component and boundary layer corrections, each solved using PINNs implemented in the DeepXDE library. This decomposition allows the neural network to approximate smooth and rapidly varying components separately, improving the accuracy, stability, and physical interpretability of the solution. A series of computational experiments confirms the effectiveness of the proposed approach. The obtained results agree with known analytical solutions and experimental data. The limitations of the method (sensitivity to the choice of weight coefficients, collocation point distribution, and the small parameter) and prospects for further research, including extensions to multidimensional, nonstationary, and inverse problems, are discussed. The proposed methodology is interpreted as an element of cybernetic mathematical modeling, where classical mathematical methods are integrated with intelligent computing technologies in a unified process.

Keywords: cybermathematical modeling, p–i–n structure, singularly perturbed problem, method of boundary corrections, physics-informed neural networks (PINNs), drift-diffusion model, asymptotic analysis.

Вступ. В сучасних умовах розвитку прикладної математики, математичної фізики, обчислювальної електроніки та штучного інтелекту дедалі більшого значення набуває інтеграція класичних методів математичного моделювання з інтелектуальними обчислювальними технологіями. Ця тенденція зумовлена зростаючою складністю фізичних об'єктів і технологічних систем, необхідністю врахування мультифізичних взаємодій, а також підвищеним попитом на обчислювальні інструменти, що поєднують фізичну інтерпретованість, чисельну стійкість, адаптивність до неповних даних та здатність розв'язання як прямих, так і обернених задач. У напівпровідниковій електроніці це завдання набуває особливої актуальності, оскільки математичний опис реальних приладів вимагає врахування дифузійно-дрейфових процесів

переносу заряду, відповідного розподілу електричного поля, генераційно-рекомбінаційних механізмів, а в складніших постановках — також теплових та електродинамічних ефектів.

Математичне моделювання процесів переносу заряду в напівпровідникових структурах є одним із ключових інструментів сучасної обчислювальної електроніки. Основу більшості таких моделей становить дрейфово-дифузійне наближення, яке в гідродинамічній формі описує неперервність струмів заряджених частинок (електронів і дірок) та розподіл електростатичного потенціалу через рівняння Пуассона [1-3]. Незважаючи на фізичну прозорість та порівняну обчислювальну простоту, цей підхід приводить до математичних моделей високого рівня складності. Система рівнянь дрейфово-дифузійне моделі є нелінійною, сильно зв'язаною та надзвичайно чутливою до граничних умов і параметрів матеріалу. Особливістю таких моделей, які, зокрема, описують формування електронно-діркової плазми в активній області р-і-n-структур (напівпровідникових діодів з широкою базою) [1], є їхній сингулярно збурений характер [8, 9]: наявність малого параметра при старших похідних зумовлює багатомасштабну структуру розв'язку з вузькими примежовими шарами (області просторового заряду, контактні зони) та протяжними квазінейтральними ділянками.

Практична значущість таких задач зумовлює потребу в надійних обчислювальних інструментах. Традиційні чисельні підходи (скінченно-різницеві та скінченно-елементні схеми, методи лінеаризації, ітераційні процедури типу Шарфеттера–Гаммела [20]) є ефективними для багатьох інженерних застосувань, однак їх точність і стійкість суттєво залежать від вибору просторової сітки, параметрів дискретизації та обчислювальних ресурсів. Крім того, ці методи часто не дозволяють безпосередньо проаналізувати внутрішню структуру розв'язку та виокремити внесок різних фізичних механізмів у примежових шарах.

Альтернативним підходом, який набуває дедалі більшого значення, є застосування методів теорії збурень, зокрема методу примежових поправок [5-9]. Ці методи дозволяють звести вихідну нелінійну багатомасштабну задачу до рекурентної послідовності простіших (часто лінійних або слабконелінійних) задач. Їхньою ключовою перевагою є можливість явного виокремлення примежових шарів, що забезпечує не лише зменшення обчислювальних витрат, а й глибшу фізичну інтерпретацію процесів, зокрема для р-і-n-діодів, де формування електронно-діркової плазми у активній області (і-області) має вирішальний вплив на характеристики приладу.

Останніми роками додатковий напрям розвитку математичного моделювання в напівпровідниковій електроніці пов'язаний із фізично-інформованими нейронними мережами (Physics-Informed Neural Networks, PINNs) [10], запропонованими Рейссі, Пердікарісом та Карніадакісом. На відміну від традиційних нейронних мереж, які потребують великих масивів даних для навчання, PINN включають залишки диференціальних рівнянь, граничних і початкових умов безпосередньо у функцію втрат, що дозволяє їм задовольняти фізичним законам. Класичні чисельні методи (скінченних різниць, скінченних елементів, скінченних об'ємів) потребують дискретизації просторово-часової області та супроводжуються значними обчислювальними витратами, тоді як PINN є безсітковими (mesh-free), що забезпечує ефективну роботу зі складними геометріями та високовимірними задачами. PINN дозволяють розв'язувати як прямі, так і обернені задачі, зберігаючи узгодженість із фізичними законами. Подальший розвиток цього підходу призвів до створення програмних засобів, зокрема DeepXDE [11], що підтримує розв'язання диференціальних рівнянь з використанням автоматичного диференціювання та дозволяє компактно реалізовувати фізично-інформовані моделі.

Водночас безпосереднє застосування класичних PINN до сингулярно збурених задач, які є характерними для дрейфово-дифузійних моделей напівпровідникових структур, виявляється принципово недостатнім. Стандартні нейронні мережі, попри їхню універсальну апроксимаційну здатність, зазнають труднощів при відтворенні розв'язків із різкими градієнтами, тонкими прикордонними шарами або багатомасштабною структурою — тобто саме тих особливостей, які визначають фізику роботи напівпровідникових приладів. Функція втрат PINN має складний нелінійний ландшафт, що призводить до проблем зі збіжністю (затримка, локальні мінімуми, вироджені сідлові точки), а для складних задач похибка може суттєво перевищувати похибку класичних чисельних методів.

З огляду на сказане вище, слушною є думка про те, що ефективне подолання зазначених труднощів можливе лише за умови органічного поєднання нейромережових апроксимацій з асимптотичним аналізом. Самі по собі ні «чисті» PINN, ні ізольовані асимптотичні методи не дають змоги повною мірою розв'язати проблему: перші — через нечутливість до тонкої структури

розв'язку, другі — через обмеження складністю геометрії та нелінійністю. Саме тому вважаємо, що пріоритетного розвитку набувають асимптотично-інформовані та примежево-шарово орієнтовані нейромережіві методи (AIPINN), у яких попередня аналітична інформація про структуру розв'язку (регулярна та сингулярна складові, масштаби прикордонних шарів) вбудовується безпосередньо в нейронне наближення [13, 14]. Такий підхід забезпечує зменшення впливу жорсткості рівнянь, локалізацію апроксимаційних зусиль у критичних зонах та, як наслідок, підвищення точності й стійкості обчислень.

Метою роботи є розробка методики математичного моделювання стаціонарних процесів формування електронно-діркової плазми в активній області напівпровідникових $p-i-n$ структур на основі комбінування методів машинного навчання (PINN) та асимптотичних методів (примежових поправок), побудова відповідних обчислювальних алгоритмів та вивчення властивостей отриманих розв'язків.

У даній роботі згаданий комбінований підхід інтерпретується як елемент кіберматематичного моделювання. Кіберматематичне моделювання розуміється тут як методологічна концепція, в якій класичні математичні моделі, асимптотичний аналіз, чисельні алгоритми та інтелектуальні обчислювальні інструменти інтегруються в єдиний процес моделювання. У цьому сенсі штучний інтелект розглядається не як заміник математичного моделювання, а як компонент, що його вдосконалює. Нейронні мережі використовуються не як передбачувачі типу «чорна скринька», а як апроксиматори з фізичними обмеженнями, вбудовані у структуру диференціальної задачі. Це дозволяє поєднати переваги аналітичного моделювання, чисельної стійкості та гнучкості машинного навчання.

Математична модель досліджуваної системи. Постановка задачі. Основні технічні характеристики напівпровідникових $p-i-n$ структур (інші назви пристрою: діоди з широкою базою, плазмові діоди) визначаються станом електронно-діркової плазми (просторовими розподілами концентрації електронів $n(x,t)$, дірок $p(x,t)$ та електричного потенціалу $\varphi(x,t)$ в певні моменти часу), яка формується в активній області структури (i -області) під впливом зовнішньої напруги внутрішнього електричного поля, дифузійних процесів та механізмів рекомбінації. Математичний опис цього процесу базується на дифузійно-дрейфовому наближенні, яке залишається одним з фундаментальних макроскопічних підходів до моделювання напівпровідникових приладів [1-4, 8]. Математична постановка задачі у одновимірному ($\Omega = \{(x) : 0 < x < w\}$), w – характерний розмір i -області (відстань між $p-i$ - та $n-i$ -контактами)) стаціонарному випадку має наступний вигляд:

$$\begin{cases} \mu^2 \frac{d^2 \varphi}{dx^2} = -(p - n + N_d), \\ \frac{d^2 n}{dx^2} - \frac{dn}{dx} \frac{d\varphi}{dx} - n \frac{d^2 \varphi}{dx^2} - A_n n = 0, \\ \frac{d^2 p}{dx^2} + \frac{dp}{dx} \frac{d\varphi}{dx} + p \frac{d^2 \varphi}{dx^2} - A_p p = 0. \end{cases} \quad (1)$$

$$\begin{cases} \frac{dn}{dx} - \gamma_n w n \Big|_{x=0} = \frac{J}{e D_n} \frac{w}{N_i}, \quad -\frac{dp}{dx} - \gamma_p w p \Big|_{x=0} = 0, \quad \varphi \Big|_{x=0} = -\frac{U}{2}, \\ \frac{dp}{dx} + \gamma_p w p \Big|_{x=1} = -\frac{J}{e D_p} \frac{w}{N_i}, \quad \frac{dn}{dx} - \gamma_n w n \Big|_{x=1} = 0, \quad \varphi \Big|_{x=1} = \frac{U}{2}, \end{cases} \quad (2)$$

де незалежна змінна x та невідомі функції $\varphi(x)$, $n(x)$, $p(x)$ в системі рівнянь (1) подані в нормалізованому вигляді: $\tilde{x} = \frac{x}{w}$ ($\tilde{x} \in [0,1]$), $\tilde{\varphi}(\tilde{x}) = \frac{e\varphi(x)}{kQ_0}$, $\tilde{n}(\tilde{x}) = \frac{n(x)}{N_i}$, $\tilde{p}(\tilde{x}) = \frac{p(x)}{N_i}$ (знак “ \sim ” опущено у постановці задачі (1)-(2)). Процедура нормалізації природним чином вносить в модель малий параметр $\mu^2 = \frac{\varepsilon \varepsilon_0 \kappa Q_0}{e^2 w N_i}$ ($\mu^2 \sim 10^{-4} \div 10^{-6}$). Тут використано наступні позначення: Q_0 – температура (300° K); κ – стала Больцмана; ε – відносна діелектрична стала; ε_0 – електрична стала; N_i – стала, яка визначає концентрацію носіїв заряду у власному напівпровіднику (i -області); $N_d(x)$ – профіль легування активної області домішками (задана функція) $A_n = w^2 / D_n \tau_n^*$; $A_p = w^2 / D_p \tau_p^*$; D_n , D_p –

коефіцієнти дифузії відповідно електронів та дірок; τ_n^* , τ_p^* - характерні часи життя носіїв заряду в області власного напівпровідника.

В граничних умовах (2) J , U визначають густину струму та різницю потенціалів сигналу управління (при прямому зміщенні); γ_n , γ_p - швидкість рекомбінації носіїв заряду на межі активної області.

Сформульована задача має кілька суттєвих властивостей. По-перше, вона є нелінійною, оскільки концентрації носіїв та електростатичний потенціал зв'язані через дрейфові члени та рівняння Пуассона. По-друге, наявність малого параметра μ при старшій похідній у рівнянні Пуассона (характеризує відношення між електростатичною довжиною екранування та характерним розміром активної області) означає, що крайова задача є сингулярно збуреною. Отже, згідно загальних положень теорії сингулярних збурень [5–8, 19], розв'язок може містити вузькі примежові шари поблизу контактів, де електричне поле та концентрації носіїв заряду змінюються швидко. За межами цих шарів розв'язок змінюється більш плавно і може бути описаний регулярною асимптотичною складовою.

Ці властивості ускладнюють безпосереднє чисельне розв'язання задачі (1)-(2). Класичні скінченно-різницеві та скінченно-елементні схеми, зокрема наближення типу Шарфеттера–Гаммела, широко використовуються для напівпровідникових дрейфово-дифузійних рівнянь, оскільки забезпечують стійке опрацювання експоненційно змінних розподілів носіїв та жорстких потоків [21]. Однак для сингулярно збурених задач надійність суто чисельних схем може суттєво залежати від роздільної здатності сітки поблизу примежових шарів. Якщо сітка недостатньо адаптована до шарової структури, чисельний розв'язок може втратити точність або виявляти нефізичні осциляції. Ця проблема добре відома у моделюванні напівпровідникових систем, де примежові шари, розриви і сильно локалізовані градієнти є одними з головних джерел обчислювальних труднощів [3, 4, 16, 20]. З цієї причини для отримання розв'язків крайової задачі (1)-(2) пропонуємо реалізувати поєднання чисельного наближення з попереднім аналітичним розкладом задачі.

Важливою особливістю розглянутої постановки є те, що граничні умови (2) не є лише допоміжними обмеженнями. Вони мають вирішальний вплив на структуру розв'язку. Оскільки малий параметр входить до старшої похідної, гранична задача, отримана формально при $\mu \rightarrow 0$, загалом втрачає частину граничних умов. Тому повний розв'язок не може бути представлений лише розв'язком редукованої задачі. Він повинен включати додаткові поправки примежового шару, що відновлюють виконання граничних умов поблизу кінців інтервалу. Саме це є головною причиною застосування методу примежових поправок теорії сингулярних збурень [5-7, 19] до аналізу даної моделі.

Отже, задачу, що розглядається, можна сформулювати так: необхідно визначити стаціонарні розподіли концентрації електронів $n(x)$, дірок $p(x)$ та електричного потенціалу $\varphi(x)$ в активній області напівпровідникової p - i - n структури за заданими параметрами J і U з урахуванням сингулярно збуреного характеру системи (1). Для цього пропонується комбінований підхід, що поєднує: 1) метод примежових поправок [8, 9, 17, 18, 21] для побудови рекурентної послідовності простіших (порівняно з вихідною) задач; 2) фізично-інформовані нейронні мережі (PINN) [10, 11] для чисельної апроксимації як регулярної складової розв'язку, так і поправок прикордонного шару.

Комбінований асимптотично-нейромережевий підхід до розв'язання сингулярно збурених крайових задач. Розв'язки крайової задачі (1)-(2), згідно з [8, 9], шукаємо у вигляді асимптотичних рядів за малим параметром μ наступного виду:

$$\begin{pmatrix} n(x) \\ p(x) \\ \varphi(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N(x) + \underline{N}(\underline{\xi}) + \overline{N}(\overline{\xi}) \\ P(x) + \underline{P}(\underline{\xi}) + \overline{P}(\overline{\xi}) \\ \Phi(x) + \underline{\Phi}(\underline{\xi}) + \overline{\Phi}(\overline{\xi}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^s \mu^i n_i(x) \\ \sum_{i=0}^s \mu^i p_i(x) \\ \sum_{i=0}^s \mu^i \varphi_i(x) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^s \mu^i \underline{N}_i(\underline{\xi}) \\ \sum_{i=0}^s \mu^i \underline{P}_i(\underline{\xi}) \\ \sum_{i=0}^s \mu^i \underline{\Phi}_i(\underline{\xi}) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^s \mu^i \overline{N}_i(\overline{\xi}) \\ \sum_{i=0}^s \mu^i \overline{P}_i(\overline{\xi}) \\ \sum_{i=0}^s \mu^i \overline{\Phi}_i(\overline{\xi}) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} R_{n(s)}(x, \mu) \\ R_{p(s)}(x, \mu) \\ R_{\Phi(s)}(x, \mu) \end{pmatrix}, \quad (3)$$

де $N(x)$, $P(x)$, $\Phi(x)$ - регулярні складові розв'язку, які подаємо у вигляді асимптотичних рядів за степенями малого параметра; $\underline{N}(\underline{\xi})$, $\underline{P}(\underline{\xi})$, $\underline{\Phi}(\underline{\xi})$, $\overline{N}(\overline{\xi})$, $\overline{P}(\overline{\xi})$, $\overline{\Phi}(\overline{\xi})$ - примежові поправки

відповідно в околах точок $x=0$ та $x=l$ межі області, які також подаємо у вигляді відповідних асимптотичних рядів ($\underline{\xi} = \frac{x}{\mu}$, $\bar{\xi} = \frac{1-x}{\mu}$ - відповідні регуляризуючі розтяги); $R_{\Phi(s)}(x, \mu)$, $R_{n(s)}(x, \mu)$, $R_{p(s)}(x, \mu)$ - залишкові члени.

Шляхом виконання стандартної процедури асимптотичної декомпозиції базової задачі (1)-(2) (на основі "прирівнювання" членів співвідношень (1)-(2) однакового порядку за параметром μ) приходимо до постановок рекурентної послідовності задач для систем звичайних диференціальних рівнянь з відповідними граничними умовами (за аналогією до [8, 9], де можна ознайомитись із детальним описом алгоритму розчеплення). Наведемо приклади елементів такої послідовності задач [8, 9]:

$$\left\{ \begin{array}{l} p_0(x) - n_0(x) + N_d(x) = 0, \\ \frac{d^2 n_0(x)}{dx^2} - A_n n_0(x) = \frac{d}{dx} \left(n_0(x) \frac{d\varphi_0(x)}{dx} \right), \\ \frac{d^2 p_0(x)}{dx^2} - A_p p_0(x) = -\frac{d}{dx} \left(p_0(x) \frac{d\varphi_0(x)}{dx} \right), \end{array} \right. \quad (4)$$

$$\left. \begin{array}{l} \frac{dn_0(x)}{dx} - \gamma_n w n_0(x) \Big|_{x=0} = \frac{J}{eD_n} \frac{w}{N_i}, \quad -\frac{dp_0(x)}{dx} - \gamma_p w p_0(x) \Big|_{x=1} = \frac{J}{eD_p} \frac{w}{N_i}, \\ -\frac{dp_0(x)}{dx} - \gamma_p w p_0(x) \Big|_{x=0} = 0, \quad \frac{dn_0(x)}{dx} - \gamma_n w n_0(x) \Big|_{x=1} = 0; \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d^2 \Phi_0(\underline{\xi})}{d\underline{\xi}^2} = -\left(\underline{P}_0(\underline{\xi}) - \underline{N}_0(\underline{\xi}) \right), \\ \frac{d^2 \underline{N}_0(\underline{\xi})}{d\underline{\xi}^2} = \frac{d}{d\underline{\xi}} \left(\left(n_0(0) + \underline{N}_0(\underline{\xi}) \right) \frac{d\Phi_0(\underline{\xi})}{d\underline{\xi}} \right), \\ \frac{d^2 \underline{P}_0(\underline{\xi})}{d\underline{\xi}^2} = -\frac{d}{d\underline{\xi}} \left(\left(p_0(0) + \underline{P}_0(\underline{\xi}) \right) \frac{d\Phi_0(\underline{\xi})}{d\underline{\xi}} \right). \end{array} \right. \quad (5)$$

$$\Phi_0(\underline{\xi}) \Big|_{\underline{\xi}=0} = -\frac{U_0}{2}, \quad \lim_{\underline{\xi} \rightarrow \infty} \Phi_0(\underline{\xi}) = 0,$$

$$\left. \frac{d\underline{N}_0(\underline{\xi})}{d\underline{\xi}} \Big|_{\underline{\xi}=0} = 0, \quad \lim_{\underline{\xi} \rightarrow \infty} \underline{N}_0(\underline{\xi}) = 0, \quad \frac{d\underline{P}_0(\underline{\xi})}{d\underline{\xi}} \Big|_{\underline{\xi}=0} = 0, \quad \lim_{\underline{\xi} \rightarrow \infty} \underline{P}_0(\underline{\xi}) = 0; \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} p_1(x) - n_1(x) = 0, \\ \frac{d^2 n_1(x)}{dx^2} - A_n n_1(x) = \frac{d}{dx} \left(n_1(x) \frac{d\varphi_0(x)}{dx} + n_0(x) \frac{d\varphi_1(x)}{dx} \right), \\ \frac{d^2 p_1(x)}{dx^2} - A_p p_1(x) = \frac{d}{dx} \left(p_1(x) \frac{d\varphi_0(x)}{dx} + p_0(x) \frac{d\varphi_1(x)}{dx} \right), \end{array} \right. \quad (6)$$

$$\left(\frac{dn_1(x)}{dx} - \gamma_n w n_1(x) \right) \Big|_{x=0} = 0, \quad \left(-\frac{dp_1(x)}{dx} - \gamma_p w p_1(x) \right) \Big|_{x=0} = 0,$$

$$\left(-\frac{dp_1(x)}{dx} - \gamma_p w p_1(x) \right) \Big|_{x=1} = 0, \quad \left(\frac{dn_1(x)}{dx} - \gamma_n w n_1(x) \right) \Big|_{x=1} = 0;$$

$$\left\{ \begin{aligned} & \frac{d^2 \Phi_1(\underline{\xi})}{d\underline{\xi}^2} = -(\underline{P}_1(\underline{\xi}) - \underline{N}_1(\underline{\xi})), \\ & \frac{d^2 \underline{N}_1(\underline{\xi})}{d\underline{\xi}^2} = \frac{d}{d\underline{\xi}} \left(\varphi'_{0x}(0) \underline{N}_0(\underline{\xi}) + \frac{d\Phi_1(\underline{\xi})}{d\underline{\xi}} (n_0(0) + \underline{N}_0(\underline{\xi})) + \frac{d\Phi_0(\underline{\xi})}{d\underline{\xi}} (n_1(0) + \underline{\xi} n'_0(0) + \underline{N}_1(\underline{\xi})) \right), \\ & \frac{d^2 \underline{P}_1(\underline{\xi})}{d\underline{\xi}^2} = -\frac{d}{d\underline{\xi}} \left(\varphi'_{0x}(0) \underline{P}_0(\underline{\xi}) + \frac{d\Phi_1(\underline{\xi})}{d\underline{\xi}} (p_0(0) + \underline{P}_0(\underline{\xi})) + \frac{d\Phi_0(\underline{\xi})}{d\underline{\xi}} (p_1(0) + \underline{\xi} p'_0(0) + \underline{P}_1(\underline{\xi})) \right), \end{aligned} \right. \quad (7)$$

$$\left. \begin{aligned} & \frac{\partial \underline{N}_1}{\partial \underline{\xi}} - \gamma_n w \underline{N}_0(\underline{\xi}) \Big|_{\underline{\xi}=0} = 0, \quad -\frac{\partial \underline{P}_1}{\partial \underline{\xi}} - \gamma_p w \underline{P}_0(\underline{\xi}) \Big|_{\underline{\xi}=0} = 0, \\ & \lim_{\underline{\xi} \rightarrow \infty} \underline{N}_1(\underline{\xi}) = 0, \quad \lim_{\underline{\xi} \rightarrow \infty} \underline{P}_1(\underline{\xi}) = 0, \quad \Phi_1|_{x=0} = 0, \quad \lim_{\underline{\xi} \rightarrow \infty} \Phi_1(\underline{\xi}) = 0. \end{aligned} \right\}$$

Задачі (4), (6) забезпечують пошук членів асимптотичного розкладу регулярних членів асимптотик, а задачі (5), (7) – примежових поправок в околі точки $x=0$. Відмітимо, що для пошуку членів примежових поправок в околі точки $x=l$ використовуються постановки задач, аналогічні до (5), (7). Наближення нульового порядку визначає основну фізичну структуру розв'язку, тоді як члени вищих порядків уточнюють наближення та враховують вплив малого параметра. Це є однією з головних переваг методів збурень: вихідна нелінійна багатомасштабна задача розкладається на ієрархію простіших задач, деякі з яких можуть бути лінійними або слабконелійними [5–9, 19].

Для чисельного розв'язання отриманих систем звичайних диференціальних рівнянь (як регулярних, так і примежових) використовуються фізично-інформовані нейронні мережі (PINN) [10], реалізовані за допомогою бібліотеки DeepXDE [16]. У цьому підході шукані функції апроксимуються нейронною мережею: $n(x) \approx n_\theta(x)$, $p(x) \approx p_\theta(x)$, $\varphi(x) \approx \varphi_\theta(x)$, де θ позначає набір параметрів мережі (ваги та зсуви). PINN ґрунтуються на принципі, згідно з яким нейронна мережа може навчатися не лише за даними, а й за фізичними законами, вираженими у вигляді диференціальних рівнянь. У цьому підході вихід мережі підставляється у диференціальні рівняння, а нев'язки рівнянь системи включаються до функції втрат. Для обчислення необхідних похідних за незалежними змінними використовується автоматичне диференціювання. Це дозволяє навчати нейронну мережу так, щоб вона задовольняла диференціальні рівняння, граничні умови і, за наявності, додатковим спостережуваним даним [23, 25, 26]. У такий спосіб шукані функції апроксимуються PINN: $n(x) \approx n_\theta(x)$, $p(x) \approx p_\theta(x)$, $\varphi(x) \approx \varphi_\theta(x)$, де θ позначає набір параметрів мережі (ваги та зсуви). Навчання мережі (а отже, і підбір таких параметрів θ , за яких функції $n_\theta(x)$, $p_\theta(x)$, $\varphi_\theta(x)$ задовольняють рівняння системи та граничні умови) зводиться до мінімізації функціонала втрат, який включає дві складові: нев'язки диференціальних рівнянь у точках колокації x_i та нев'язки граничних умов на межі області. У загальному випадку функція втрат має такий вигляд:

$$L(\bar{\theta}) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^Z \sum_{i=1}^N \omega_{1j} r_{1j}^2(x_i, \bar{\theta}) + \sum_{j=1}^Z \omega_{2j} r_{2j}^2(x_0, \bar{\theta}) + \sum_{j=1}^Z \omega_{3j} r_{3j}^2(x_{N+1}, \bar{\theta}), \quad (8)$$

де $r_{kj}()$ — нев'язки, що визначаються диференціальними рівняннями задачі та відповідними граничними умовами, Z — кількість рівнянь у системі, N — кількість точок колокації, а ω_{kj} — вагові коефіцієнти.

Нижче наведено ключові елементи програмного коду розв'язання крайової підзадачі (5) для визначення примежової поправки нульового порядку в околі точки $x=0$.

Лістинг 1. Ключові елементи реалізації PINN для задачі лівого примежового шару (бібліотека DeepXDE, бекенд PyTorch).

```
import deepxde as dde
import numpy as np
```

```

# --- Геометрія: розтягнутий домен xi in [0, L] ---
# L вибирається достатньо великим для згасання поправки
mu = 0.05 # малий параметр (товщина прилежового шару)
L = 10.0 # усічений домен: 0 <= xi <= L
geom = dde.geometry.Interval(0, L)

# --- Параметри задачі (нульовий порядок) ---
An = 0.5 # коефіцієнт рекомбінації, електрони
Ap = 0.45 # коефіцієнт рекомбінації, дірки
LW = [1, 1, 1, 20, 20, 20, 20] # ваги функції втрат

# --- Визначення залишків PDE (прилежовий шар) ---
def pde_bl(x, y):
    # y: [phi, N0, P0] – поправки потенціалу та концентрацій
    dphi_x = dde.grad.jacobian(y, x, i=0, j=0)
    dphi_xx = dde.grad.hessian(y, x, component=0, i=0, j=0)
    dN_x = dde.grad.jacobian(y, x, i=1, j=0)
    dN_xx = dde.grad.hessian(y, x, component=1, i=0, j=0)
    dP_x = dde.grad.jacobian(y, x, i=2, j=0)
    dP_xx = dde.grad.hessian(y, x, component=2, i=0, j=0)
    N0, P0 = y[:, 1:2], y[:, 2:3]
    # Рівняння Пуассона в розтягнутій змінній xi
    res_phi = dphi_xx + (P0 - N0)
    # Рівняння неперервності для електронів
    res_N = dN_xx - (dN_x * dphi_x + N0 * dphi_xx) - An * N0
    # Рівняння неперервності для дірок
    res_P = dP_xx + (dP_x * dphi_x + P0 * dphi_xx) - Ap * P0
    return [res_phi, res_N, res_P]

# --- Вихідне перетворення: умови спряження при xi -> inf ---
# N0, P0, phi -> 0 при xi -> L (умови зникання поправок)
def output_transform(x, y):
    t = x / L # t=0 на межі, t=1 при xi=L
    phi0 = (1 - t) * y[:, 0:1] # phi(L) = 0
    N0 = (1 - t) * y[:, 1:2] # N0(L) = 0
    P0 = (1 - t) * y[:, 2:3] # P0(L) = 0
    import torch
    return torch.cat([phi0, N0, P0], dim=1)

# --- Архітектура мережі: [1] -> [48]*4 -> [3] ---
net = dde.nn.FNN([1] + [48] * 4 + [3], "tanh", "Glorot uniform")
net.apply_output_transform(output_transform)

# --- Навчання: двоетапна процедура Adam + L-BFGS-B ---
data = dde.data.PDE(geom, pde_bl, bcs,
                    num_domain=2000, num_boundary=50)
model = dde.Model(data, net)
model.compile("adam", lr=1e-3, loss_weights=LW)
model.train(iterations=15_000)
model.compile("L-BFGS-B", loss_weights=LW)
model.train() # L-BFGS зупиняється за умовою збіжності

```

В обчислювальній реалізації як апроксиматори застосовуються повнозв'язані мережі прямого поширення. Архітектура складається з одного вхідного нейрона, чотирьох прихованих шарів, кожен з яких містить 48 нейронів, та трьох вихідних нейронів. Функція гіперболічного тангенса використовується як функція активації. Ваги мережі ініціалізуються з використанням методу рівномірної ініціалізації Глора [30].

Процедура навчання складається з двох основних етапів. На першому етапі використовується оптимізатор Adam для виконання стохастичної оптимізації [31]. На другому етапі застосовується оптимізатор L-BFGS-B для уточнення розв'язку та покращення збіжності. Двоетапну стратегію часто застосовують в обчисленнях PINN, оскільки Adam забезпечує стабільне попереднє навчання, тоді як квазіньютонівська оптимізація покращує кінцеву точність мінімізації залишків диференціальних рівнянь [22, 23].

Важливою перевагою цього підходу є зменшення навантаження на нейронну мережу. У стандартній PINN одна й та сама мережа повинна апроксимувати як плавний внутрішній розв'язок,

так і різкі прикордонні шари. У запропонованому методі ці масштаби розділяються перед навчанням. Регулярна мережа апроксимує плавну частину розв'язку, тоді як мережі примежового шару апроксимують швидко змінні складові у розтягнутих координатах. Аналогічне обґрунтування лежить в основі нещодавно запропонованих асимптотично-інформованих підходів (AIPINN) [21, 27, 28].

Умови машинних експериментів та аналіз результатів. Метою машинних експериментів є перевірка застосовності запропонованого комбінованого асимптотично-нейромережевого підходу до стаціонарної задачі моделювання електронно-діркової плазми в активній області напівпровідникової $p-i-n$ структури. Обчислювальне дослідження спрямоване не лише на отримання наближеного чисельного розв'язку, а й на оцінку того, чи покращує запропонований розклад на регулярну складову та складові прикордонного шару фізичну узгодженість та стійкість апроксимації. Тому аналіз результатів проводиться за кількома критеріями: наскільки отримані розв'язки задовольняють рівняння досліджуваної системи, виконання граничних умов, якісна адекватність та інтерпретованість отриманих результатів, стійкість процесу навчання.

Результати машинних експериментів (результати розв'язання задач (4)-(7) із використанням функції втрат типу (8)) показано на рис. 1-8.

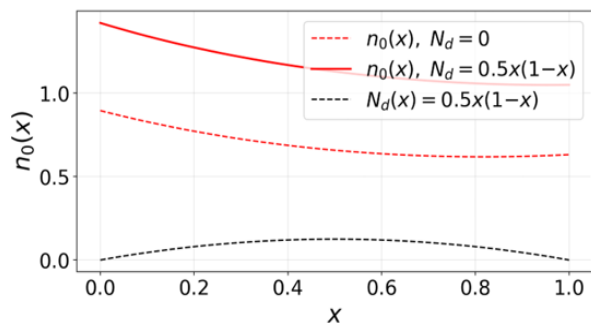


Рис.1. Просторовий розподіл носіїв заряду в активній області $p-i-n$ -структури поданий регулярними членами асимптотики

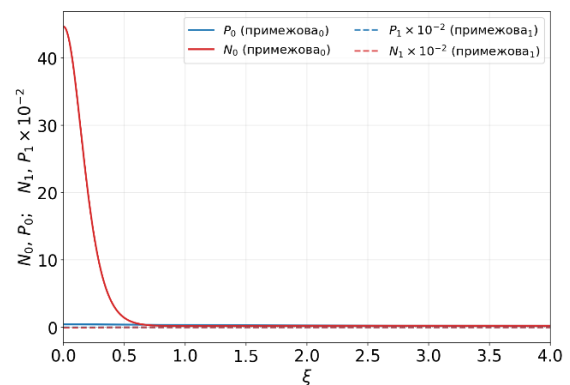


Рис.2. Просторовий розподіл носіїв заряду в примежовій області (перші два члени примежових поправок асимптотики, $n_0(0)=0.5$)

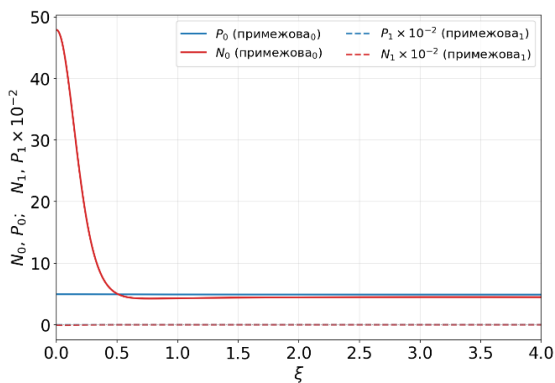


Рис.3. Просторовий розподіл носіїв заряду в примежовій області (перші два члени примежових поправок асимптотики, $n_0(0)=5$)

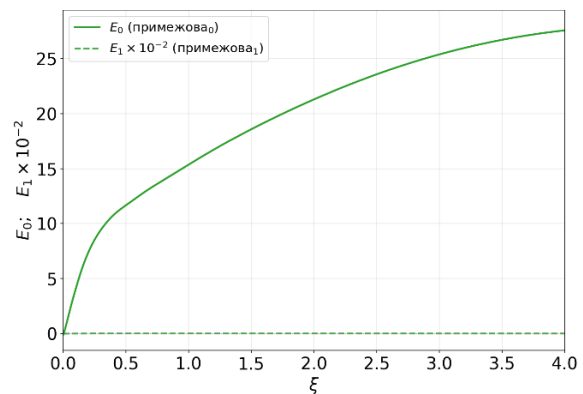


Рис.4. Просторовий розподіл напруженості електричного поля в $p-i-n$ -структурі (перші два члени примежових поправок асимптотики, $n_0(0)=0.5$)

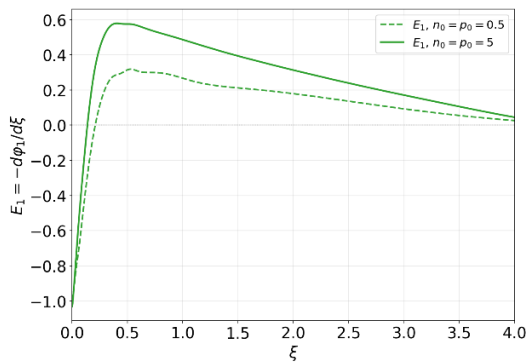


Рис.5. Просторовий розподіл напруженості електричного поля в *p-i-n*-структурі (другий член примежової поправки асимптотики (без множника μ), $n_0(0)=0.5$)

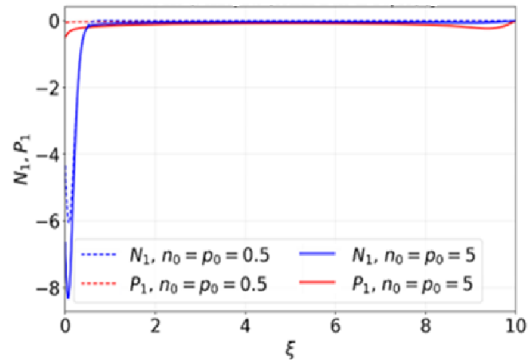


Рис.6. Просторовий розподіл концентрації носіїв заряду поданий другим членом примежової поправки асимптотики (без множника μ) для $n_0(0)=0.5$

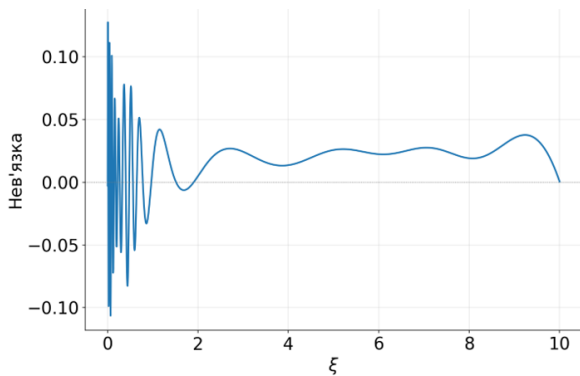


Рис.7. Розподіл нев'язки апроксимації рівняння неперервності струму електронів, отриманої за допомогою PINN

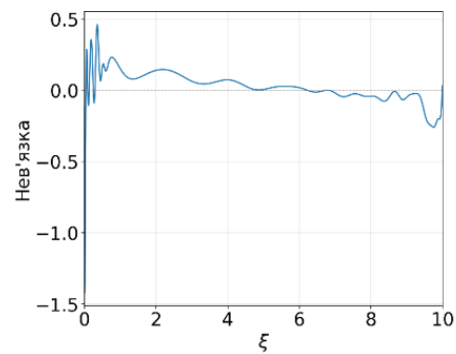


Рис.8. Розподіл нев'язки апроксимації рівняння Пуассона, отриманої за допомогою PINN

Аналіз отриманих чисельних результатів проводився окремо для регулярної складової, поправок прикордонного шару та складеного розв'язку. Регулярна складова описує плавний розподіл концентрацій електронів і дірок (рис.1) та електростатичного потенціалу в основній частині активної області. Поправки прикордонного шару описували швидкі локальні зміни поблизу меж області Ω та забезпечували задоволення граничних умов (для прикладених на границі потенціалів), які не могли забезпечуватись лише редукованою регулярною задачею.

Отримана складена апроксимація будувалася, зокрема у формі

$$\begin{pmatrix} n(x, \mu) \\ p(x, \mu) \\ \varphi(x, \mu) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_0(x) + \mu \cdot 0 + \underline{N}_0(\mu x) + \mu \underline{N}_1(\mu x) + \bar{N}_0(1 - \mu x) + \mu \bar{N}_1(1 - \mu x) + O(\mu^2) \\ p_0(x) + \mu \cdot 0 + \underline{P}_0(\mu x) + \mu \underline{P}_1(\mu x) + \bar{P}_0(1 - \mu x) + \mu \bar{P}_1(1 - \mu x) + O(\mu^2) \\ \underline{\Phi}_0(\mu x) + \mu \underline{\Phi}_1(\mu x) + \bar{\Phi}_0(1 - \mu x) + \mu \bar{\Phi}_1(1 - \mu x) + O(\mu^2) \end{pmatrix}.$$

Поведінка цих функцій підтвердила очікувану структуру розв'язку сингулярно збуреної крайової задачі (1)-(2). У внутрішній області напівпровідникової структури розв'язок визначався переважно регулярною складовою. Поблизу меж внесок відповідної функції прикордонного шару ставав домінуючим і коригував розв'язок відповідно до граничних умов. У відстані від меж поправки прикордонного шару зменшувалися, що узгоджується з умовами спряження теорії сингулярних збурень [5–7, 19]. Крім цього отримані результати (рис.) корелюють із відомими експериментальними даними та відомими аналітичними розв'язками задач (4), (5), які приведені у роботах [8, 9] і забезпечують зняття низки обмежень, які накладались на структурні елементи математичних моделей у попередніх дослідженнях (наприклад, можливість довільного вибору профілю легування $N_d(x)$).

З фізичної точки зору, отримані розподіли узгоджуються з очікуваною поведінкою носіїв заряду у *p-i-n* структурі [1–4, 15, 16, 24]. Концентрації електронів і дірок змінюються під сукупним впливом механізмів дифузії та дрейфу, тоді як електростатичний потенціал формує самоузгоджене поле, визначене примежовими розподілами заряду (в областях просторового заряду). Наявність різних градієнтів поблизу контактів відображає вплив сильно легованих суміжних областей та

перехід від поведінки, що визначається контактом, до плазмової поведінки всередині власного шару.

Важливим результатом проведених комп'ютерних експериментів є те, що асимптотично-нейронне представлення (AIPINN) зменшує складність задачі апроксимації для нейронної мережі. У стандартній постановці PINN одна глобальна мережа повинна одночасно апроксимувати як плавну внутрішню поведінку, так і різкі ефекти прикордонного шару. При малих значеннях μ це може призводити до поганої апроксимації примежових шарів, повільної збіжності та підвищеної чутливості до розподілу точок колокацій. У запропонованому підході поведінка на швидкому масштабі переноситься до розтягнутих змінних $\underline{\xi} = \frac{x}{\mu}$ та $\bar{\xi} = \frac{1-x}{\mu}$. Аналогічні висновки наводяться

у нещодавніх роботах з асимптотично інформованих PINN (AIPINN) [21, 27, 28, 36].

Аналіз залишків є суттєвим для оцінки якості отриманого розв'язку. Залишки рівнянь досліджуваної системи (у нашому випадку залишки $<10^{-4}$) характеризують ступінь, до якого навчена нейронна апроксимація задовольняє математичній моделі в області Ω . Граничні залишки вказують на точність виконання заданих граничних умов, тоді як залишки спряження характеризують спадання поправок прикордонного шару та їх узгодженість з регулярним розв'язком. Це особливо важливо для PINN, де низьке значення загальної функції втрат може приховувати дисбаланс між окремими фізичними обмеженнями [29, 33, 34].

Отримані результати підтверджують доцільність поєднання асимптотичного аналізу з фізично-інформованими нейронними обчисленнями. Асимптотична частина методу забезпечує математично обґрунтований розклад розв'язку та ідентифікує коректні швидкі та повільні змінні. Нейромережева частина забезпечує гнучкий механізм апроксимації для розв'язання відповідних підзадач без побудови жорсткої сітки. Це поєднання є особливо корисним для задач напівпровідникової електроніки, де керівні рівняння є фізично інтерпретованими, але можуть бути важкими для безпосереднього розв'язання через нелінійність, жорсткість та багатомасштабну поведінку.

Водночас виконані експерименти вказують на ряд обмежень, які слід враховувати у подальших дослідженнях. По-перше, якість нейронної апроксимації залежить від вибору вагових коефіцієнтів функції втрат та розподілу точок колокацій. По-друге, процес навчання може бути чутливим до малого параметра μ , оскільки зменшення μ підвищує жорсткість вихідної задачі. По-третє, використання скінчених інтервалів для змінних прикордонного шару вводить додатковий числовий параметр — довжину усічення напівнескінченного домену. По-четверте, поточне формулювання є одновимірним і стаціонарним, тоді як реальні напівпровідникові прилади можуть вимагати багатовимірних, нестационарних та температурно-залежних моделей.

Слід зазначити, що під час обчислювальних експериментів було виявлено відсутність суттєвого прискорення при переході з центрального процесора (CPU) на графічний (GPU). Це пояснюється кількома структурними особливостями задачі. По-перше, кількість колокаційних точок (2000 у внутрішній області) є недостатньою для повного завантаження GPU-ядер: графічний процесор ефективний при паралельній обробці сотень тисяч елементів, тоді як значна частина часу витрачається на передачу даних між оперативною пам'яттю та відеопам'яттю. По-друге, компактна архітектура нейронної мережі ($[1] \rightarrow [48] \times 4 \rightarrow [3]$, близько 10 тисяч параметрів) призводить до матричних операцій малої розмірності, для яких переваги GPU над CPU є незначними. По-третє, обчислення похідних другого порядку методом автоматичного диференціювання (hessian через зворотний прохід) є переважно послідовною операцією по графу обчислень і погано піддається паралелізації. Нарешті, оптимізатор L-BFGS-B другого етапу навчання у більшості реалізацій виконується виключно на CPU засобами бібліотеки SciPy, незалежно від обраного апаратного прискорювача. Таким чином, для задач PINN на одновимірних областях з відносно малою кількістю колокаційних точок і компактними мережами використання GPU не дає практичного виграшу в часі, а вибір апаратної платформи визначається переважно зручністю налаштування середовища, а не міркуваннями продуктивності.

Запропонований метод може бути розширений у кількох напрямках. Одним з можливих розширень є включення механізмів рекомбінації-генерації, неоднорідних профілів легування та температурної залежності у дрейфово-дифузійно-пуассонівську систему. Іншим напрямком є розробка обернених постановок, де невідомі параметри напівпровідника ідентифікуються з експериментальних або модельованих даних [23, 25, 32]. Подальшим перспективним напрямком є

використання адаптивного балансування втрат, адаптивного уточнення точок колокацій та стратегій декомпозиції домену [33, 34, 37].

Висновки. Наукова новизна роботи полягає в інтеграції асимптотичного аналізу та фізично обізнаних нейронних обчислень у рамках єдиної концепції кіберматематичного моделювання для задач напівпровідникової електроніки. Ця інтеграція дозволяє зберегти інтерпретованість класичних математичних моделей, водночас розширюючи їх обчислювальні можливості за допомогою сучасних методів машинного навчання.

Основні результати дослідження полягають у наступному:

- стаціонарна модель електронно-діркової плазми в активній області $p-i-n$ структури призводить до нелінійної сингулярно збуреної крайової задачі, розв'язок якої містить як регулярні, так і примежово-шарові складові;
- використання асимптотичного розкладу дозволяє розділити повільні та швидкі просторові масштаби та сформулювати підзадачі, більш придатні для нейромережової апроксимації;
- фізично-інформовані нейронні мережі забезпечують ефективний механізм апроксимації цих підзадач;
- комбінований асимптотично-нейронний підхід підвищує інтерпретованість чисельного розв'язку;
- запропонована методологія створює передумови для подальшого розвитку кіберматематичних моделей для напівпровідникової електроніки, включаючи обернені задачі, ідентифікацію параметрів та оптимізацію характеристик приладів.

Результати роботи демонструють: поєднання методів збурень та фізично-інформованого машинного навчання є не лише технічним обчислювальним вдосконаленням, а й методологічною основою для нового класу гібридних моделей у напівпровідниковій електроніці. Це узгоджується із загальною тенденцією наукового машинного навчання, де фізичні закони та методи, керовані даними, інтегруються для розв'язання складних задач.

Отримані результати можуть бути корисними для аналізу $p-i-n$ діодних структур, плазмових областей у напівпровідникових приладах та інших прикладних задач, де суттєву роль відіграють багатомасштабні процеси переносу та сингулярні збурення.

Список бібліографічного опису

1. Sze S. M., Ng K. K. *Physics of Semiconductor Devices*. 3rd ed. Hoboken: Wiley, 2007.
2. [Markowich P. A., Ringhofer C. A., Schmeiser C. *Semiconductor Equations*. Vienna: Springer, 1990.
3. Jerome J. W. *Analysis of Charge Transport: A Mathematical Study of Semiconductor Devices*. Berlin: Springer, 1996.
4. Selberherr S. *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices*. Vienna: Springer, 1984.
5. [O'Malley R. E. *Singular Perturbation Methods for Ordinary Differential Equations*. New York: Springer, 1991.
6. Smith D. R. *Singular-Perturbation Theory: An Introduction with Applications*. Cambridge : Cambridge University Press, 1985.
7. Vasil'eva A. B., Butuzov V. F., Kalachev L. V. *The Boundary Function Method for Singular Perturbation Problems*. Philadelphia : SIAM, 1995.
8. [Bomba A., Moroz I., Bojchura M. Development and Analysis of the Plasma Characteristics Mathematical Model in the Active Region of Integrated P-I-N-Structures by the Perturbation Theory and Conformal Maps Methods. *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*. 2021. No. 5(113). P. 51–61.
9. Andrii BOMBA, Sergiy LYASHKO, Ihor MOROZ. Simulation of the Electron–Hole Plasma State by Perturbation Theory Methods In book: *Computational Methods and Mathematical Modeling in Cyberphysics and Engineering Applications*. London: Wiley, 2024. pp. 245-272. DOI:10.1002/9781394284344.ch10.
10. Raissi M., Perdikaris P., Karniadakis G. E. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*. 2019. Vol. 378. P. 686–707.
11. Lu L., Meng X., Mao Z., Karniadakis G. E. DeepXDE: A deep learning library for solving differential equations. *SIAM Review*. 2021. Vol. 63, No. 1. P. 208–228.
12. Cao Y., Fang Z., Wu Y., Zhou D. X., Gu Q. A Physics-Informed Neural Networks Algorithm for Simulating Semiconductor Devices. 2023.
13. Wang S., Zhao P., Song T. ASPINN: An asymptotic strategy for solving singularly perturbed differential equations. arXiv preprint. 2024.
14. Gie G. M. et al. Singular layer physics-informed neural network method for singularly perturbed problems. *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 2025.
15. Markowich P. A., Ringhofer C. A., Schmeiser C. *Semiconductor Equations*. Vienna : Springer, 1990.
16. Jerome J. W. *Analysis of Charge Transport: A Mathematical Study of Semiconductor Devices*. Berlin : Springer, 1996.

17. Cao B., Wang Y.-D., Zhang N.-E., Liang Y.-Z., Yin W.-Y. A Physics-Informed Neural Networks Algorithm for Simulating Semiconductor Devices. 2023 International Applied Computational Electromagnetics Society Symposium (ACES-China). 2023. P. 1–3. DOI: 10.23919/ACES-China60289.2023.10249274.
18. Riganti R. et al. DDNet: A Unified Physics-Informed Deep Learning Solver for Semiconductor Drift-Diffusion Equations. arXiv preprint, arXiv:2509.08073. 2025.
19. O'Malley R. E. Singular Perturbation Methods for Ordinary Differential Equations. New York : Springer, 1991.
20. Scharfetter D. L., Gummel H. K. Large-signal analysis of a silicon Read diode oscillator. IEEE Transactions on Electron Devices. 1969. Vol. 16, No. 1. P. 64–77.
21. Wang S., Zhao P., Song T. ASPINN: An Asymptotic Strategy for Solving Singularly Perturbed Differential Equations. arXiv preprint, arXiv:2409.13185. 2024.
22. Lu L., Meng X., Mao Z., Karniadakis G. E. DeepXDE: A Deep Learning Library for Solving Differential Equations. SIAM Review. 2021. Vol. 63, No. 1. P. 208–228. DOI: 10.1137/19M1274067.
23. Raissi M., Perdikaris P., Karniadakis G. E. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. Journal of Computational Physics. 2019. Vol. 378. P. 686–707. DOI: 10.1016/j.jcp.2018.10.045.
24. Selberherr S. Analysis and Simulation of Semiconductor Devices. Vienna : Springer, 1984.
25. Karniadakis G. E. et al. Physics-informed machine learning. Nature Reviews Physics. 2021. Vol. 3. P. 422–440. DOI: 10.1038/s42254-021-00314-5.
26. Baydin A. G., Pearlmutter B. A., Radul A. A., Siskind J. M. Automatic differentiation in machine learning: a survey. Journal of Machine Learning Research. 2018. Vol. 18, No. 153. P. 1–43.
27. Wang S., Zhao P., Song T. ASPINN: An Asymptotic Strategy for Solving Singularly Perturbed Differential Equations. arXiv preprint, arXiv:2409.13185. 2024.
28. Long W., Zeng X., Chen W., Liu Y. Chien-physics-informed neural networks for solving singularly perturbed differential equations. Applied Mathematics and Mechanics. 2024. Vol. 45. DOI: 10.1007/s10483-024-3149-8.
29. Wang S., Teng Y., Perdikaris P. Understanding and mitigating gradient flow pathologies in physics-informed neural networks. SIAM Journal on Scientific Computing. 2021. Vol. 43, No. 5. P. A3055–A3081. DOI: 10.1137/20M1318043.
30. Glorot X., Bengio Y. Understanding the difficulty of training deep feedforward neural networks. Proceedings of the Thirteenth International Conference on Artificial Intelligence and Statistics, PMLR 9. 2010. P. 249–256.
31. Kingma D. P., Ba J. Adam: A Method for Stochastic Optimization. Proceedings of the 3rd International Conference on Learning Representations. 2015.
32. Cuomo S. et al. Scientific Machine Learning Through Physics-Informed Neural Networks: Where we are and What's Next. Journal of Scientific Computing. 2022. Vol. 92. P. 88. DOI: 10.1007/s10915-022-01939-z.
33. Bischof R., Kraus M. Multi-Objective Loss Balancing for Physics-Informed Deep Learning. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2025. P. 117914. DOI: 10.1016/j.cma.2025.117914.
34. Rathore P. et al. Challenges in Training PINNs: A Loss Landscape Perspective. Proceedings of the 41st International Conference on Machine Learning. 2024.
35. Nocedal J., Wright S. J. Numerical Optimization. 2nd ed. New York : Springer, 2006.
36. Cao F., Chen Y., Gu Y., Yang H. Multistep asymptotic pre-training strategy based on physics-informed neural networks for singularly perturbed problems. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2024.
37. Jagtap A. D., Karniadakis G. E. Extended Physics-Informed Neural Networks (XPINNs): A Generalized Space-Time Domain Decomposition Based Deep Learning Framework for Nonlinear Partial Differential Equations. Communications in Computational Physics. 2020. Vol. 28, No. 5. P. 2002–2041. DOI: 10.4208/cicp.OA-2020-0164.

References

1. Sze S. M., Ng K. K. Physics of Semiconductor Devices. 3rd ed. Hoboken: Wiley, 2007.
2. [Markowich P. A., Ringhofer C. A., Schmeiser C. Semiconductor Equations. Vienna: Springer, 1990.
3. Jerome J. W. Analysis of Charge Transport: A Mathematical Study of Semiconductor Devices. Berlin: Springer, 1996.
4. Selberherr S. Analysis and Simulation of Semiconductor Devices. Vienna: Springer, 1984.
5. [O'Malley R. E. Singular Perturbation Methods for Ordinary Differential Equations. New York: Springer, 1991.
6. Smith D. R. Singular-Perturbation Theory: An Introduction with Applications. Cambridge : Cambridge University Press, 1985.
7. Vasil'eva A. B., Butuzov V. F., Kalachev L. V. The Boundary Function Method for Singular Perturbation Problems. Philadelphia : SIAM, 1995.
8. [Bomba A., Moroz I., Bojchura M. Development and Analysis of the Plasma Characteristics Mathematical Model in the Active Region of Integrated P-I-N-Structures by the Perturbation Theory and Conformal Maps Methods. Eastern-European Journal of Enterprise Technologies. 2021. No. 5(113). P. 51–61.
9. Andrii BOMBA, Sergiy LYASHKO, **Ihor MOROZ**. Simulation of the Electron–Hole Plasma State by Perturbation Theory Methods In book: Computational Methods and Mathematical Modeling in Cyberphysics and Engineering Applications. London: Wiley, 2024. pp. 245-272. DOI:10.1002/9781394284344.ch10.
10. Raissi M., Perdikaris P., Karniadakis G. E. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. Journal of Computational Physics. 2019. Vol. 378. P. 686–707.
11. Lu L., Meng X., Mao Z., Karniadakis G. E. DeepXDE: A deep learning library for solving differential equations. SIAM Review. 2021. Vol. 63, No. 1. P. 208–228.

12. Cao Y., Fang Z., Wu Y., Zhou D. X., Gu Q. A Physics-Informed Neural Networks Algorithm for Simulating Semiconductor Devices. 2023.
13. Wang S., Zhao P., Song T. ASPINN: An asymptotic strategy for solving singularly perturbed differential equations. arXiv preprint. 2024.
14. Gie G. M. et al. Singular layer physics-informed neural network method for singularly perturbed problems. *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 2025.
15. Markowich P. A., Ringhofer C. A., Schmeiser C. *Semiconductor Equations*. Vienna : Springer, 1990.
16. Jerome J. W. *Analysis of Charge Transport: A Mathematical Study of Semiconductor Devices*. Berlin : Springer, 1996.
17. Cao B., Wang Y.-D., Zhang N.-E., Liang Y.-Z., Yin W.-Y. A Physics-Informed Neural Networks Algorithm for Simulating Semiconductor Devices. 2023 International Applied Computational Electromagnetics Society Symposium (ACES-China). 2023. P. 1–3. DOI: 10.23919/ACES-China60289.2023.10249274.
18. Riganti R. et al. DDNet: A Unified Physics-Informed Deep Learning Solver for Semiconductor Drift-Diffusion Equations. arXiv preprint, arXiv:2509.08073. 2025.
19. O'Malley R. E. *Singular Perturbation Methods for Ordinary Differential Equations*. New York : Springer, 1991.
20. Scharfetter D. L., Gummel H. K. Large-signal analysis of a silicon Read diode oscillator. *IEEE Transactions on Electron Devices*. 1969. Vol. 16, No. 1. P. 64–77.
21. Wang S., Zhao P., Song T. ASPINN: An Asymptotic Strategy for Solving Singularly Perturbed Differential Equations. arXiv preprint, arXiv:2409.13185. 2024.
22. Lu L., Meng X., Mao Z., Karniadakis G. E. DeepXDE: A Deep Learning Library for Solving Differential Equations. *SIAM Review*. 2021. Vol. 63, No. 1. P. 208–228. DOI: 10.1137/19M1274067.
23. Raissi M., Perdikaris P., Karniadakis G. E. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*. 2019. Vol. 378. P. 686–707. DOI: 10.1016/j.jcp.2018.10.045.
24. Selberherr S. *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices*. Vienna : Springer, 1984.
25. Karniadakis G. E. et al. Physics-informed machine learning. *Nature Reviews Physics*. 2021. Vol. 3. P. 422–440. DOI: 10.1038/s42254-021-00314-5.
26. Baydin A. G., Pearlmutter B. A., Radul A. A., Siskind J. M. Automatic differentiation in machine learning: a survey. *Journal of Machine Learning Research*. 2018. Vol. 18, No. 153. P. 1–43.
27. Wang S., Zhao P., Song T. ASPINN: An Asymptotic Strategy for Solving Singularly Perturbed Differential Equations. arXiv preprint, arXiv:2409.13185. 2024.
28. Long W., Zeng X., Chen W., Liu Y. Chien-physics-informed neural networks for solving singularly perturbed differential equations. *Applied Mathematics and Mechanics*. 2024. Vol. 45. DOI: 10.1007/s10483-024-3149-8.
29. Wang S., Teng Y., Perdikaris P. Understanding and mitigating gradient flow pathologies in physics-informed neural networks. *SIAM Journal on Scientific Computing*. 2021. Vol. 43, No. 5. P. A3055–A3081. DOI: 10.1137/20M1318043.
30. Glorot X., Bengio Y. Understanding the difficulty of training deep feedforward neural networks. *Proceedings of the Thirteenth International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*, PMLR 9. 2010. P. 249–256.
31. Kingma D. P., Ba J. Adam: A Method for Stochastic Optimization. *Proceedings of the 3rd International Conference on Learning Representations*. 2015.
32. Cuomo S. et al. Scientific Machine Learning Through Physics-Informed Neural Networks: Where we are and What's Next. *Journal of Scientific Computing*. 2022. Vol. 92. P. 88. DOI: 10.1007/s10915-022-01939-z.
33. Bischof R., Kraus M. Multi-Objective Loss Balancing for Physics-Informed Deep Learning. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2025. P. 117914. DOI: 10.1016/j.cma.2025.117914.
34. Rathore P. et al. Challenges in Training PINNs: A Loss Landscape Perspective. *Proceedings of the 41st International Conference on Machine Learning*. 2024.
35. Nocedal J., Wright S. J. *Numerical Optimization*. 2nd ed. New York : Springer, 2006.
36. Cao F., Chen Y., Gu Y., Yang H. Multistep asymptotic pre-training strategy based on physics-informed neural networks for singularly perturbed problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2024.
37. Jagtap A. D., Karniadakis G. E. Extended Physics-Informed Neural Networks (XPINNs): A Generalized Space-Time Domain Decomposition Based Deep Learning Framework for Nonlinear Partial Differential Equations. *Communications in Computational Physics*. 2020. Vol. 28, No. 5. P. 2002–2041. DOI: 10.4208/cicp.OA-2020-0164.

Історія статті:

Отримано: 12.05.2026 Доопрацьовано: 19.05.2026 Прийнято до друку: 23.05.2026 Опубліковано: 29.05.2026