



**MAPbI₃ PEROVSKİT GÜNEŞ HÜCRELERİ İÇİN MAKİNE ÖĞRENİMİ
YAKLAŞIMI**

Süha Gül KARA

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FOTONİK BİLİMİ VE MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

NİSAN 2025

ETİK BEYAN

Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Tez Yazım Kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmada;

- Tez içinde sunduğum verileri, bilgileri ve dokümanları akademik ve etik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
- Tüm bilgi, belge, değerlendirme ve sonuçları bilimsel etik ve ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu,
- Tez çalışmada yararlandığım eserlerin tümüne uygun atıfta bulunarak kaynak gösterdiğimi,
- Kullanılan verilerde herhangi bir değişiklik yapmadığımı,
- Bu tezde sunduğum çalışmanın özgün olduğunu, bildirir, aksi bir durumda aleyhime doğabilecek tüm hak kayıplarını kabullendiğimi beyan ederim.

Süha Gül KARA

15/04/2025

MAPbI₃ PEROVSKİT GÜNEŞ HÜCRELERİ İÇİN MAKİNE ÖĞRENİMİ YAKLAŞIMI (Yüksek Lisans Tezi)

Süha Gül KARA

GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Nisan 2025

ÖZET

Bu çalışmada, çoklu çıktı regresyonu öğrenimi kullanılarak MAPbI₃ (Metilamonyum kurşun iyodür) perovskit güneş hücresinin PCE, V_{oc} , J_{sc} , FF parametrelerini tahmin edilmesi amacıyla Rastgele Orman (RF), Çok Katmanlı Algılayıcı (MLP) ve Derin Sinir Ağı (DNN) modelleri kullanılmıştır. Modeller eğitim verileri üzerinde eğitilmiş ve doğruluk ve güvenilirliklerini değerlendirmek için üç metrik R^2 skoru, Ortalama Mutlak Hata (MAE) ve Ortalama Kare Hatanın Kökü (RMSE) kullanılarak test verileri üzerinde değerlendirilmiştir. RF modelini kullanarak test ve eğitim verileri için R^2 değeri 0,80-0,54, RMSE değeri 0,05-2,58, MAE değerleri ise 0,03-1,76 aralığında bulunmuştur. MLP modeli için test ve eğitim verilerinin R^2 değeri 0,70-0,42, RMSE değeri 0,06-3,18, MAE değerleri ise 0,04-2,09 aralığında bulunmuştur. DNN modelinin test ve eğitim verileri için R^2 değeri 0,70-0,36, RMSE değeri 0,06-3,29, MAE değerleri ise 0,04-2,17 aralığında bulunmuştur. Modelin performansı ve önyargılı olup olmadığını ve aşırı uyum gösterip göstermediğini tespit etmek için parite ve kalıntı grafikleri çizilmiştir. Grafiklerde bu uygulanan üç modelin çok yüksek seviyede aşırı uyum ve önyargıya rastlanmamaktadır. RF modelinin test R^2 0,75-0,54, RMSE değeri 0,06-2,58, MAE değerleri ise 0,04-1,76 aralığında bulunmuştur. Parite ve kalıntı grafiklerinin incelenmesi sonucunda RF modelinin diğer kullanılan modellere kıyasla daha iyi performans sergilediği gözlemlenmiştir. Özellik önemlerinin elde edilmesi amacıyla SHAP grafikleri çizilmiştir. Çoklu çıktı yaklaşımı öğrenimi, karmaşık bir süreç olan perovskit güneş hücresi (PSC) tasarımı konusunda kolaylıklar sağlayabilir.

Bilim Kodu : 20217
Anahtar Kelimeler : MAPbI₃, makine öğrenmesi, perovskit güneş hücresi
Sayfa Adedi : 64
Danışman : Doç. Dr. Nihan AKIN SÖNMEZ

MACHINE LEARNING APPROACH FOR MAPbI₃ PEROVSKITE SOLAR CELLS

(M.Sc. Thesis)

Süha Gül KARA

GAZİ UNIVERSITY

GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES

April 2025

ABSTRACT

In this study, Random Forest (RF), Multilayer Perception (MLP) and Deep Neural Network (DNN) models were used to estimate PCE, V_{oc} , J_{sc} , FF parameters using multiple output regression learning. The models were trained on the training data and evaluated on the test data using three metrics - R^2 score, Mean Absolute Error (MAE) and Root Mean Square Error (RMSE) to assess their accuracy and reliability. Using the RF model, the R^2 value was found to be 0.80-0.54, the RMSE value was 0.05-2.58, and the MAE values were in the range of 0.03-1.76 for the test and training data. For the MLP model, the R^2 value for the test and training data was 0.70-0.42, the RMSE value was 0.06-3.18, and the MAE values were in the range of 0.04-2.09. For the test and training data of the DNN model, the R^2 value was 0.70-0.36, the RMSE value was 0.06-3.29, and the MAE values were in the range of 0.04-2.17. Parity and residual plots were drawn to determine the performance of the model and whether it is biased or overfitting. The graphs show that these three models do not exhibit a high level of overfitting and bias. The test R^2 of the RF model was found to be in the range of 0.75-0.54, RMSE value was found to be in the range of 0.06-2.58, MAE values were found to be in the range of 0.04-1.76. As a result of the analysis of the parity and residual plots, it was observed that the RF model performed better than the other models used. SHAP plots were drawn to obtain feature importance. Multiple output approach can help simplify the complex process of perovskite solar cell (PSC) design.

Science Code : 20217
Key Words : MAPbI₃, machine learning, perovskite solar cell
Page Number : 64
Supervisor : Assoc. Prof. Dr. Nihan AKIN SÖNMEZ

TEŞEKKÜR

Desteklerini ve sevgilerini her zaman hissettiğim en başta annem olmak üzere aileme.

Çalışmalarım boyunca bilimsel katkı ve yardımlarıyla beni yönlendirerek çalışmalarım için desteğini ve emeğini esirgemeyen değerli danışmanım Doç. Dr. Nihan AKIN SÖNMEZ hocama en içten teşekkürlerimi sunarım. Çalışmalarım boyunca deneyim ve tecrübelerini paylaşan, ilgi, hoşgörü ve yardımları için değerli hocam Prof. Dr. Süleyman ÖZÇELİK'e teşekkürlerimi sunarım.

Bu tez 2019K12-149045 nolu proje ile Türkiye Cumhuriyeti (T.C.) Cumhurbaşkanlığı Strateji ve Bütçe Başkanlığı tarafından desteklenmiştir.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	iv
ABSTRACT.....	v
TEŞEKKÜR.....	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....	ix
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	x
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	xii
1. GİRİŞ	1
2. TEORİK BİLGİLER	5
2.1. Güneş Hüceleri.....	5
2.1.1. Birinci nesil güneş hücreleri.....	6
2.1.2. İkinci nesil güneş hücreleri	6
2.1.3. Üçüncü nesil güneş hücreleri	7
2.1.4. Dördüncü nesil güneş hücreleri.....	8
2.2. Güneş Hücrelerin Elektriksel Özellikleri	9
2.2.1. Açık devre gerilimi (V_{oc})	9
2.2.2. Kısa devre akım yoğunluğu (J_{sc}).....	10
2.2.3. Dolum faktörü (FF).....	10
2.2.4. Güç dönüşüm verimliliği (PCE).....	10
2.3. Perovskit Güneş Hücreleri	10
2.4. Perovskit Güneş Hücresinin Yapısı ve Çalışma Prensibi.....	11
2.5. Perovskit Güneş Hücrelerinin Kararsızlık Problemi.....	13
2.6. Makine Öğrenimi	15
2.6.1. Çoklu çıktı öğrenimi	17
3. YÖNTEM.....	21

	Sayfa
3.1. Veri Seti.....	22
3.2. Ön İşleme	23
3.3. Veri analizi	23
3.4. Modellerin oluşturulması	24
3.5. Rastgele Orman Regresyon Modeli	25
3.6. Çok Katmanlı Algılayıcı	26
3.7. Derin Sinir Ağları.....	27
3.8. Modellerin değerlendirilmesi	28
4. MODELLERİN ÇIKTILARI.....	29
4.1. RF Modelinin Çıktıları.....	30
4.2. MLP Modelinin Çıktıları.....	37
4.3. DNN Modelinin Çıktıları	42
5. SONUÇ VE ÖNERİLER	53
KAYNAKLAR	55
ÖZGEÇMİŞ	64

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 2.1. Çeşitli makine öğrenimi tekniklerini örnekleri.....	17
Çizelge 2.2. Problem türleri ve arasındaki farklar	18
Çizelge 4.1. Veri setinin içeriği	29
Çizelge 4.2. RF modelinin sonuçları.....	31
Çizelge 4.3. MLP modelinin çıktıları	37
Çizelge 4.4. DNN modelinin çıktıları	42

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. Güneş hücresi jenerasyonları	5
Şekil 2.2. Farklı nesil güneş hücresi çeşitleri ve verimlilikleri	9
Şekil 2.3. Kübik kristal yapıya sahip perovskit	11
Şekil 2.4. Şematik güneş hücresi diyagramı, foton absorpsiyonu tarafından oluşturulan eksitonların oluşumunu ve taşıyıcı taşıma durumlarını gösterir	13
Şekil 2.5. PSC'lerle ilgili çeşitli kararsızlık sorunları	14
Şekil 2.6. Makine Öğrenimi Teknikleri	15
Şekil 2.7. Problem tipleri ve meta-tahmin ediciler	18
Şekil 3.1. PSC'lerin elektriksel performans parametrelerinin tahminine yönelik iş akışının şeması	22
Şekil 3.2. Kullanılan veri setinin ana kategorileri	22
Şekil 3.3. Karar ağacı regresyonu	26
Şekil 3.4. MLP modelinin iş akış şeması	27
Şekil 3.5. DNN mimarisi	27
Şekil 4.2. RF modelinin VOC için tahmin edilen ve gerçek değerler grafiği.....	32
Şekil 4.3. RF modelinin Jsc için tahmin edilen ve gerçek değerler grafiği	33
Şekil 4.4. RF modelinin FF için tahmin edilen ve gerçek değerler grafiği.....	33
Şekil 4.5. RF modelinin PCE için tahmin edilen ve gerçek değerler grafiği.....	34
Şekil 4.6. RF modeli için V_{oc} kalıntı grafiği	35
Şekil 4.7. RF modeli için J_{sc} kalıntı grafiği.....	35
Şekil 4.8. RF modeli için FF kalıntı grafiği	36
Şekil 4.9. RF modeli için PCE kalıntı grafiği	36
Şekil 4.10. MLP modelinin V_{oc} için tahmin edilen ve gerçek değerler grafiği	38
Şekil 4.11. MLP modelinin J_{sc} için tahmin edilen ve gerçek değerler grafiği	38
Şekil 4.12. MLP modelinin FF için tahmin edilen ve gerçek değerler grafiği	39
Şekil 4.13. MLP modelinin PCE için tahmin edilen ve gerçek değerler grafiği.....	39

Şekil	Sayfa
Şekil 4.14. MLP modeli için V_{oc} kalıntı grafiği.....	40
Şekil 4.15. MLP modeli için J_{sc} kalıntı grafiği	41
Şekil 4.16. MLP modeli için FF kalıntı grafiği.....	41
Şekil 4.17. MLP modeli için PCE kalıntı grafiği.....	42
Şekil 4.18. DNN modelinin V_{oc} için tahmin edilen ve gerçek değerler grafiği	43
Şekil 4.19. DNN modelinin J_{sc} için tahmin edilen ve gerçek değerler grafiği.....	44
Şekil 4.20. DNN modelinin FF için tahmin edilen ve gerçek değerler grafiği	44
Şekil 4.21. DNN modelinin PCE için tahmin edilen ve gerçek değerler grafiği	45
Şekil 4.22. DNN modeli için V_{oc} kalıntı grafiği	46
Şekil 4.23. DNN modeli için J_{sc} kalıntı grafiği	46
Şekil 4.24. DNN modeli için FF kalıntı grafiği	47
Şekil 4.25. DNN modeli için PCE kalıntı grafiği	47
Şekil 4.26. MLP modelinin SHAP grafiği	49
Şekil 4.27. DNN modelinin SHAP grafiği.....	50
Şekil 4.28. RF modelinin SHAP grafiği	51

SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılmış simgeler ve kısaltmalar, açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmuştur.

Simgeler

J_{sc}	Kısa Devre Akım Yoğunluğu
P_L	Giriş gücü
P_{max}	Maksimum güç
V_{oc}	Açık Devre Voltajı

Açıklamalar

Kısaltmalar

Ag	Gümüş
Al	Alüminyum
a-Si	Amorf Silisyum
Au	Altın
CdTe	Kadmiyum Tellürid
CIGS	Bakır İndiyum Galyum Diselenit
c-Si	Tek Kristalli Silisyum
c-Si	Tek Kristalli Silisyum
DFT	Yoğunluk Fonksiyonel Teori
DFT	Yoğunluk Fonksiyonel Teori
DNN	Derin Sinir Ağı
DSSC	Boyaya Duyarlı Güneş Hücresi
ETL	Elektron Taşıma Katmanı
FF	Dolum Faktörü
FTO	Flor Katkılı Kalay Oksit
GaAs	Galyum Arsenit
HTL	Deşik Taşıma Katmanı
MAE	Ortalama Mutlak Hata
mc-Si	Monokristal Silisyum
ML	Makine Öğrenimi

Kısaltmalar**Açıklamalar****MLP**

Çok Katmanlı Algılayıcı

PCE

Enerji Güç Dönüşüm Verimliliği

pc-Si

Polikristal Silisyum

PSC

Perovskit Güneş Hücreleri

PV

Fotovoltaik

R²R² Katsayısı**RF**

Rastgele Orman

RMSE

Hatanın Ortalama Kare Kökü

1. GİRİŞ

Küresel ısınma ve iklim değişikliği, fosil yakıtlardan yenilenebilir enerji kaynaklarına doğru tamamen ve hızlı bir geçişi zorunlu kılmaktadır. Bu sebeplerden dolayı yenilebilir temiz enerji kaynaklarının kullanımına yönelik çalışmalar artış göstermektedir. Güneş enerjisi yenilenebilir kaynaklara yönelik artan talebi karşılamada dünya çapında önemli bir yere sahiptir. Güneş hücresi, güneş enerjisini kullanarak elektrik üretebilen bir fotovoltaik (PV) cihazdır. PV modülündeki güneş hücreleri, üretim malzemelerine göre farklı kategorilere ayrılabilir [1, 2]. Monokristal Silisyum (mc-Si), Polikristal Silisyum (pc-Si) Galyum Arsenit (GaAs) [3], Bakır İndiyum Galyum Diselenit (CIGS), Kadmiyum Tellürid (CdTe), amorf Silisyum (a-Si) [4], kuantum nokta güneş hücresi, perovskit güneş hücreleri (PSC) bunlardan bazılarıdır. Silisyum güneş hücresi pazar payının %90'ından fazlasını oluşturmaktadır [5]. Birinci ve ikinci nesil güneş pilleri uzun yıllardır kullanılmaktadır, ancak yüksek maliyetleri, karmaşık hazırlama teknolojileri ve çevre dostu olmamaları kullanımlarını sınırlamaktadır. Bu nedenle, bilim insanları uygun maliyetli ve çevre dostu yeni güneş pili malzemeleri aramaktadır. Şimdiye kadar, mc-Si hücreler ve tek kristalli silisyum güneş hücreleri (c-Si hücreler), CIGS güneş hücreleri, CdTe tabanlı güneş hücreleri, kuantum nokta duyarlı güneş hücreleri, organik-fotovoltaikler ve perovskit güneş hücreleri gibi farklı güneş hücreleri türleri rapor edilmiştir [1, 2, 4]. Özellikle, güç dönüşüm verimliliği ve malzemelerin maliyeti güneş pillerinin ticarileştirilmesinde kritik bir rol oynamaktadır [6].

PSC, silisyum tabanlı güneş hücreleri ile kıyaslandığında daha düşük maliyet, esneklik ve hafifliğinden dolayı çok ilgi çekmeye başlamıştır [7]. Perovskit güneş hücrelerinin enerji güç dönüşüm verimliliği (PCE) %3.8'den %25'e artış gösterirken, teorik olarak da %27 oranında büyük bir artış göstermiştir [8]. Metilamonyum kurşun iyodür (MAPbI₃), ayarlanabilir bant aralığı, yüksek ışık Emilimi ve uzun taşıyıcı difüzyon uzunlukları gibi mükemmel optoelektronik özellikleri nedeniyle önde gelen bir organik-inorganik hibrit perovskit malzemesi PSC'lerde çok yaygın olarak kullanılmaktadır. PSC'ler perovskit soğurucu tabaka, tipik olarak deşik taşıma katmanı (HTL) ve elektron taşıma katmanı (ETL) arasında yer alır. Bu katmanlar enerji seviyelerini hizalar, rekombinasyon kayıplarını azaltır ve cihaz kararlılığını iyileştirir. Ancak hava/ışık dengesizliği, malzeme toksisitesi ve perovskit soğurucu tabakasının parametrelerinin, ETL/HTL malzemelerinin ve katman kalınlıklarının hassas optimizasyonuna duyulan ihtiyaç gibi zorluklar ticarileştirmeyi

engellemektedir. PSC'lerin verimliliğin artırılması malzeme tasarımı, katman mühendisliği ve çevresel dayanıklılıkta dengeli çalışmalar yapılmaktadır [9]. Genel olarak, yüksek performanslı PSC geliştirilmesi, genellikle malzeme sentezi ve geliştirme, film özelliği optimizasyonu ve yeni cihaz üretim tekniklerini içeren bir deneme-yanılma yöntemine dayanmaktadır. Cihaz performansını optimize etmek uzun zaman alır ve bu da zaman, malzeme, ekipman ve insan gücü gibi önemli kaynaklar gerektirir [7]. Deneysel çalışmalara başlamadan önce ilk olarak teorik hesaplamaları yapıp sonra ki aşama olarak da deneysel çalışmalara geçilmektedir. Teorik hesaplamalar için örnek olarak Yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) ve makine öğrenimi (ML) kullanarak bir güneş hücresi tasarımı yapılabilir [10]. Yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) gibi modern kimyasal simülasyon araçları, bileşiklerin özelliklerinin laboratuvarda üretilmeden önce tahmin edilmesine olanak tanır ve istenen doğruluk düzeyine ulaşabilir. Deneysel koşullar ve teorik temellerle kısıtlanan geleneksel deneysel ve hesaplamalı modelleme genellikle çok fazla zaman ve kaynak tüketir. Ek olarak, PSC'lerin performans testi de deneysel edinim için uzun zaman gerektirir. Simülasyon yöntemlerinin çoğu yalnızca birkaç malzeme sistemi için yararlıdır ve çok sayıda malzemenin bulunduğu kimyasal uzay için kullanılamaz [7]. Geleneksel deney veya DFT yöntemleri artık mevcut ihtiyaçları karşılamamaktadır. Bunu ele almak için, malzeme bilişimine dayalı makine öğrenimi (ML) popüler hale gelmiştir. Malzemelerin tek bir özelliğini tahmin etmek için, DFT yöntemini kullanmak saatlerce hesaplama gerektirebilir. Ancak, eğitilmiş bir ML modeli ile, binlerce malzemenin özelliklerini tahmin etmek yalnızca birkaç saniye sürer. ML, yüksek doğrulukta tahmin sağlayabilecek modeller elde etmek için büyük veri setlerindeki özellikler ile hedef nitelikler arasında ilişki kurmayı öğrenir. Aynı zamanda, ML modelleri DFT ile karşılaştırılabilir bir doğruluk elde edebilir. PSC'lerin test edilmesi açısından, ML ayrıca PSC'lerin farklı deneysel koşullarından gelen verileri analiz ederek cihaz performansını tahmin edebilir ve bu da deneyler için gereken süreyi büyük ölçüde azaltır. Daha da önemlisi, ML'nin avantajları yalnızca model tahmininde değildir; ML, insanların gözlemlemesi zor olan fiziksel kuralları özetleyebilir. ML'nin anlaşılmasıyla, bu bilginin malzeme sentezinde uygulanması ve böylece deneysel işlemlere yardımcı olması mümkündür [11].

ML, bilgisayarların algoritmalar ve modeller yardımıyla kullanılan verilerden bilgiler öğrenip tahmin üretmesini ve seçim yapmasını sağlayan bir alandır. Genel olarak iki türe ayrılmaktadır. İlk olarak, algoritmanın yeni, görünmeyen verileri tahmin etmek için etiketli eğitim verilerinden öğrendiği denetimli öğrenmedir. İkincisi, algoritmanın verilerdeki

kalıpları veya ilişkileri tanımlamak için etiketsiz verilerden öğrendiği denetimsiz öğrenmedir [12]. Makine öğrenimi teknikleri, veri tabanı kullanarak karmaşık kimyasal süreçlerden veya mekanizmalardan kalıplar çıkarmada ve eğilimleri ortaya çıkarmada etkilidir [13]. PSC'lerinin optimizasyonunda ve tasarımında, makine öğreniminin kullanılması giderek artış göstermektedir [12]. ML'in gelişmesi ile, DFT için gereken hesaplama miktarının azaltılması, deneysel prosedürlerin ve sürelerin azaltılması gibi malzeme bilimi alanında ilerlemelere yol açması beklenmektedir. Veri toplama yöntemine göre, perovskit alanında ML araştırması iki türe ayrılabilir: DFT teorisi tarafından oluşturulan simüle edilmiş verilere ve gerçek deneylerden elde edilen deneysel verilere dayalı ML analizi [14]. Makine öğrenimi algoritmaları büyük miktarda veriyi analiz ederek PV performansı tahmin etmek ve cihaz verimliliğini artırmak gibi PSC'lerin performansının artırılmasına yardım edecek bilgi sağlar. Bu sayede deneyler daha verimli ve hızlı bir şekilde gerçekleştirilebilir ve PSC'lerin performansını etkileyen çeşitli parametreler arasındaki ilişkiler daha iyi bir şekilde anlaşılabilir [12].

Makine öğreniminde özellikle veri tabanına dayalı analizlerde, malzeme bilimi araştırmalarını ilerletme potansiyeline sahip olan çoklu çıktı regresyonu, belirli bir malzeme özelliğini veya davranışını tahmin eden geleneksel tek hedefli modellerin aksine, sadece tek bir model kullanarak birden fazla sonucu tahmin eder [4]. Birden fazla çıktıyı aynı anda tahmin etmek çok daha karışık karar verme problemlerini çözmenin mümkün olduğu anlamına gelir [16]. Bununla birlikte, çoklu çıktı yaklaşımının benimsenmesi, uygun algoritmaların seçilmesi, eksik veri setlerinin ele alınması ve tahmin doğruluğunun model yorumlanması ile dengelenmesi gibi zorlukları da beraberinde getirmektedir. Bununla birlikte, çoklu çıktı modellemesinin veri tabanları ve gelişmiş makine öğrenimi teknikleriyle entegre edilmesi, malzeme keşfinin hızlandırılmasını, sentetik stratejilerin optimizasyonunu, enerji depolama ve biyomedikal alanlara kadar geniş bir uygulama yelpazesi için özel malzemelerin tasarımını güçlendirir [4].

Bu tez çalışması kapsamında, güneş hücreleri nesilleri, PSC'lerin önemi, çalışma mekanizmaları, temel parametreleri ve kararsızlık sorunları, MAPbI₃ PSC'leri, makine öğrenmesi, çeşitleri ve modellerde kullanılmak üzere verilerin analizi ve hazırlanma aşamaları hakkında bilgi verildi. Daha sonra, kullanılan makine öğrenmesi modellerinin J_{SC} , V_{OC} , FF ve PCE çıktılarının R^2 , RMSE, MAE değerleri ile Parite ve kalıntı grafikleri elde edildi. Hedef parametrelerin tahmininde kullanılan modeller için veri setinde bulunan

özelliklerin hangisinin daha önemli olduğunu bulmak amacıyla SHAP grafikleri çizildi. Son olarak, elde edilen model çıktıları değerlendirilip literatür ile karşılaştırıldı ve gelecek çalışmaların nasıl ilerleyebileceği için öneriler verildi.

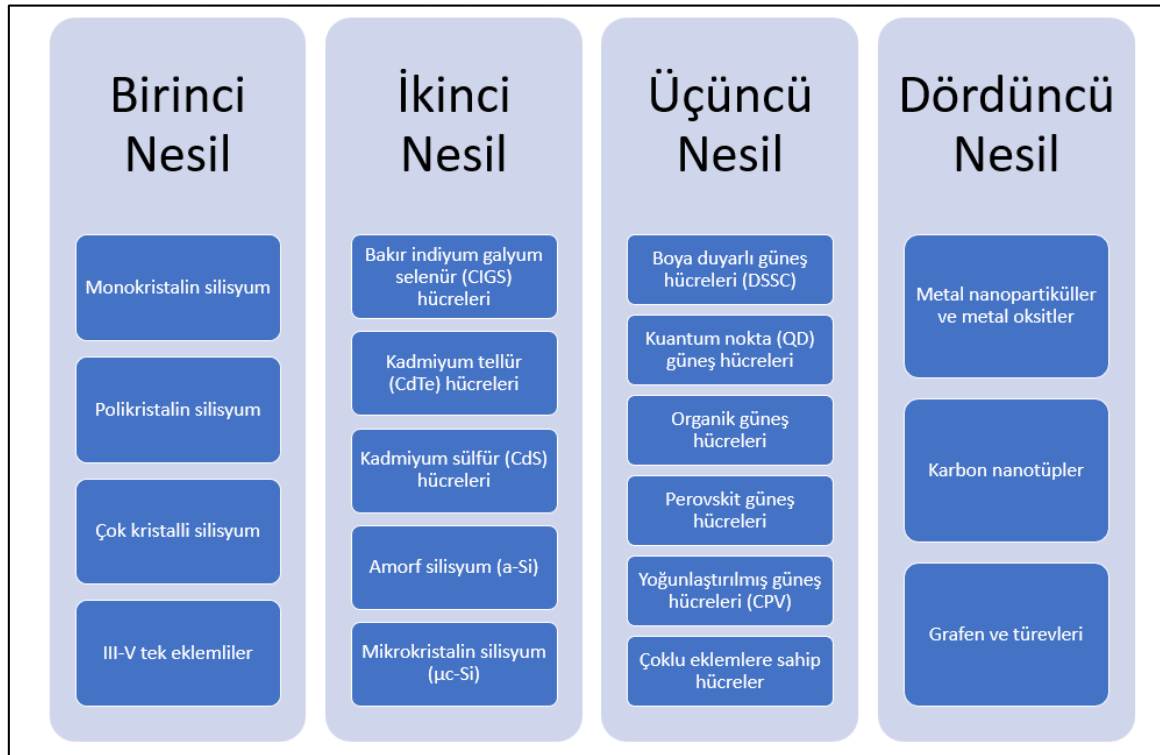


2. TEORİK BİLGİLER

2.1. Güneş Hücreleri

Güneş hücreleri güneşten gelen ışığı elektrik enerjisine çeviren cihazlardır [4]. PV teknolojilerin performansını değerlendirmek için kullanılan en yaygın ölçüm, güneş enerjisi girişinin elektrik enerjisi çıkışına oranını ifade eden güç dönüşüm verimliliğidir (PCE). PCE, sistemin kısa devre akımı (I_{sc}), açık devre voltajı (V_{oc}) ve dolum faktörü (FF) gibi birden fazla parametreye ve dolayısıyla temel malzeme özelliklerine ve üretim hatalarına bağlıdır. PV hücrelerin yapımında en verimli ve uygun maliyetli malzemeyi bulmak için bu alanda pek çok araştırma yapılmıştır [3].

Teknolojik gelişmeler ile, güneş hücrelerinin performansını arttırmak ve maliyetini azaltmak amacıyla güneş hücreleri yıllar içinde farklı kategorilere ayrılmıştır [4]. PV hücreler, birinci, ikinci, üçüncü ve dördüncü olmak üzere dört ana nesile ayrılabilir [17]. PV teknolojisinin tam sınıflandırma listesi Şekil 2.1'de gösterilmiştir.



Şekil 2.1. Güneş hücresi jenerasyonları

2.1.1. Birinci nesil güneş hücreleri

Birinci nesil, mc-Si ve pc-Si ve GaAs bazlı fotovoltaik hücre teknolojilerini içerir. Nispeten yüksek verimlilikleri nedeniyle en sık kullanılan hücrelerdir. Birinci nesil PV hücreler, mono-kristal, poli-kristal ve multi-kristal silisyumun yanı sıra tekli III-V bağlantılarına dayanmaktadır [3]. Silisyum tabanlı güneş hücrelerinde kristal silisyum aktif malzeme olarak kullanılır [4].

Mono-kristal silisyumun kristal yapısı homojendir. Dolayısıyla, örgü parametreleri, elektriksel özellikleri ve yönelimi kristal boyunca sabit kalması anlamına gelmektedir. Bu PV teknolojide güç verimliliğini arttırmak için kristal yapıları güneş hücreleri kullanılmıştır. Diğer teknolojilere kıyasla mono-kristal silisyum tabanlı güneş hücreleri daha pahalıdır, ancak enerji üretimi daha fazladır [4].

Poli-kristal silisyum, mono-kristal silisyuma kıyasla düşük maliyet ve verimlilik sağlar. Poli-kristal silisyum, geleneksel silisyum tabanlı güneş hücrelerinin üretimi için ana teknoloji olarak kullanılmaktadır [4, 17].

Mono-kristal malzeme, poli-kristal malzemeye kıyasla yüksek verimliliği nedeniyle yaygın olarak kullanılmaktadır. Mono-kristal silisyum kullanımının temel teknolojik zorlukları arasında hücre üretimi sırasında yüksek malzeme tüketimi, hücre üretim süreçleri ve bu hücrelerden oluşan sınırlı modül boyutları yer alır [3, 19].

III-V malzemelerinden, GaAs'ın verimliliği tek katmanlı yapıda %29,1'e ve yoğun güneş ışığı altında altı eklemlili yapı için %47,1'e ulaşarak en yüksek PV dönüşüm verimliliğini sağlar. Bu cihazlar aynı zamanda daha incedir (emilim katmanları tipik olarak 2 ile 5 μm kalınlığındadır) ve dolayısıyla kavisli yüzeylere yerleştirilebilen hafif, esnek cihazlar olarak üretilebilir. III-V cihazları yüksek stabiliteye sahiptir ve uzayda kullanım gibi zorlu uygulamalar için yüksek performans geçmişine sahiptir [3, 20].

2.1.2. İkinci nesil güneş hücreleri

İkinci nesil güneş hücreleri, silisyum güneş hücreleriyle kıyaslandığında çok daha ucuz olup verimlilikleri de daha düşüktür. İnce film güneş hücrelerinin performanslarını arttırmak için

önemli çalışmalar yapılmaktadır [4, 19]. İnce film teknolojisinde kullanılan aktif malzeme miktarı, silisyum ile karşılaştırıldığında çok daha azdır. CIGS, CdTe ve a-Si, ticari ince film teknolojilerinde kullanılan malzemelerden bazılarıdır [4, 22].

Günümüzde mevcut yarı iletkenler arasında, CdTe'nin tek eklemli konfigürasyon için teorik verimliliği çok yüksektir. CdTe PV teknolojisi, termal ve kimyasal stabilitesi sayesinde diğer teknolojilere kıyasla önemli bir verim artışına yol açmaktadır [4, 23].

Amorf silikon güneş pilleri, verimliliği %5 ve %7 arasında olan, çift ve üçlü eklem yapıları için %8 ve %10'a yükselen, açık ara en yaygın ince film teknolojisidir [3].

2.1.3. Üçüncü nesil güneş hücreleri

Üçüncü nesil güneş hücreleri yüksek PCE ve düşük üretim maliyetine sahiptir. İnce film teknolojileriyle uygulanması ekonomik olarak büyük etkiye sahip olabilir ve ayarlanabilir bant aralığı avantajına sahiptir. Bu yenilik, yüksek performans sağlamakla kalmayıp aynı zamanda daha düşük üretim maliyetleri ve uzun cihaz ömürleri sağlayacaktır [24-26].

Kuantum nokta güneş hücresi, kuantum noktaları (birkaç nanometre boyutunda) adı verilen parçacıklar kullanılarak tasarlanmaktadır. Kuantum noktasının boyutu, şekli ve malzemesi değiştirilerek, kuantum noktasının yaydığı ışığın frekansı hassas bir şekilde ayarlanabilir. Farklı boyut ve tipteki kuantum noktaları farklı frekanslarda ışık yayar ve bu frekans ihtiyaca göre hassas bir şekilde değiştirilebilir [27]. Ancak kuantum nokta güneş hücrelerinin geçici olarak tuzaklama etkisini indükleyerek elektronların ve holelerin yeniden birleşmesini doğrudan etkileyecek ara yüzey kusurlarını tutmaktadır [28].

Boyaya duyarlı güneş hücresi (DSSC), elektrolit, ışığa duyarlı anot ve foto-elektrokimyasal sistem arasında oluşan yarı iletken üzerine dayalı olarak üretilmektedir. DSSC'nin teorik PCE'si çok düşüktür, ancak fiyat/performans oranı nedeniyle tercih edilmektedir. DSSC'nin aydınlatma altındaki stabilitesi sınırlıdır ve kızılötesi bölgedeki soğurma katsayısının düşük olması bu teknolojiye temel bir zorluktur [4].

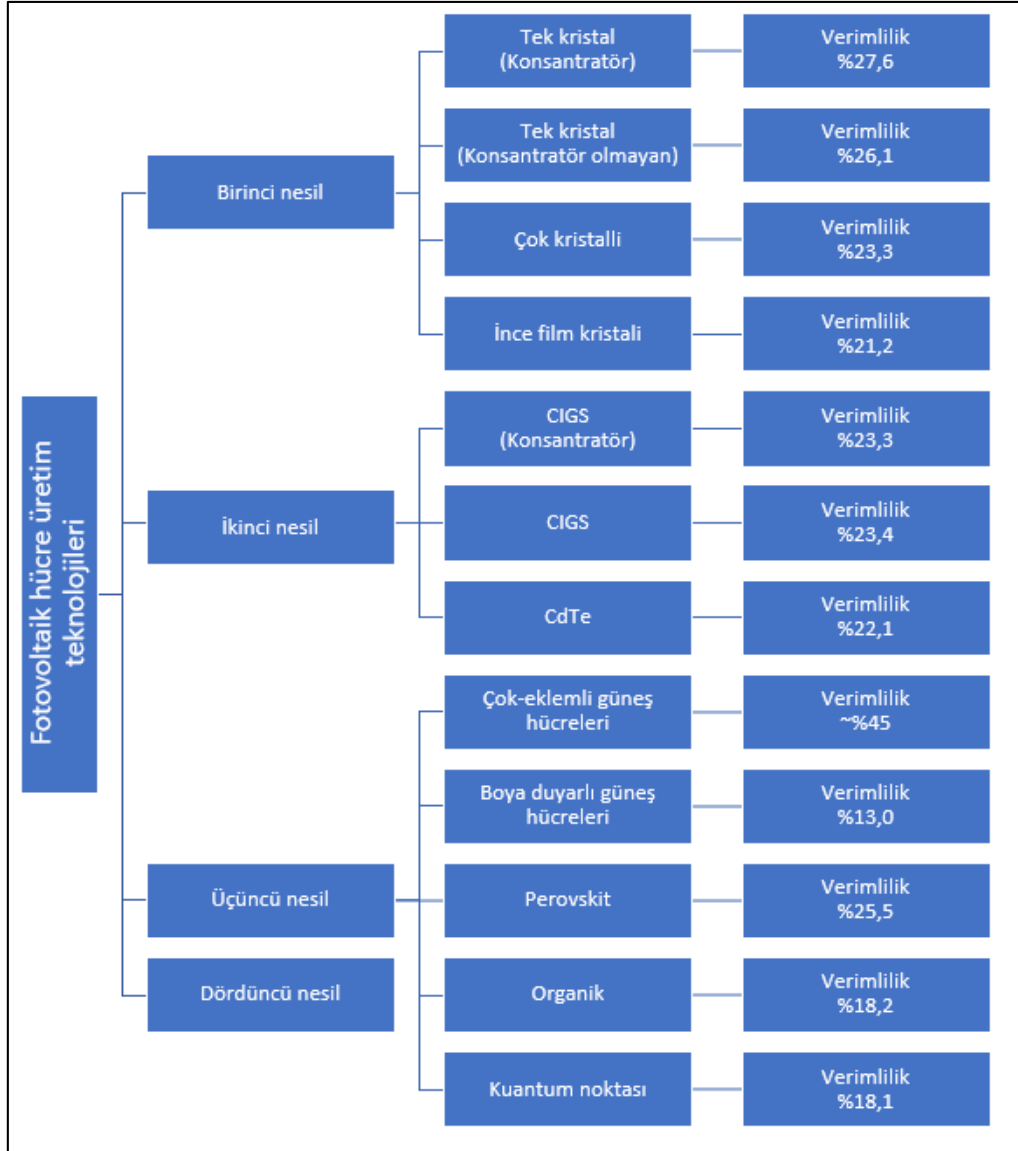
Organik güneş hücresi, organik polimerleri kullanarak güneş ışığını soğurur ve PV etki ile güneş ışığını elektrik enerjisine çevirir. Organik güneş hücrelerinin başlıca dezavantajları, silikon hücrelere kıyasla düşük karalılık, düşük verimlilik ve düşük dayanıklılıktır [4].

PSC, silisyum tabanlı güneş hücrelerine kıyasla daha düşük üretim maliyetine sahiptir. PSC'lerin PCE değerleri %3.8'den %25'e hızlı artış gösterdiği için çok umut vadeden bir güneş hücresi çeşidi olmuştur [8]. Teorik PCE değerleri %27'ye ulaşmaktadır [29]. Ancak, nem ve ultraviyole (UV) radyasyona maruz kaldıklarında (bazen oldukça hızlı bir şekilde) bozulma eğilimindedirler ve bunlar perovskitler için çözülmesi gereken sorunlardır [30].

2.1.4. Dördüncü nesil güneş hücreleri

Dördüncü nesil PV hücreler aynı zamanda hibrit inorganik hücreler olarak da bilinirler, çünkü polimer ince filmlerin düşük maliyetini ve esnekliğini, metal nanopartiküller ve metal oksitler, karbon nanotüpler, grafen ve türevleri gibi organik nanoyapıların stabilitesiyle birleştirirler. Çoğunlukla “nanofotovoltaik” olarak adlandırılan bu cihazlar, PV teknolojilerinin umut verici geleceği haline gelebilir [3].

İnce polimer katmanlar ve metal nanopartiküllerin yanı sıra çeşitli metal oksitler, karbon nanotüpler, grafen ve bunların türevlerini kullanan dördüncü nesil güneş hücreleri, düşük fiyat ve yüksek esneklik sağlar. Yüksek taşıyıcı hareketliliği, düşük direnç ve geçirgenlik gibi özelliklerinden dolayı, grafen bazlı malzemelerin mevcut geleneksel malzemeler yerine PV cihazlarda kullanılması düşünülmektedir. Bununla birlikte, yeterli cihaz performansını elde etmek için pratik uygulamalarının anahtarı, uygun yapı ve özelliklere sahip grafen malzemelerinin sentezidir [3].



Şekil 2.2. Farklı nesil güneş hücresi çeşitleri ve verimlilikleri [4]

2.2. Güneş Hücrelerin Elektriksel Özellikleri

2.2.1. Açık devre gerilimi (V_{oc})

Güneş hücresinden hiçbir akımın geçmediği voltaja açık devre voltajı V_{oc} denir ve güneş hücresinden elde edilebilecek maksimum voltajdır. Çeşitli çalışmalar, V_{oc} 'nin, güneş hücresinin donör materyalinin HOMO'su (en yüksek işgal edilen moleküler yörünge) ile alıcı materyalinin LUMO'su arasındaki enerji farkına (ΔE) güçlü bir bağımlılığı olduğunu göstermiştir [4].

2.2.2. Kısa devre akım yoğunluğu (J_{sc})

$V = 0$ olduğunda güneş hücresinden yalnızca kısa devre akımı akar. J_{sc} , bir güneş hücresinden elde edilebilecek maksimum akımı temsil eder. Bu akım, soğurulan foton sayısına, foto-aktif katmanın yüzey alanına, cihaz kalınlığına ve aktif malzemenin yük taşıma özelliklerine bağlıdır [4].

2.2.3. Dolum faktörü (FF)

Güneş hücresinin kalitesini belirleyen FF, maksimum güç çıkışının, V_{oc} ve J_{sc} çarpımına oranından elde edilebilir ve her zaman < 1 'dir [4].

$$FF = \frac{P_{max}}{P_L J_{sc} V_{oc}} \quad (2.1)$$

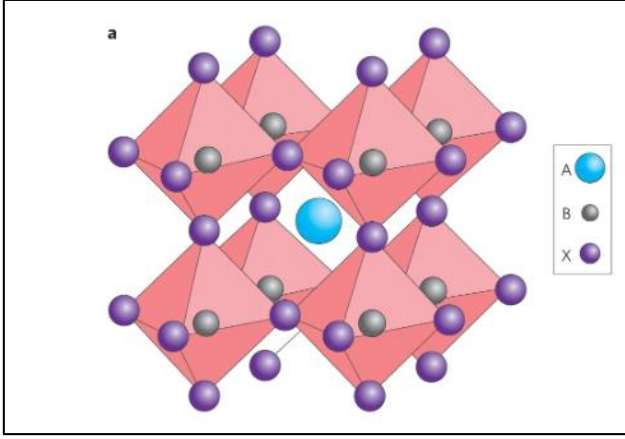
2.2.4. Güç dönüşüm verimliliği (PCE)

Güneş hücresinin, gelen foton başına ne kadar güç üreteceğini belirler ve güneş hücresinin kalitesinin bir ölçüsüdür. PCE, ışık girişi P_L başına maksimum elektrik gücü P_{max} 'tır [4].

$$PCE = \frac{P_{max}}{P_L} = J_{sc} \cdot V_{oc} \cdot FF \quad (2.2)$$

2.3. Perovskit Güneş Hücreleri

Son zamanlarda, organik-inorganik metal hibrit perovskitler, etkileyici optik ve elektriksel özellikleri nedeniyle büyük uygulama potansiyeli göstermiştir. Perovskitler, X'in bir anyon ve A ile B'nin farklı büyüklükte katyonları (A'nın B'den daha büyük) olduğu ABX_3 formülü ile tanımlanan malzemelerdir. Genellikle, A $CH_3NH_3^+$, $CH(NH_2)_2^+$ veya Cs^+ , B, Pb_2^+ veya Sn_2^+ , X ise I^- , Br^- veya Cl^- olmaktadır [30]. Genel ABX_3 yapısına sahip perovskitlerin kristal yapısı Şekil 2.3'de gösterilmiştir.



Şekil 2.3. Kübik kristal yapıya sahip perovskit [32]

Metilamonyum (MA, CH_3NH_3^+) bazlı perovskitler PSC'lerde en yaygın olarak kullanılan malzemelerdir. Aralarında en yaygını ise Metilamonyum kurşun iyodür (MAPbI_3)'dür. MAPbI_3 perovskite malzemesi, Schottky bariyer teorisine (1,34 eV) yaklaşan 1,5 eV'luk bir direkt bant aralığına sahip olduğu için tüm görünür bölgeki ışığı soğurabilir ve aynı zamanda yüksek güneş ışığı kullanım verimliliği sunar [33]. Organik yarı iletkenlerde, eksitonlar (ışık soğurulmasıyla oluşan bağlı elektron-delik çiftleri) tipik olarak yaklaşık 10 nm difüzyon uzunluklarına sahip iken, MAPbI_3 perovskit malzemelerinde eksiton difüzyon uzunlukları önemli ölçüde daha büyüktür ve bu da güneş hücrelerindeki performanslarını artırır [34, 35].

Perovskit malzemeler, hem elektronları hem de delikleri aktarabilen iki kutuplu taşıyıcı taşıma özellikleri sayesinde cihazların yapısını büyük ölçüde geliştirir. Üretilen yük taşıyıcıları olan elektronlar ve deliklerin tekrardan birleşmelerini engelleyebileceği bulunmuştur [36, 37]. MAPbI_3 perovskit malzemesinin eksiton bağlanma enerjisi yaklaşık 19 meV olduğu için, ışığa maruz kaldığında, üretilen eksitonlar oda sıcaklığında kendiliğinden ayrılabilir ve bu da perovskit tabakasının ışığı etkili bir şekilde soğurması ve serbest yük taşıyıcıları oluşturmaktan dolayı PSC'lerin verimliliğine büyük ölçüde katkıda bulunur [38].

2.4. Perovskit Güneş Hücresinin Yapısı ve Çalışma Prensibi

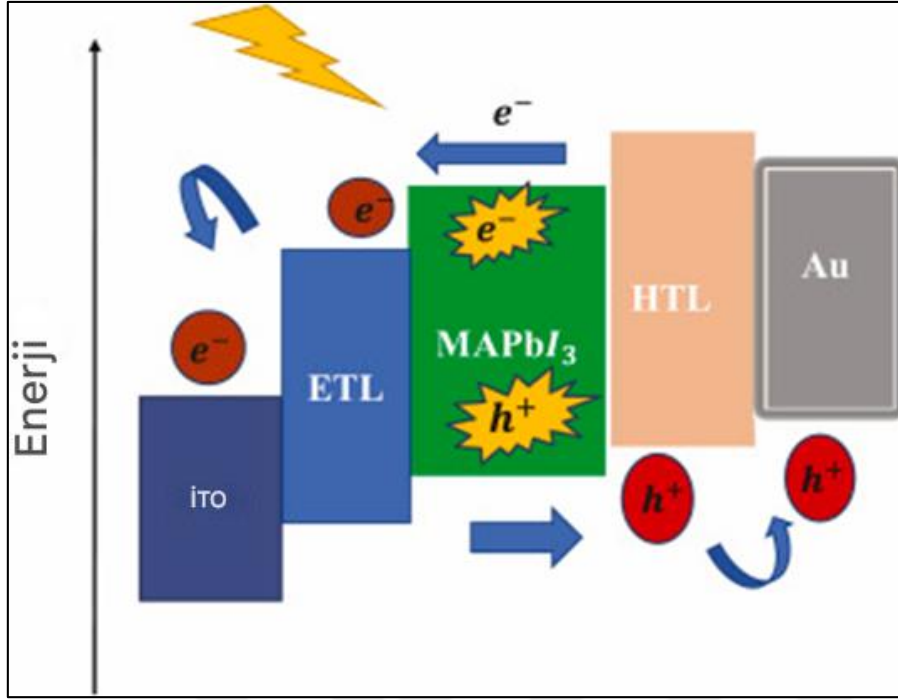
Perovskit güneş hücreleri genel olarak, hole taşıma katmanı (HTL) ve elektron taşıma katmanı (ETL) arasında yer alan aktif bir katmandan yapılır [39].

Perovskit güneş hücresi üç katmanın birleşiminden oluşmaktadır. Her bir katmanın basit bir açıklaması şu şekildedir:

1. Perovskit katmanı: Güneş ışınlarını absorbe edip elektrik enerjisine çevirmek için kullanılan aktif katmandır [39].
2. ETL katmanı: Holelerin ön elektrot olan anota gitmesini engelleyici katmandır [40].
3. HTL katmanı: Elektronları engelleme malzemeleri olarak kullanılır. Perovskit aktif katmanından holelerin arka elektrot olan katoda iletilmesini sağlar. Hole taşıma katmanı ayrıca elektron arka elektrota akışını engelleyen bir elektron engelleme katmanıdır [41].
4. Anot: Taşıyıcıların toplanması ve üretilmesinde önemli bir rol oynar. Düşük yansıtma özelliği ve iyi elektriksel iletkenlik özelliğinden dolayı flor katkılı kalay oksit (FTO), üst elektrot olarak kullanılır ve bir anot görevi görür [39].
5. Katot: Soğurma katmanı olan perovskit katmanında üretilen holeleri önemli ölçüde toplar. Bir akım cihazdan geçtiğinde, katot holeleri toplar. Alüminyum (Al) ve gümüş (Ag), altın (Au) en çok kullanılan katotlardır [42].

PSC'lerin çalışma prensibinin adımları şu şekildedir:

Aktif katman olan perovskitte bulunan holeler ve elektronlar, güneşten gelen yeterli enerjiye sahip fotonlar ($E > E_g$) tarafından uyarılırlar. Perovskitlerdeki eksitonların bağlama enerjilerindeki fark nedeniyle, eksitonlar yeni eksitonlar oluşturabilir veya serbest taşıyıcıları yani serbet elektron ve holeleri üretmek için etkileşime girebilirler. Holeler HTL'de ve elektronlar ise ETL'de birikir. ETL ve HTL sınırlarında, elektronlar ve holeler birikir ve sonunda bunlardan bazıları nötralize olur. Dış devre aracılığıyla, HTL'deki serbest holeler katotta ve ETL'deki elektronlar anotta toplanır [31].



Şekil 2.4. Şematik güneş hücresi diyagramı, foton absorpsiyonu tarafından oluşturulan eksitonların oluşumunu ve taşıyıcı taşıma durumlarını gösterir [39]

2.5. Perovskit Güneş Hücrelerinin Kararsızlık Problemi

Perovskit malzemelerin en büyük sorunları stabil olmamaları ve hücre düzeyinde çeşitli ara yüzlerde aynı anda birçok bozulmanın meydana gelmesidir. Nem, UV ışığı, yüksek sıcaklıklar ve dış havaya maruz kalma, bu bozulmalara doğrudan sebep olabilir [43]. Kararsızlık sorunları Şekil 2.5'de şematik olarak gösterilmektedir. Bu nedenle, yukarıda belirtilen koşullar aynı zamanda malzemenin organik tabakanın parçalanmasına, üst elektrot kararsızlığına, foto-bozunmaya ve kristalizasyon kararsızlığına da katkıda bulunabilir. Termal stres veya aydınlatmanın neden olduğu bozulma nedeniyle su veya oksijen yokluğunda bile çok sayıda bozunma başlayabilir. Hem kullanılan yük taşıma malzemesinin kararsızlığı hem de perovskit malzemenin doğal kararsızlığı, stabilitenin dezavantajlarından sorumludur [44].



Şekil 2.5. PSC'lerle ilgili çeşitli kararsızlık sorunları [32]

Henüz büyük ölçekte veya atmosferik koşullarda yüksek verimli PSC üretilmemiştir [45]. Perovskitler oksijene ve neme karşı çok hassas olduğundan imalat işlemlerinin kontrollü ve hareketsiz bir ortamda tamamlanması gerekmesi, bu sınırlamayı korunmuştur. Ayrıca, yerleşik cihazlar ortam koşulları altında ölçüldüğünde ciddi bozulmalar dikkat çekmektedir. Perovskit güneş hücrelerinin bozulmasından kaynaklanan verim düşüşü, perovskit güneş hücrelerinin dışarıda kullanımını kısıtlayabilir. Perovskit güneş hücreleri ışığa maruz kaldığında da bozulur. UV radyasyonu, oksijen ve neme bağlı stabilite sorunlarına ek olarak, perovskit güneş hücrelerinin termal stabilitesi de bir diğer etkindir. Yüksek sıcaklıklara maruz kalma, perovskit katmanının bozulmasına neden olabileceği yapılan çalışmalarda gösterilmiştir [46].

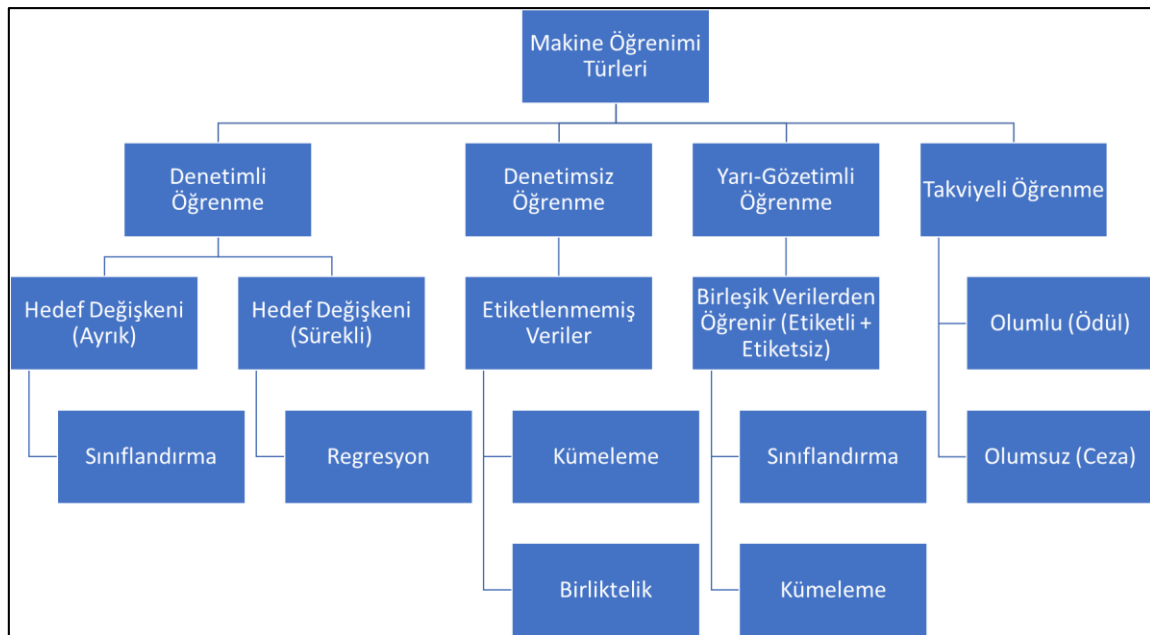
Bazı teorilere göre perovskit güneş hücrelerinin kararsızlığı, hole taşıma malzemesinin iletkenliğini arttırmak için kullanılan aşındırıcı veya higroskopik kimyasallardan da kaynaklanmaktadır [47, 48].

Metal elektrotların kullanımı da bugüne kadar bir sorun olmaya devam ediyor. Kullanılan elektrot türünün perovskit cihazların kimyasal stabilitesi üzerinde önemli bir etkisi vardır. Olası maksimum verimliliği nedeniyle Au, oldukça pahalı olmasına rağmen modern perovskit cihazlarda elektrot olarak yaygın şekilde kullanılmaktadır. Maliyeti azaltmak için Au yerine Ag macunun kullanılabileceği öne sürülmüştür. Ancak Au kullanılan PSC karşılaştırıldığında Ag arka elektrotlu PSC düşük çevresel stabilite sergiler [49, 50].

2.6. Makine Öğrenimi

Makine öğrenimi verilerden bilgi elde edilmesi ile ilgilidir. İstatistik, yapay zeka ve bilgisayar biliminin kesiştiği bir araştırma alanıdır ve aynı zamanda tahmine dayalı analitik veya istatistiksel öğrenme olarak da bilinir [51]. ML, makineler verileri nasıl daha verimli şekilde kullanacaklarını öğretmek için kullanılır. Verileri görüntüledikten sonra verilerden elde edilen bilgilerin yorumlanamadığı durumlarda makine öğrenimini uygulanabilir. Mevcut veri kümelerinin bolluğu nedeniyle makine öğrenimine olan talep artmaktadır. Birçok endüstri, ilgili verileri çıkarmak için makine öğrenimini uygulamaktır.

Makine öğrenimi algoritmaları, elde edilmek istenilen sonuca göre sınıflandırılabilir. En yaygın olarak kullanılan makine öğrenme teknikleri Şekil 2.6'da gösterilmiştir [52, 53].



Şekil 2.6. Makine Öğrenimi Teknikleri [41]

- Denetimli öğrenme: Tipik olarak makine öğreniminin örnek girdi-çıkı çiftlerine dayalı olarak, bir girdiyi bir çıktıya eşleyen bir öğrenme görevidir. Bir fonksiyon çıkarmak için etiketli eğitim verileri ve bir eğitim örnekleri koleksiyonu kullanır. Denetimli öğrenme, belirli bir dizi girdiden elde edilecek belirli hedefler belirlendiğinde gerçekleştirilir, yani görev odaklı bir yaklaşımdır [16, 53].
- Denetimsiz öğrenme: Denetimsiz öğrenme, etiketsiz veri kümelerini insan müdahalesine ihtiyaç duymadan analiz eder, yani veri odaklı bir süreçtir. Bu, üretken özelliklerin çıkarılması, anlamlı eğilimlerin ve yapıların belirlenmesi, sonuçlardaki gruplamalar ve keşif amaçları için yaygın olarak kullanılır [12, 53].
- Yarı denetimli öğrenme: Hem etiketli hem de etiketsiz veriler üzerinde çalıştığı için yukarıda bahsedilen denetimli ve denetimsiz yöntemlerin bir karışımı olarak tanımlanabilir [53]. Bu nedenle, “denetimsiz” öğrenme ile “denetimli” öğrenme arasında yer alır. Yarı denetimli öğrenme algoritmaları, genellikle diğeriyle ilişkili bilgileri kullanarak bu iki görevden birinde performansı artırmaya çalışır [54]. Yarı denetimli bir öğrenme modelinin nihai amacı, tahmin için modelden yalnızca etiketli veriler kullanılarak üretilenden daha iyi bir sonuç sağlamaktır [53].
- Takviyeli öğrenme: Yazılım araçlarının ve makinelerin verimliliğini artırmak için belirli bir bağlamda veya ortamda en uygun davranışın otomatik olarak değerlendirilmesini sağlayan bir tür makine öğrenimi algoritmasıdır, yani çevre odaklı bir yaklaşımdır. Bu öğrenme türü ödül veya cezaya dayanır ve nihai amacı, ödülü artırmak veya riski en aza indirmek için harekete geçmek üzere çevresel aktivistlerden elde edilen iç görüşleri kullanmaktır. Robotik, otonom sürüş görevleri, üretim ve tedarik zinciri lojistiği gibi sofistike sistemlerin otomasyonunu artırmaya veya operasyonel verimliliğini optimize etmeye yardımcı olabilecek yapay zeka modellerini eğitmek için güçlü bir araçtır, ancak temel veya basit problemleri çözmek için kullanılması tercih edilmez [51, 53].

Çeşitli uygulama alanlarında etkili modeller oluşturmak için farklı makine öğrenimi teknikleri, daha önce tartışılan verilerin doğasına ve hedef sonuca bağlı olarak öğrenme yeteneklerine göre önemli bir rol oynayabilir. Çizelge 2.1'de çeşitli makine öğrenimi tekniklerini örneklerle yer almaktadır.

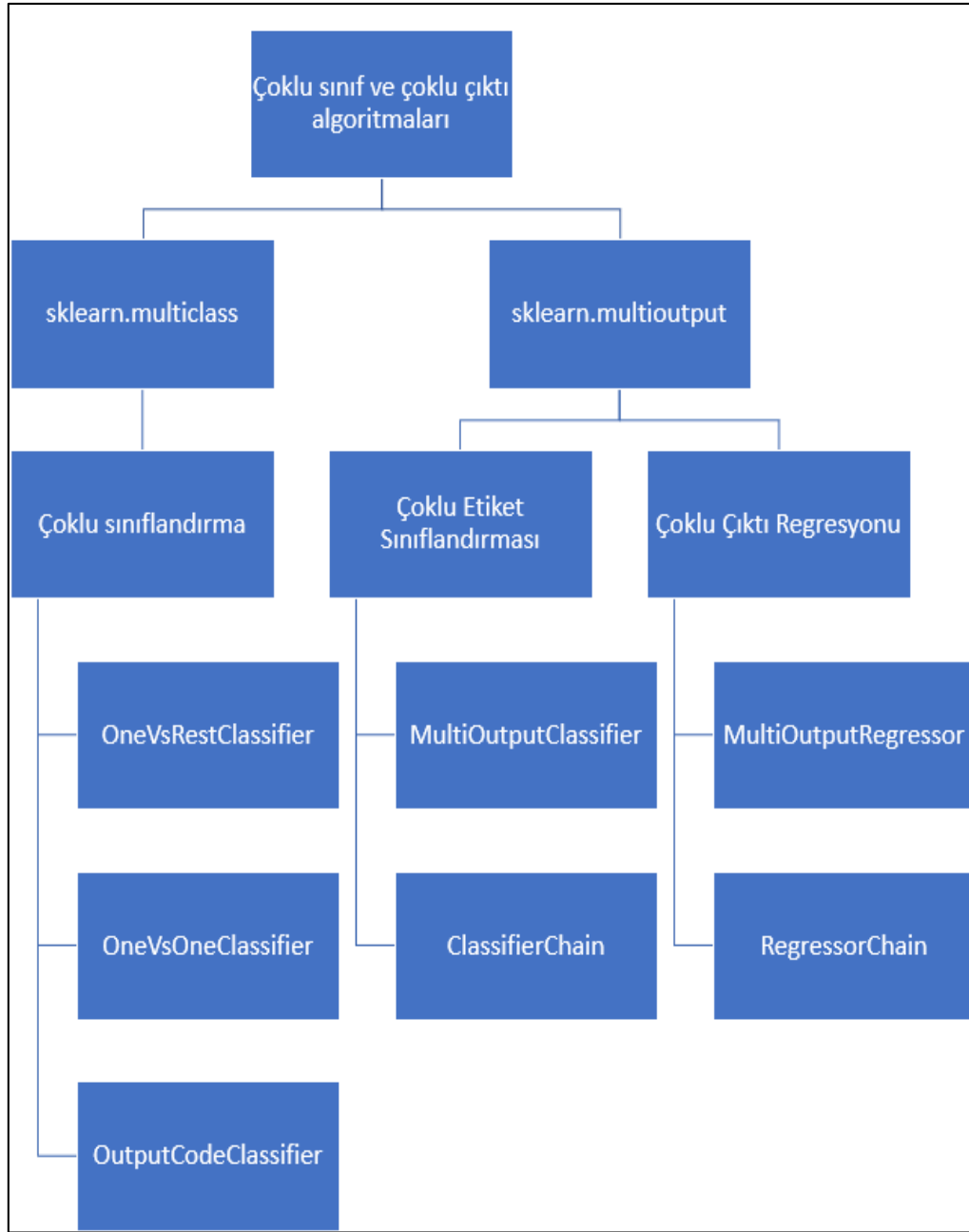
Çizelge 2.1. Çeşitli makine öğrenimi tekniklerini örnekleri

Öğrenme türü	Model oluşturma	Örnekler
Denetimli	Algoritmalar veya modeller etiketli verilerden öğreniyor (görev odaklı yaklaşım)	Sınıflandırma, regresyon
Denetimsiz	Algoritmalar veya modeller etiketlenmemiş verilerden öğrenir (Veri odaklı yaklaşım)	Kümeleme, ilişkilendirme, boyut azaltma
Yarı denetimli	Modeller birleştirilmiş veriler (etiketli+etiketsiz) kullanarak oluşturulur	Sınıflandırma, kümeleme
Takviye	Modüller ödül veya cezaya dayanmaktadır (ortam odaklı yaklaşım)	Sınıflandırma, kontrol

Regresyon analizi, bir veya daha fazla (x) tahmin edici değişkenin değerine dayalı olarak sürekli (y) bir sonuç değişkenini tahmin etmeyi sağlayan çeşitli makine öğrenimi yöntemlerini içerir. Sınıflandırma ve regresyon arasındaki en önemli fark, sınıflandırmanın farklı sınıf etiketlerini tahmin etmesi, regresyonun ise sürekli bir miktarın tahminini kolaylaştırmasıdır [53].

2.6.1. Çoklu çıktı öğrenimi

Geleneksel denetimli öğrenme günümüz gerçek dünyası için hızlı ve doğru tahminler sunan en köklü ve benimsenmiş makine öğrenimi paradigmalarından biridir. Geleneksel denetimli öğrenmenin amacı, verilen girdilerin her birinin tahmin görevleri için çıktı tek bir etiket şeklinde gelmektedir ve regresyon görevleri için bu tek bir değerdir. Ancak geleneksel denetimli öğrenme paradigması, günümüzün karmaşık karar verme süreçlerinin artan ihtiyaçlarıyla iyi başa çıkamamaktadır. Bu nedenle yeni makine öğrenmesi paradigmalarına ihtiyaç duyulmaktadır [16]. Çoklu çıktı öğrenimi bu kapsamda bir çözüm olarak ortaya çıkmıştır. Çoklu çıktı regresyonu, literatürde çoklu hedef, çoklu değişken veya çoklu yanıt regresyonu olarak da bilinir, aynı anda birden fazla gerçek değerli çıktı/hedef değişkenini tahmin etmeyi amaçlar [55].



Şekil 2.7. Problem tipleri ve meta-tahmin ediciler [56]

Çizelge 2.2. Problem türleri ve arasındaki farklar [56]

	Hedef sayısı	Hedef kardinalite	Geçerli hedef türü
Çoklu sınıflı sınıflandırma	1	>2	'multiclass'
Çoklu Etiket sınıflandırması	>1	2 (0 veya 1)	'multilabel-indicator'
Çoklu sınıf-çoklu çıktı sınıflandırması	>1	>2	'multiclass-multioutput'
Çoklu çıktı regresyonu	>1	Sürekli	'continuous-multioutput'

Çoklu çıktı öğreniminde birden fazla çıktıyı aynı anda tahmin etmektedir, bu da çok daha karmaşık karar verme problemlerini çözmenin mümkün olduğu anlamına gelir. Geleneksel tek çıktılı öğrenme ile karşılaştırıldığında, çok çıktılı öğrenme çok değişkenli bir yapıya sahiptir ve çıktılar yalnızca yapılandırılmış çıkarımla ele alınabilecek karmaşık etkileşimlere sahip olabilir. Buna ek olarak, çıktıların potansiyel olarak çeşitli veri türleri, çeşitli makine öğrenimi problemleri kategorilerine ve ilgili alt çalışma alanlarına yol açmıştır [16].

Literatürde çoklu hedef, çoklu değişken veya çoklu yanıt regresyonu olarak da bilinen çoklu çıktı regresyonu, birden fazla gerçek değerli çıktı/hedef değişkenini aynı anda tahmin etmeyi amaçlar. Çıktı değişkenleri ikili olduğunda, öğrenme problemi çok etiketli sınıflandırma olarak adlandırılır. Ancak, çıktı değişkenleri ayrık olduğunda (ikili olması gerekmez), öğrenme problemi çok boyutlu sınıflandırma olarak adlandırılır. Farklı geçmişlerine rağmen, bu gerçek dünya uygulamaları eksik veriler (yani, bazı özellik/hedef değerleri gözlenmediğinde), genellikle gerçek alanların karmaşıklığından kaynaklanan gürültünün varlığı ve en önemlisi, çok değişkenli yapı ve birden fazla özellik/hedef değişkeni arasındaki bileşik bağımlılıklar gibi birçok zorluğa yol açar. Bu zorluklarla başa çıkarken, çoklu çıktı regresyon yöntemlerinin, tek çıktı yöntemleriyle karşılaştırıldığında, genel olarak daha iyi bir tahmin performansı sağladığı kanıtlanmıştır. Çoklu çıktı regresyon yöntemleri, yalnızca özellikler ve karşılık gelen hedefler arasındaki temel ilişkileri değil, aynı zamanda hedefler arasındaki ilişkileri de dikkate alarak çoklu çıktı veri kümelerini etkili bir şekilde modellemenin yollarını da sağlar ve böylece gerçek dünya problemlerinin daha iyi yorumlayabilir. Çoklu hedef yaklaşımlarının bir diğer avantajı, daha iyi hesaplama verimliliğine sahip daha basit modeller üretebilmeleridir [16].

Bir veya daha fazla özelliği ve bir çıktısı olan veri noktalarından oluşan bir veri kümesi verildiğinde, tek çıktılı regresyon, bir veri noktasının özelliğinden çıktıya bir eşleme işlevi öğrenerek herhangi bir veri noktası için çıktıyı doğru bir şekilde tahmin etmeyi amaçlar. Ancak, birçok veri kümesinin birden fazla çıktısı vardır ve çıktıları ayrı ayrı ele almak mümkün olsa da bunu yapmak çıktılar arasındaki potansiyel korelasyonları göz ardı eder ve böylece her eşleme işlevini öğrenirken mevcut tüm bilgileri kullanmaz. Bu nedenle, birden fazla çıktıyı aynı anda tahmin etmek faydalı olabilir [57].

Geleneksel tek hedefli modellerin aksine çoklu çıktı yaklaşımı ile sadece tek bir model kullanılarak birden fazla sonucu tahmin edebilmesinden dolayı özellikle veri tabanına dayalı analizlerde malzeme bilimi arařtırmalarını ilerletme potansiyeline sahiptir [15].

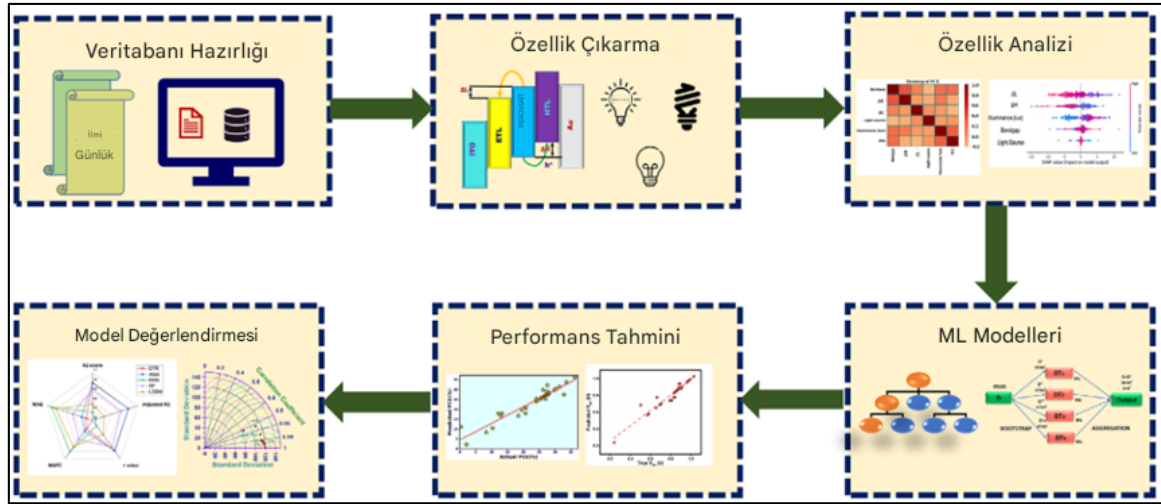


3. YÖNTEM

Bu çalışmada MAPbI₃ PSC'lerin güç dönüşüm verimliliği (PCE), açık devre gerilimi (V_{oc}), kısa devre akım yoğunluğunu (J_{sc}) ve dolum faktörü (FF) parametrelerini tahmin etmek için Rastgele Orman (RF), Çok katmanlı algılayıcı (MLP) ve Derin sinir ağları (DNN) modelleri kullanıldı. Bu çalışma kapsamında iş akış şeması şu şekildedir:

1. Veri toplama ve Ön işleme: İlk olarak modelleri eğitmek için Proskite Database Project tarafından oluşturulan veri setleri kullanılmıştır. Bu veri seti literatürde yayınlanan deneysel verilerden oluşmaktadır [58]. Şekil 3.2'de kullanılan veri setinin ana kategorileri gösterilmiştir. Bu veri setindeki eksik veriler ve çalışma kapsamında kullanılmayacak olan veriler temizlendi.
2. Özellik seçimi ve Çıkarımı: Tahmin edilmek istenen PCE, FF, V_{oc} , J_{sc} verileri uygun modellere girdi olarak kullanılması amacıyla özellik seçmek ve çıkarmak için analiz edildi. Modellerin performansını arttırmak için özellik ölçeklendirme uygulandı.
3. Verileri bölme: Veriler eğitim ve test veri setlerine ayrıldı. Eğitim veri kümesi kullanılan modelleri eğitmek için kullanılırken, test veri kümesi modellerin performansını değerlendirmek için kullanıldı.
4. Modellerin Eğitimi: Kullanılan modeller eğitim verileri kullanılarak eğitildi.
5. Tahmin: Modeller girdi özelliklerini analiz ettikten sonra istenilen dört çıktı parametresine (PCE, FF, V_{oc} ve J_{sc}) dair tahminlerde bulundu.
6. Modellerin değerlendirilmesi: Kullanılan modellerin performansı Ortalama Mutlak Hata (MAE), Hatanın Ortalama Kare Kökü (RMSE), R^2 Katsayısı (R^2) değerleri, parite, resudal ve SHAP grafikleri gibi uygun ölçütler kullanılarak değerlendirildi.

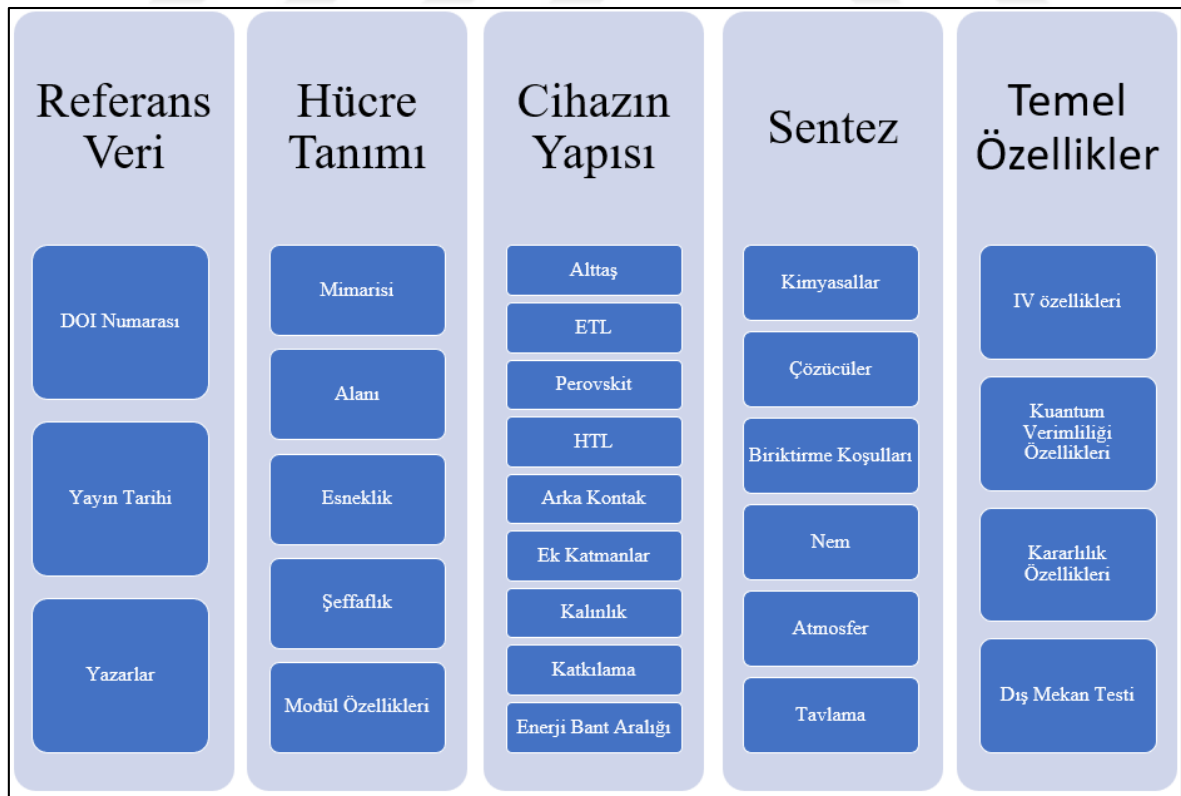
MAPbI₃ PSC'lerin elektriksel performans parametrelerinin tahminine yönelik iş akışının şeması Şekil 3.1'de gösterilmiştir. Şekil 3.1'de sunulan iş akışı, makine öğrenmesi modeli geliştirme sürecini göstermektedir. Bu aşamalarda Python progama dili kullanılmıştır.



Şekil 3.1. PSC'lerin elektriksel performans parametrelerinin tahminine yönelik iş akışının şeması [59]

3.1. Veri Seti

Perovskite Database Project tarafından oluşturulan veri seti 43,379 PCS'ler için deneysel verilerden oluşmaktadır [58].



Şekil 3.2. Kullanılan veri setinin ana kategorileri [58]

3.2. Ön İşleme

Verilerin ön işlemden geçirilmesi ve analizi, tahmin edilen çıktı parametrelerinin tahmini için kullanılan veri setinin kalitesi ve güvenilirliğini sağlamada çok önemli bir rol oynar. Ön işleme adımları, ham verilerin daha ileri analiz ve modellemeye uygun hale getirilmesi için temizlenmesi, biçimlendirilmesi ve dönüştürülmesini içerir. Sonraki analiz, özellikleri arasında ki ilişkiler ve bunların çıktı parametreleri arasında ki ilişkiyi araştırır. Ön işlem aşaması, genel olarak aşağıdaki adımları içerir:

1. Veri temizleme: Veri setinde bulunan eksik verilerin, hataların kaldırılmasını içerir. Bu sayede kullanılan modeller daha güvenilir tahminlerde bulunabilir.
2. Özellik mühendisliği: Makine öğrenimi modellerinin performansını artırmak için ham verilerden özellikler (değişkenler) seçme, değiştirme veya oluşturma sürecidir. Etkili özellik mühendisliği, model doğruluğunu önemli ölçüde artırabilir ve yeni verilere daha iyi genelleme yapmasına yardımcı olabilir. Genellikle verilerin ve sorun alanının derinlemesine anlaşılmasını gerektirir. Şunları içerir:
 - a) Özellik Seçimi: Model için en uygun özelliklerin belirlenmesi.
 - b) Özellik Dönüşümü: Sayısal verilerin normalleştirilmesi veya ölçeklendirilmesi ya da kategorik değişkenlerin kodlanması gibi özelliklerin kullanılabilirliklerini artırmak için değiştirilmesi.

3.3. Veri analizi

Ön işleme aşamasından sonra veriler analiz için kullanıma hazır hale gelir. Hazır hala gelen bu veriler kullanarak tahmin edilmek istenen parametreler arasında ki ilişkiyi anlamak için çeşitli teknikler kullanılır. Bu teknikler şu şekildedir:

1. Keşifsel Veri Analizi: Verilerin görselleştirilmesi, özelliklerin dağılımlarının, aykırı değerlerin veya normalliklerin belirlenmesini içerir. Tahmin edilmek istenen parametrelerin tahmini için değerli olabilecek örüntü, eğilimler ve korelasyonların ortaya çıkmasına yardımcı olur.
2. Korelasyon analizi: Korelasyon analizi, özellik çiftleri arasında ki ilişkiyi ölçer. Tahmin edilmek istenilen değerlere hangi özelliklerin için katkı sağlayacağını tespitine ve veri boyutunun azaltılmasına yardımcı olur.

3. Veri görselleştirme: Özellikler arasındaki ilişkilerin ve bunların tahmin edilmek istenilen parametreler üzerindeki etkilerinin görselleştirilmesi, karmaşık örüntülerin ve eğilimlerin anlaşılmasına yardımcı olabilir.

3.4. Modellerin oluşturulması

Modellerin daha iyi performans sergilemesi için veri seti hazırlandıktan sonra şu adımlar yapılarak modeller oluşturuldu:

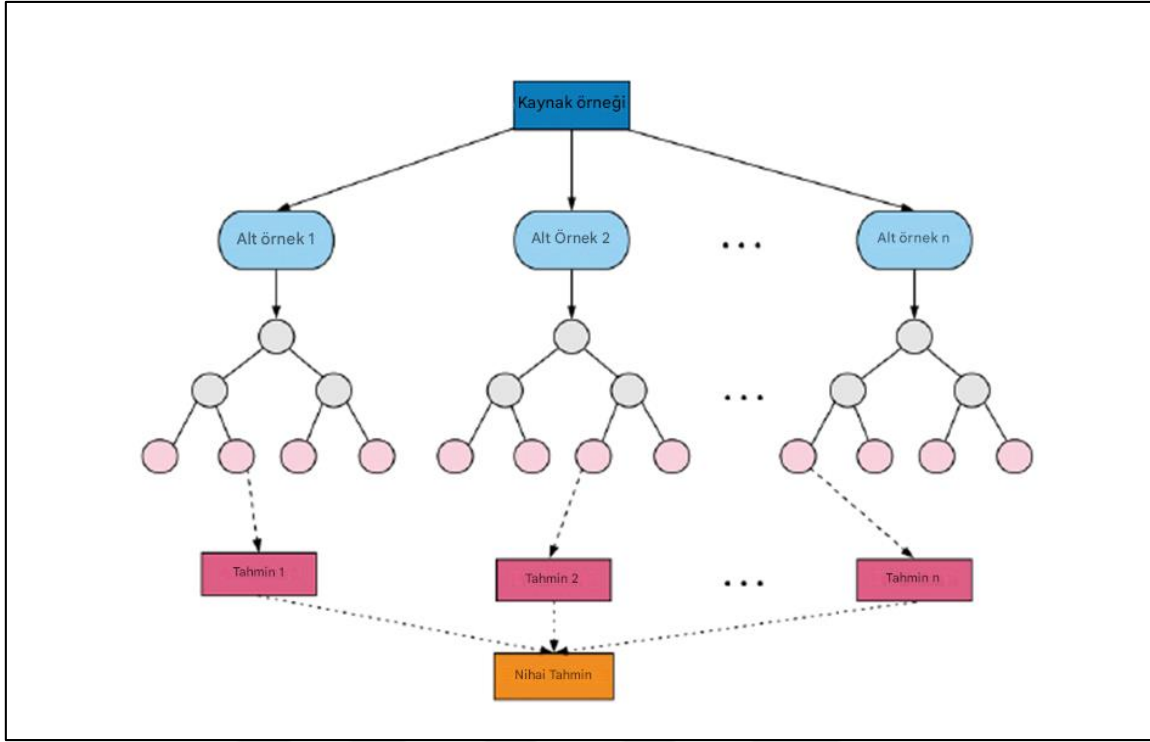
1. Verilerin bölünmesi: Verileri bölme işlemi, makine öğrenimi modellerinin performansını ve genellenebilirliğini değerlendirmede kritik bir rol oynamaktadır. Veri kümesin eğitim ve test kümelerine ayırarak eğitim verileriyle modellerin eğitilmesi ve modellerin görmediği test verileri ile de modelin tahminde bulunması sağlanmaktadır. Bunun için veri setinin %80'i eğitim seti için ve %20'si test seti için rastgele ayrılmıştır. Bu rastgele ayırma işlemi, veri setindeki herhangi bir sıralamayı veya önyargıyı ortadan kaldırmak için gerçekleştirilmiştir. Bu adım, modellerin eğitim verilerini öğrendiği için ama yeni görmediği örneklerle iyi yapamadığı aşırı uyumu engellemek için çok önemlidir. Verilerin %80'inin eğitime ayrılmasıyla, modeller veri setinin önemli bir kısmına maruz kalarak, verilerin altında yatan kalıpları, ilişkileri ve karmaşık ayrıntıları öğrenmelerini sağladı. Bu kapsamlı eğitim, model parametrelerinin optimizasyonunu ve doğru tahminlerin yapılmasını kolaylaştırmıştır. Verilerin geri kalan %20'si test setini oluşturmuş ve bağımsız bir doğrulama veri kümesi olarak hizmet vermiştir. Modelin görülmeyen örnekler üzerindeki performansını değerlendirmemize olanak tanıyarak eğitim verilerinin ötesine genelleme yetenekleri hakkında bilgi sağladı. Modellerin bu ayrı veri kümesi üzerinde değerlendirilmesi, tahmin yeteneklerinin tarafsız bir şekilde tahmin edilmesini sağlamış ve yeni ve görünmeyen verileri işleme konusundaki yeterliliklerini doğrulamıştır. Eğitim için %80 ve test için %20 olarak seçilen bölme oranı, bu alandaki en iyi uygulamalar ve önceki araştırmalar temel alınarak belirlenmiştir. Bu oran, modellerin öğrenmesi için yeterli eğitim verisi sağlamak ve titiz bir değerlendirme için önemli bir test seti sağlamak arasında bir denge kurmaktadır.
2. Hiper-parametre Optimizasyonu: Hiper-parametre optimizasyonu, optimum performansı elde etmek için bu algoritmaların hiper-parametrelerini ayarlama bilimidir [59]. Hiper-parametrelerin ayarlanması, özellikle birçok hiper-parametreye sahip ağaç tabanlı ML modelleri ve derin sinir ağları için etkili bir ML modeli oluşturmak için

önemli bir bileşendir [60]. İyi bilinen yöntemlerden bazıları Grid arama, Rastgele arama, Bayesian optimizasyonudur ve Hyperopt optimizasyonudur [59].

3. Model Seçimi: Tahmini performans, modelin görünmeyen veriler üzerinde ne kadar iyi performans gösterdiğini belirtir. Bu nedenle, gelecekteki veriler üzerinde tahminler yapmak, makine öğrenimi uygulamalarında veya yeni algoritmaların geliştirilmesinde ana sorundur. Bu genellikle birçok deney içerir ve hiper-parametrelerin ayarlanması da dahil olabilir. Farklı hiper-parametre ayarları bir eğitim veri kümesi üzerinde çalıştırılan öğrenme algoritmalarının performansını değiştirir. Bu nedenle, en iyi performans gösteren modeli seçmek için bu modeller birbiriyle karşılaştırılır ve en iyi performans gösteren modeli seçilir [61].

3.5. Rastgele Orman Regresyon Modeli

Rastgele orman, esasen her ağacın diğerlerinden biraz farklı olduğu bir karar ağaçları koleksiyonudur. Rastgele ormanların arkasındaki fikir, her bir ağacın nispeten iyi bir tahmin işi yapabileceği, ancak muhtemelen verilerin bir kısmına aşırı uyum sağlayacağıdır. Hepsini iyi çalışan ve farklı şekillerde aşırı uyum sağlayan birçok ağaç oluşturursak, bunların sonuçlarının ortalamasını alarak aşırı uyum miktarını azaltabiliriz. Rastgele bir ormandaki ağaçların rastgele hale getirilmesinin iki yolu vardır: bir ağaç oluşturmak için kullanılan veri noktalarının seçilmesi ve her bir bölünmüş testteki özelliklerin seçilmesi [51]. Şekil 3.3 'te gösterildiği gibi, rastgele orman algoritmasını gerçekleştirmek için önce veri kümesinden belirli sayıda rastgele seçilen örnek ve ardından belirli sayıda özellik karar ağacının düğümleri de rastgele seçilir, böylece bir karar ağacı oluşturulur ve yukarıdaki adımlar birden fazla karar ağacı oluşturmak için birkaç kez tekrarlanır. Yeni bir örnek eklenirse, her karar ağacında bir sınıflandırma tahmini yapacak ve sonunda oylama puanına göre sınıflandıracaktır [62].

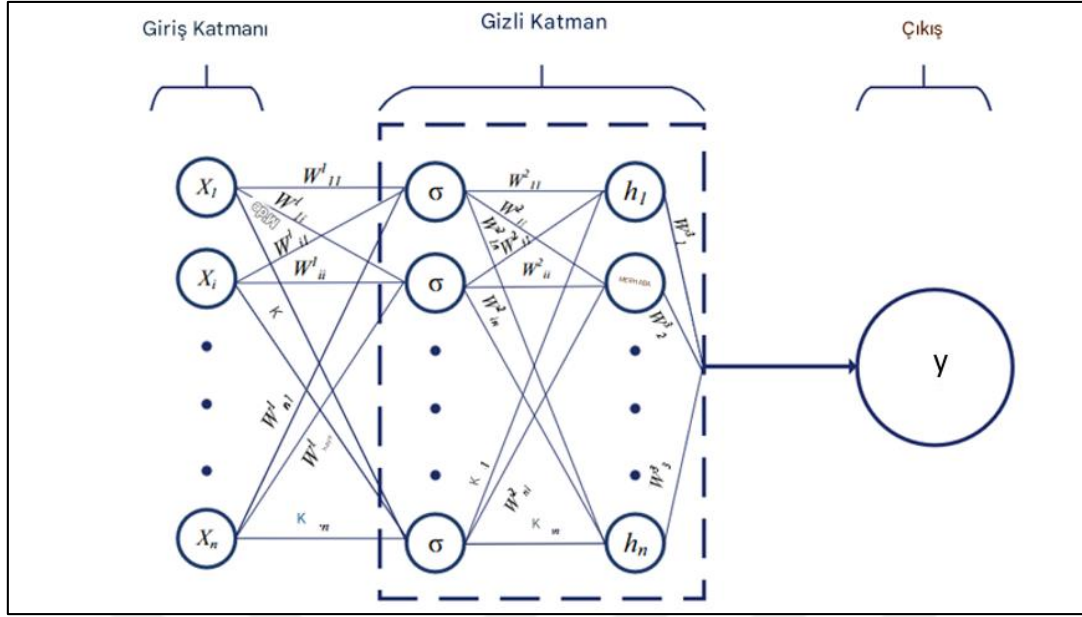


Şekil 3.3. Karar ağacı regresyonu

RF hem regresyon hem de sınıflandırma görevleri için kullanılan sağlam bir ML algoritmasıdır. Tahmin doğruluğunu artırmak ve aşırı uyumu en aza indirmek için birden fazla rastgele orman ağacından gelen tahminleri birleştirir. Regresyon sırasında, nihai çıktıyı sağlamak için tüm ağaçların tahminlerinin ortalaması alınır [63].

3.6. Çok Katmanlı Algılayıcı

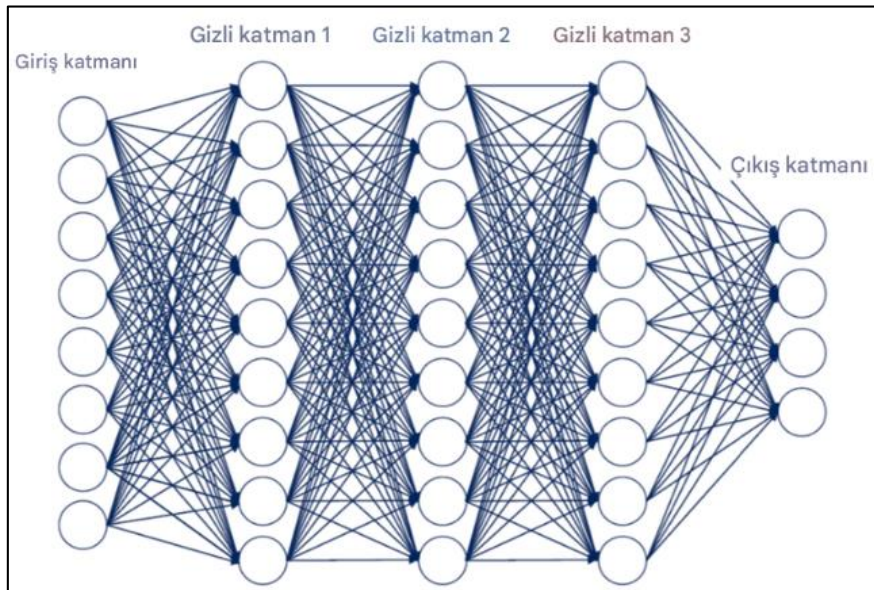
Çok katmanlı algılayıcı (MLP), en az üç düğüm katmanına sahip ileri beslemeli bir yapay sinir ağı türüdür: bir giriş katmanı, bir gizli katman ve bir çıkış katmanı ve her düğümün doğrusal olmayan bir aktivasyon fonksiyonu vardır. Bu nedenle, doğrusal olmayan şekilde ayrılabilen verilerden oluşan problemler için önemli bir avantaja sahiptir. MLP algoritması hem regresyon hem de sınıflandırma görevleri için kullanılabilir. Sınıflandırma için kullanılırsa, bu tür MLP doğrusal olmayan ayırıcıları uygulayabilir ve regresyon için kullanılırsa, girdinin doğrusal olmayan fonksiyonlarına yaklaşabilir [64].



Şekil 3.4. MLP modelinin iş akış şeması [65]

3.7. Derin Sinir Ağları

Derin sinir ağları, bir Giriş ve çıkış katmanları ile birlikte üçten fazla katman sahiptir ve veriler arasında ki doğrusal olmayan ilişkileri yakalar. Ağda bulunan her bir nöronun girdi verilerini toplar ve bundan dolayı bir sonra ki katman olan çıktıyı sağlayan ağı iletir, her bir düğüm bir önceki katmanın çıktısına bağlı olarak farklı özellikler üzerinden eğitilir. Bir önceki katmanın özelliklerini yeniden birleştirmesi ve bunlardan öğrenmesidir [66].



Şekil 3.5. DNN mimarisi

3.8. Modellerin değeriendirilmesi

Kök Ortalama Karesel Sapma (RMSE) olarak da adlandırılan Kök Ortalama Karesel hata, tüm hataların karelerinin ortalamasının kareköküdür. Başka bir deyişle, RMSE basitçe hataların standart sapmasıdır. RMSE yine bize en iyi uyum çizgisinin nokta kümesine ne kadar yakın olduğunu söyler. RMSE ne kadar düşükse model o kadar iyidir [7].

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2} \quad (3.1)$$

Bu formülde n tahmin sayısı, Y_i gözlenen değerler, $\hat{Y}_i$ tahmini değerleri temsil etmektedir[7].

Ortalama Mutlak Sapma (MAE) olarak da adlandırılan Ortalama Mutlak hata, bize gözlenen değer ile tahmin edilen değerler arasındaki mutlak farkın ortalamasını verir. MAE ve MSE arasındaki fark, MAE'nin tahmin edilen değerler ile gözlenen değerler arasındaki mutlak farkı alması, MSE'nin ise karesel farkı almasıdır [65].

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |Y_i - \hat{Y}_i| \quad (3.2)$$

Bu formülde n tahmin sayısı, Y_i gözlenen değerler, $\hat{Y}_i$ tahmini değerleri temsil etmektedir [65].

R^2 bize regresyon modeli için uyum iyiliği (gözlenen değerlerin tahmin edilen değerlerle ne ölçüde eşleştiği) sağlar. R^2 değeri 0-1 arasında değer almaktadır. 1 mükemmel tahmini temsil etmektedir [63].

$$R^2 = 1 - \frac{\sum (\hat{Y}_i - Y_i)^2}{\sum (\bar{Y}_i - Y_i)^2} \quad (3.3)$$

Burada $\hat{Y}_i$, Y_i 'nin tahmin edilen değerini temsil eder ve $\bar{Y}_i$, aşağıdaki şekilde hesaplanan gözlenen verilerin ortalamasıdır [63].

$$\bar{Y} = \sum_{i=1}^N Y_i \quad (3.3)$$

4. MODELLERİN ÇIKTILARI

V_{OC} , J_{SC} , FF ve PCE'yi tahmin etmek için ML modellerini eğitmek amacıyla kullanılan MAPbI₃ Veri setinin içeriği Çizelge 4.1'de gösterilmektedir.

Çizelge 4.1. Veri setinin içeriği

PSC'nin mimarisi ile ilgili	Özellikler
	Hücre yapıları
	Altaş
	ETL Katmanı
	HTL Katmanı
Üretim teknikleri	Arka Kontak
	ETL biriktirme Yöntemi
	Perovskit Biriktirme Yöntemi
	HTL biriktirme Yöntemi
	Arka Kontak Biriktirme Yöntemi
Diğer Özellikleri	ETL Kalınlığı
	Perovskit tabakasının Kalınlığı
	Perovskit Enerji Bant aralığı
	HTL Kalınlığı
	Arka Kontak Kalınlık
	Hücre alanı ölçülen

Algoritmalar önceden işlenmiş veri tabanıyla oluşturuldu, tahmin edilecek olan PCE, FF, V_{OC} ve J_{SC} 'dir. Veri tabanı bir eğitim seti (%80) ve bir test seti (%20) olmak üzere ikiye ayrıldı. Aşırı uyumu azaltmak için, modeli eğitirken k katlı çapraz doğrulama ($k = 5$) kullanıldı. k katlı çapraz doğrulama yalnızca eğitim setine uygulandı ve algoritmaların optimizasyon sırasında test seti ile etkileşmedi. Algoritmaların hiper-parametrelerini optimize etmek için Grid-Arama (GridSearch) fonksiyonlarını uygulandı. GridSearch, belirtilen aralıklar içindeki tüm olası hiper-parametre kombinasyonlarını kapsamlı bir şekilde test eder. Modeller, ortalama mutlak hata (MAE), kök ortalama kare hatası (RMSE) ve belirleme katsayısı (R^2) değerleri ve parite ve kalıntı grafikleri ile değerlendirilmiştir. Ayrıca özellik önemi için yani modeller çıktı parametrelerin tahminini yaparken hangi özelliklerin önemli olduğunu belirlemek için SHAP analizi yapılmıştır. R^2 tahmin edilen ve gerçek değerler arasındaki korelasyonu ve uyumun ölçütü, MAE tüm tahminler için ortalama hataları, RMSE ise mantıklı hata tahmini için kullanılmaktadır. Her model için 5 hedefin her biri için metrikleri ayrı ayrı değerlendirildi. Her bir hedef için test ve eğitim kümelerin R^2 , MAE, RMSE değerleri hesaplandı. Kullanılan modelin aşırı veya yetersiz uyumunu

incelemek için eğitim ve test kümelerindeki metrikler ve grafikler karşılaştırıldı. MAE ve RMSE için daha düşük değerler daha iyi performansı gösterirken, R^2 için daha yüksek değerler daha iyi uyumu yansıtır.

Kullanılan RF, MLP ve DNN modellerinin çıktı parametreleri için parite grafikleri çizilmiştir. Bu grafiklerde gerçek ve tahmin edilen değerlerin parite grafiklerini temsil etmektedir. İdeal olarak, tahminlerin mükemmel uyum çizgisine ($y=x$) yakın olması beklenir.

Kalıntı grafikler hedef değişkenin gözlenen değeri ile tahmin edilen değer arasındaki fark olup, modelin gerçekten yeterli olduğundan emin olmak için kullanılır. Bir kalıntı grafiğinde herhangi bir desen bulunmamalı ve sıfır çizgisi etrafında rastgele dağılmış noktalardan oluşmalıdır. Modellerde önyargı davranışını kalıntılarda oluşan eğimlerle, sıfır çizgisinin etrafındaki rastgele dağılımlarda önyargısız bir modeli göstermektedir.

Modellerin ürettiği özelliklerin göreceli önemine odaklanmak, modelde hangi değişkenlerin en fazla etkiye sahip olduğunun bir ölçümünü belirlemek için SHAP (Shapley Additive exPlanations) analizi yapılır. SHAP analizinde çok sayıda tahmin oluşturur ve sonuçları karşılaştırmalı bir inceleme yoluyla değerlendirir. SHAP, özelliklerin önemini ve etkisini bir özet grafiğinde birleştirir ve ilişkili olmayan özelliklerin (azalan sırada) verimlilik üzerindeki göreceli önemini gösterir [67]. Modeller için de en önemli 10 özelliklerin modele yaptığı genel katkıyı gösterilmektedir [15].

Birden fazla algoritmayı test etmek ve veri setine uygun olup olmadıklarını değerlendirmek için makine öğrenimi modeli geliştirilir. Bundan dolayı, RF, MLP ve DNN algoritmaları seçilerek uygunlukları karşılaştırıldı.

4.1. RF Modelinin Çıktıları

Çizelge 4.2’de RF modelinin hem eğitim hem de test veri kümelerindeki performans ölçümlerini sıralanmaktadır. Eğitim setinin sonuçlarına bakıldığında V_{oc} , FF ve PCE çıktıları için yüksek R^2 değerleri yanında ayrıca düşük RMSE ve MAE değerlerine sahiptir. Test seti için bant aralığı, J_{SC} , PCE için yüksek R^2 değeri ve daha yüksek RMSE ve MAE değerlerine sahip olduğu görülmektedir.

Çizelge 4.2. RF modelinin sonuçları

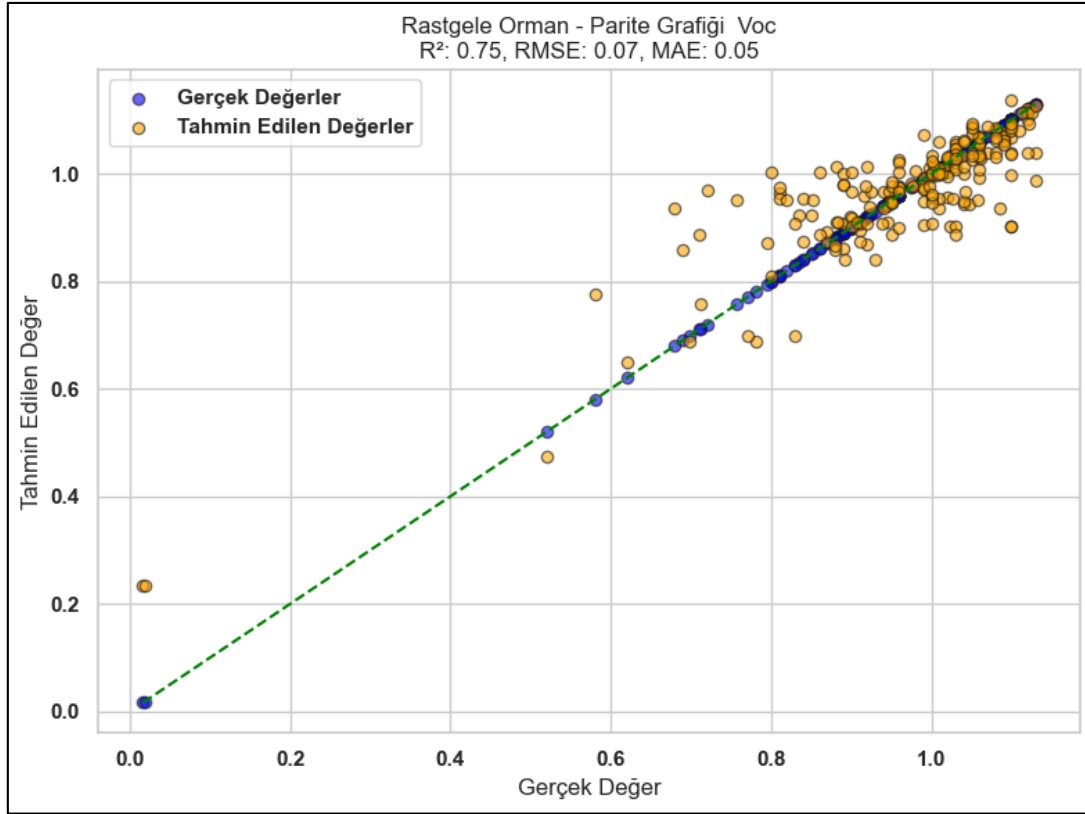
	Target	R ²	RMSE	MAE
Test	Voc	0,75	0,07	0,04
Eğitim	Voc	0,76	0,07	0,03
Test	Jsc	0,61	2,58	1,54
Eğitim	Jsc	0,73	2,06	1,16
Test	FF	0,54	0,06	0,05
Eğitim	FF	0,76	0,05	0,03
Test	PCE	0,68	2,39	1,76
Eğitim	PCE	0,80	1,90	1,28

Parite grafiği güçlü tahmin kabiliyetini ortaya koyarken, kalıntı grafik düşük hata değişkenliğiyle tarafsız tahminleri doğrulamak için kullanılmaktadır. Parite grafiklerinde mavi noktalar gerçek değerleri, sarı noktalar ise tahmin edilen değerleri göstermektedir. Yeşil çizgi ise mükemmel tahminleri temsil etmektedir. Yeşil çizgiye yakın noktalar doğru tahminleri gösterir ve eğitim setleri bu çizgiye yakın yerde olur bunun sebebi modelin eğitim setinde ki verilere iyi uyum sağladığı anlamına gelmektedir. Test setlerinde ki sapmalar modelin görmemiş olduğu test setindeki verilerin tahmininde modelin performansındaki azalmadan dolayı olmaktadır. Parite grafiğindeki köşegenden (mükemmel tahmin çizgisi) sapmaların geniş yayılımı, modelin genelleme yapmakta zorlandığı alanları, tahmin edilen değerler gerçek değerler etrafında sıkı bir şekilde kümelenmesi ise yetersiz model kapasitesi olduğunu gösterebilir.

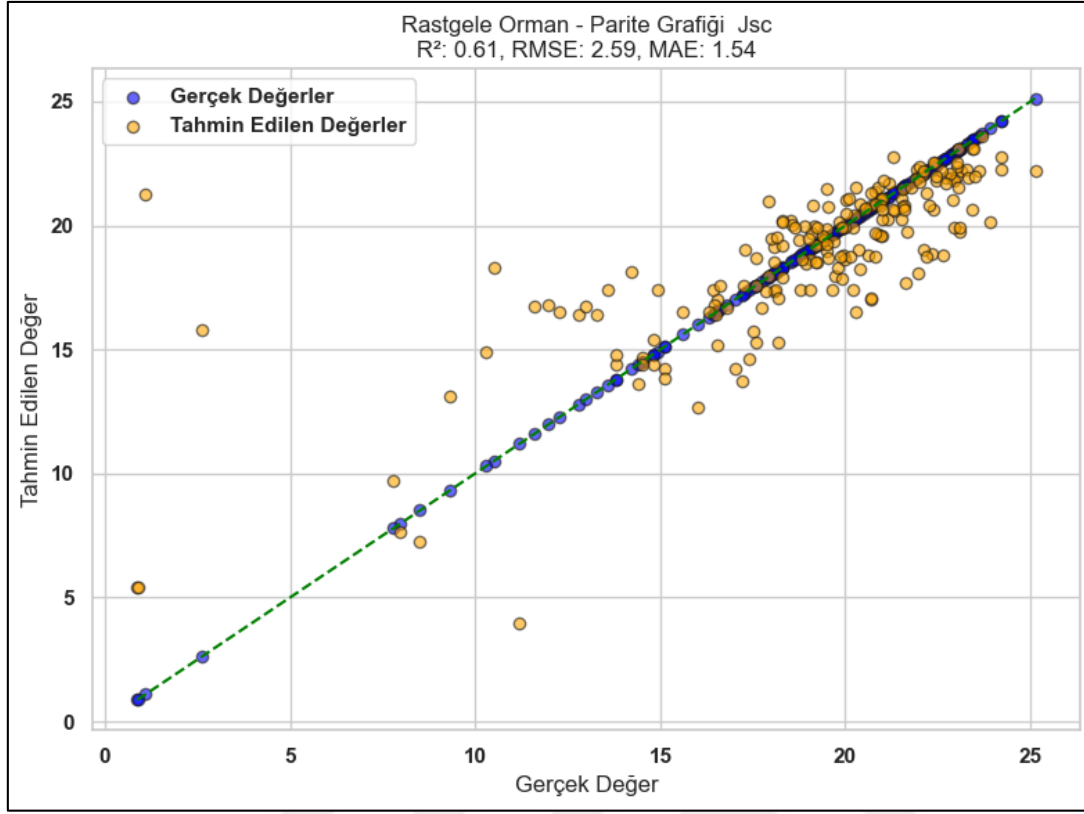
Kalıntı grafiğinde veri noktaları sıfır çizgisi etrafında bulunması ve bu modelin tarafsız olduğunu aşırı tahmin veya yetersiz tahmin yapmadığını doğrular. Kalıntı grafiklerinde fark edilebilir bir desen olmadan tahmin edilen değerler arasında veri noktalarının rastgele dağılması hataların tahmin edilen değer aralığından bağımsız olduğunu gösterir. Kalıntı grafiklerinde hem pozitif hem de negatif yönlerde fark edilir sapmalar olabilir. Pozitif sapmalar, doğrusal eğilimlerin varlığını, modelde bir önyargının varlığını ve aşırı tahmin olduğunu göstermektedir. Negatif sapmalar ise düşük tahmin olduğunun işaretidir.

VOC, JSC, FF ve PCE çıktıları için için R² değeri sırasıyla 0,75, 0,61, 0,54 ve 0,68'dir yani test setinde bulunan modelin görmediği verilerin %55, %57, %58 ve %68'ini doğru tahmin ettiği anlamına gelmektedir.

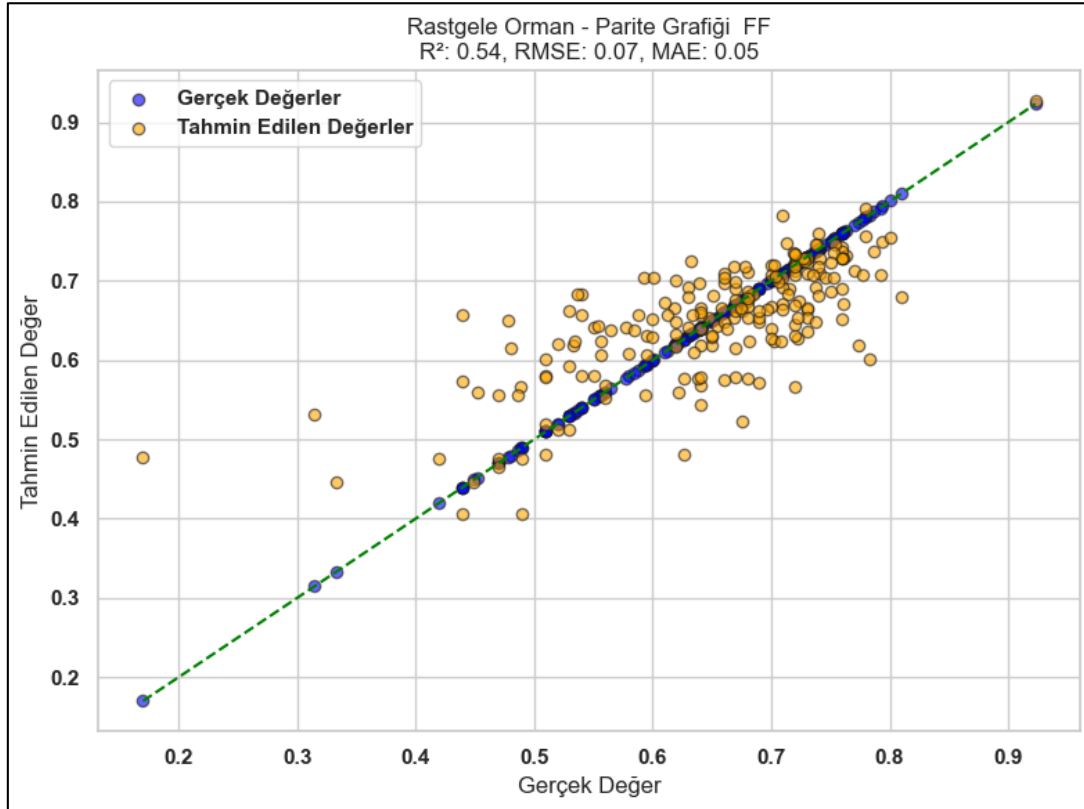
V_{oc} , J_{sc} , FF ve PCE için çizilen parite grafikleri aşağıda verilmektedir. Yeşil çizgiye yakın noktalar doğru tahminleri gösterir ve eğitim setleri bu çizgiye yakın yerde olur bunun sebebi modelin eğitim setindeki verilere iyi uyum sağladığı anlamına gelmektedir. Bu doğrultuda sadece PCE için çizilen parite grafiğinde yeşil çizgi etrafında test verileri daha fazla bir yayılım göstermektedir. Test setlerinde ki sapmalar modelin görmemiş olduğu test setindeki verilerin tahmininde modelin performansındaki azalmadan dolayı olmaktadır. Yani sapmaların geniş yayılımı, modelin genelleme yapmakta zorlandığı alanları, tahmin edilen değerler gerçek değerler etrafında sıkı bir şekilde kümelenmesi ise yetersiz model kapasitesi olduğunu gösterebilir.



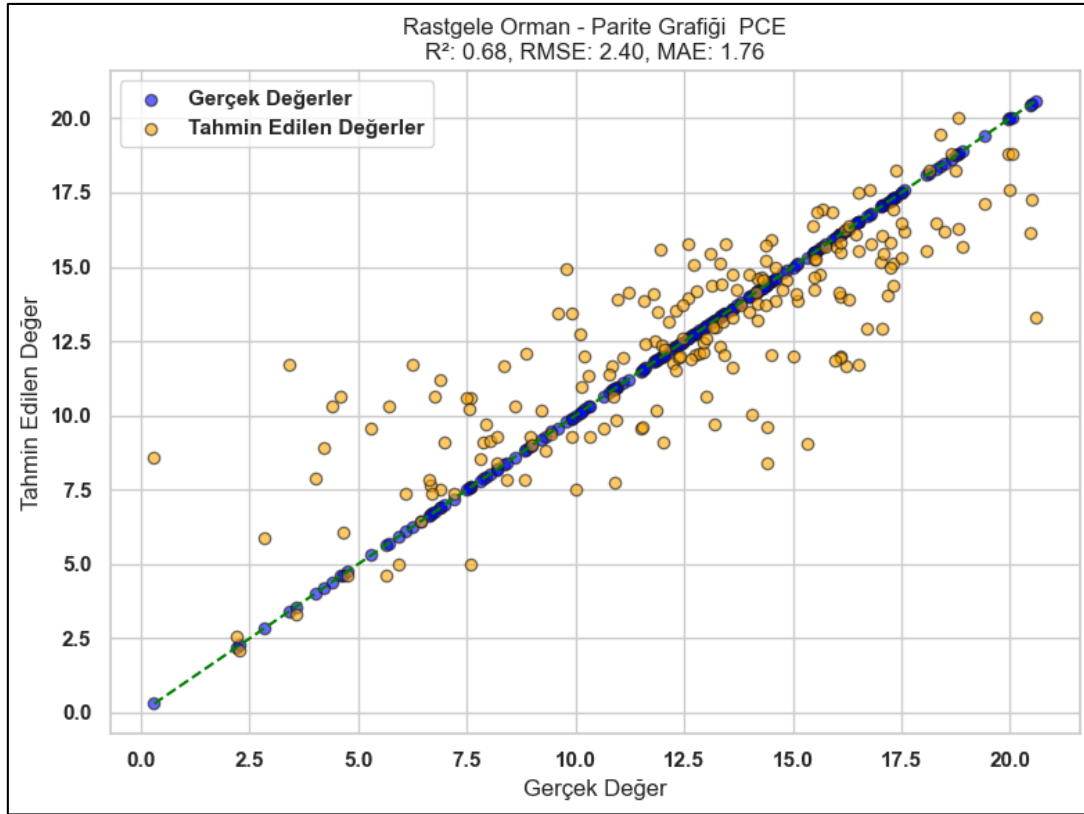
Şekil 4.1. RF modelinin VOC için tahmin edilen ve gerçek değerler grafiği



Şekil 4.2. RF modelinin Jsc için tahmin edilen ve gerçek değerler grafiği

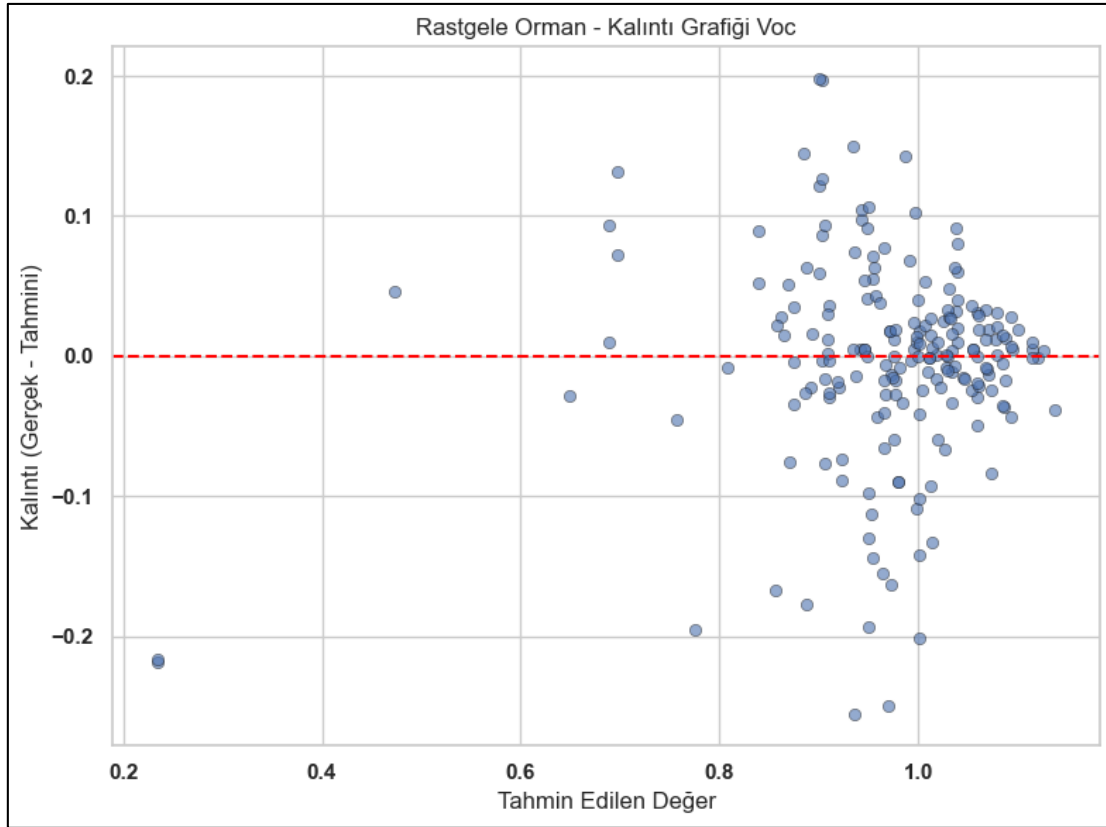


Şekil 4.3. RF modelinin FF için tahmin edilen ve gerçek değerler grafiği

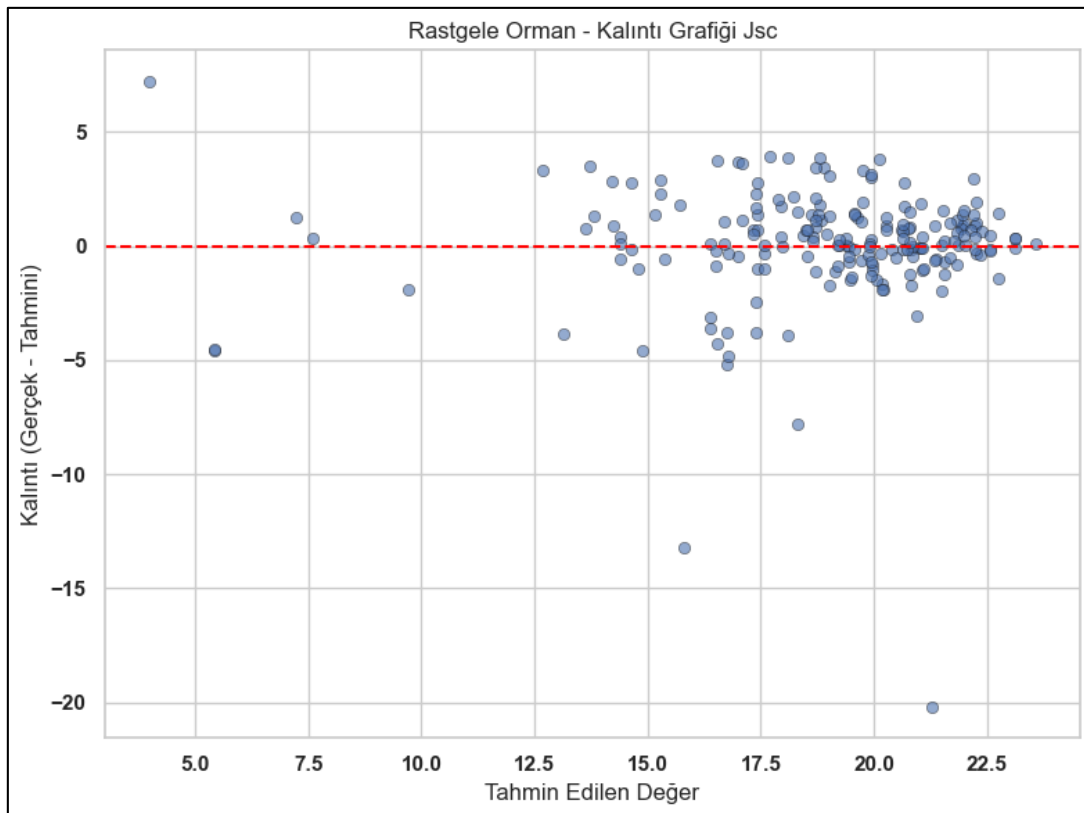


Şekil 4.4. RF modelinin PCE için tahmin edilen ve gerçek değerler grafiği

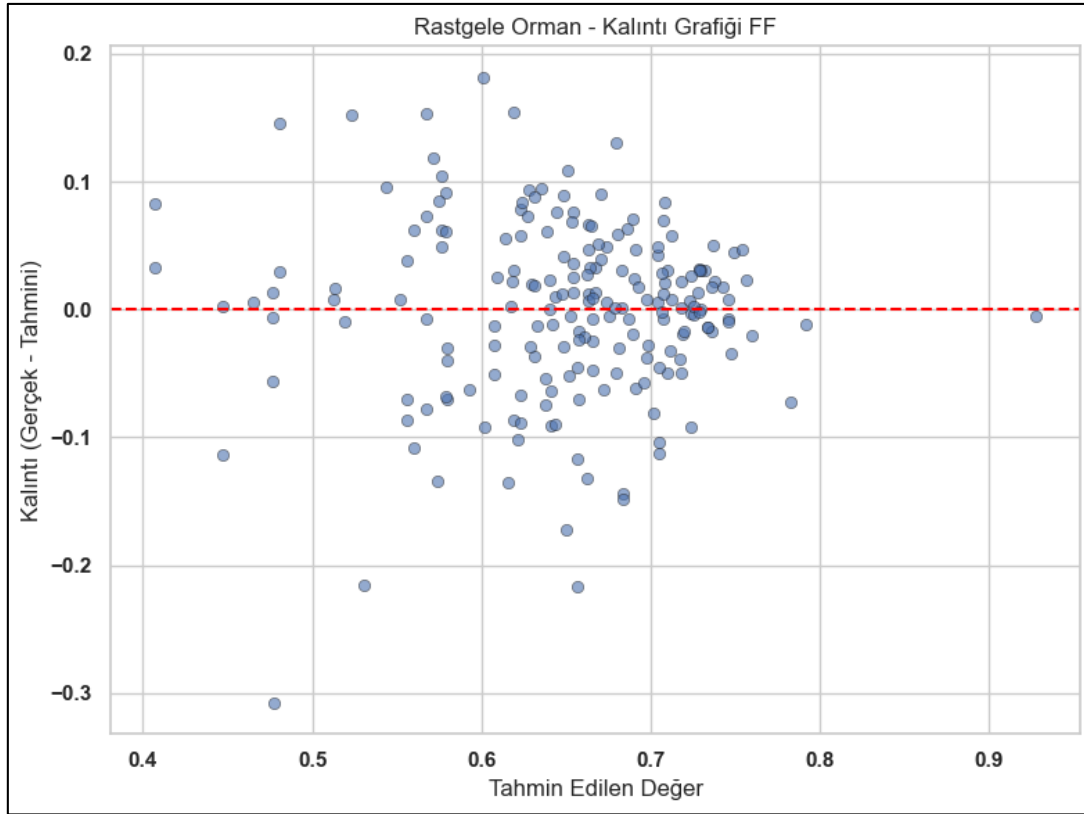
Bu modellerin çıktıları için kalıntı grafikleri aşağıda verilmiştir. Kalıntılar sıfırdaki kırmızı kesikli çizginin etrafına dağılmıştır, bu da modelin ortalamada tarafsız olduğunu gösterir. Ancak hem pozitif hem de negatif yönlerde fark edilir sapmalar vardır. Kalıntı dağınık olsa da artan veya azalan desen bulunmamaktadır, bu da modelin belirli bir tahmin edilen değer aralığı için başarısız olmadığını gösterir. Ayrıca modelin bazı değerler için gerçek değerden daha düşük tahminler veya daha yüksek tahminler yaptığı görülmektedir.



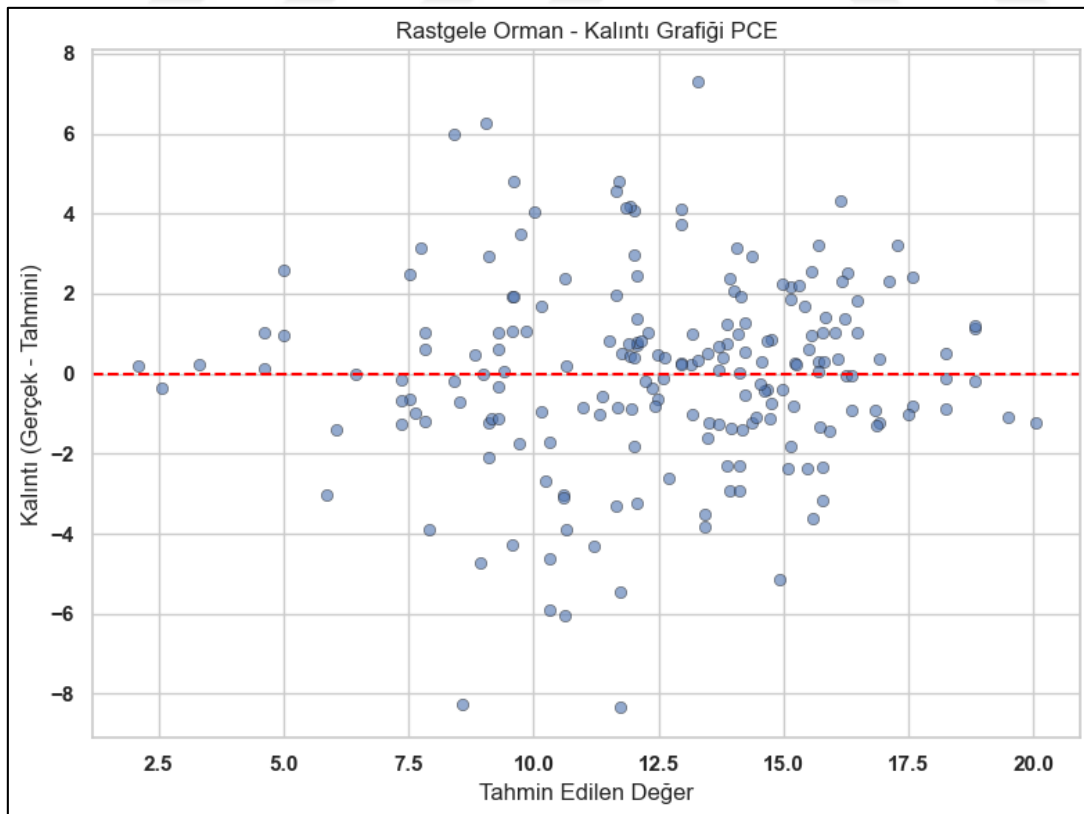
Şekil 4.5. RF modeli için V_{oc} kalıntı grafiği



Şekil 4.6. RF modeli için J_{sc} kalıntı grafiği



Şekil 4.7. RF modeli için FF kalıntı grafiği



Şekil 4.8. RF modeli için PCE kalıntı grafiği

4.2. MLP Modelinin Çıktıları

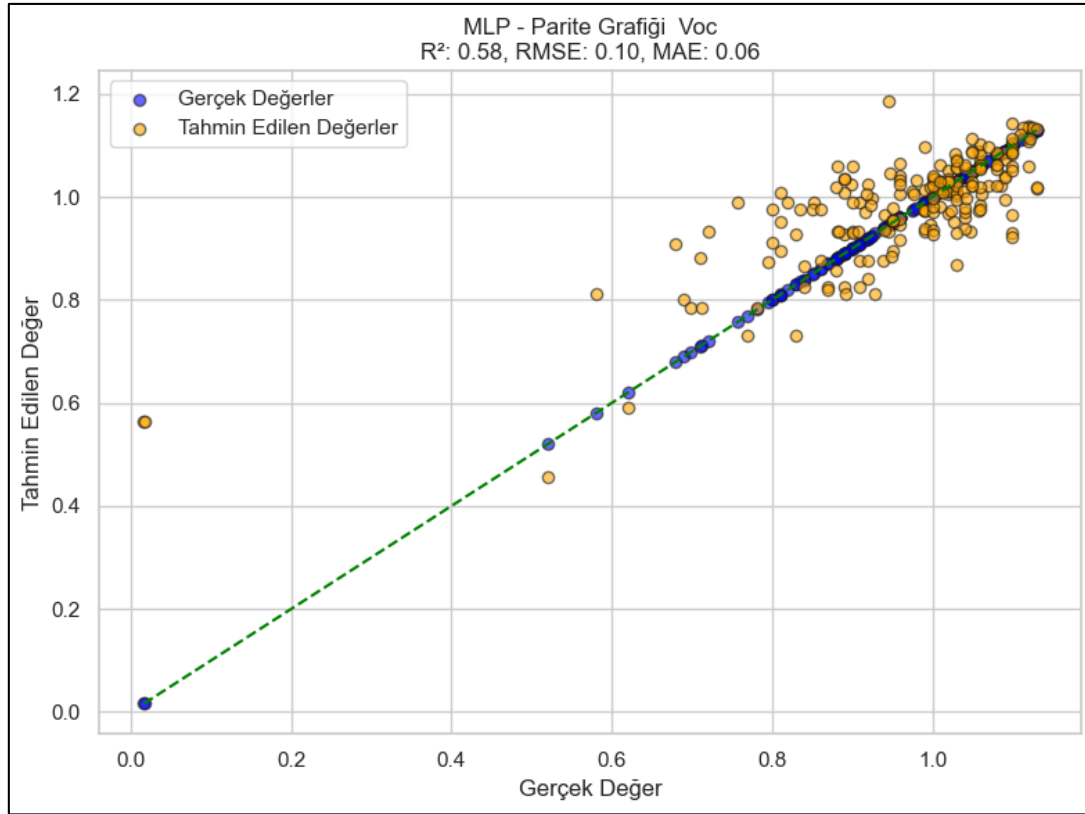
Çizelge 4.3’de MLP modelinin hem eğitim hem de test veri kümelerindeki performans ölçümleri sıralanmaktadır. Eğitim setinin sonuçlarına bakıldığı zaman bant aralığı, V_{oc} , FF çıktıları için yüksek R^2 değerleri yanında ayrıca düşük RMSE ve MAE değerleri göstermektedir.

Çizelge 4.3. MLP modelinin çıktıları

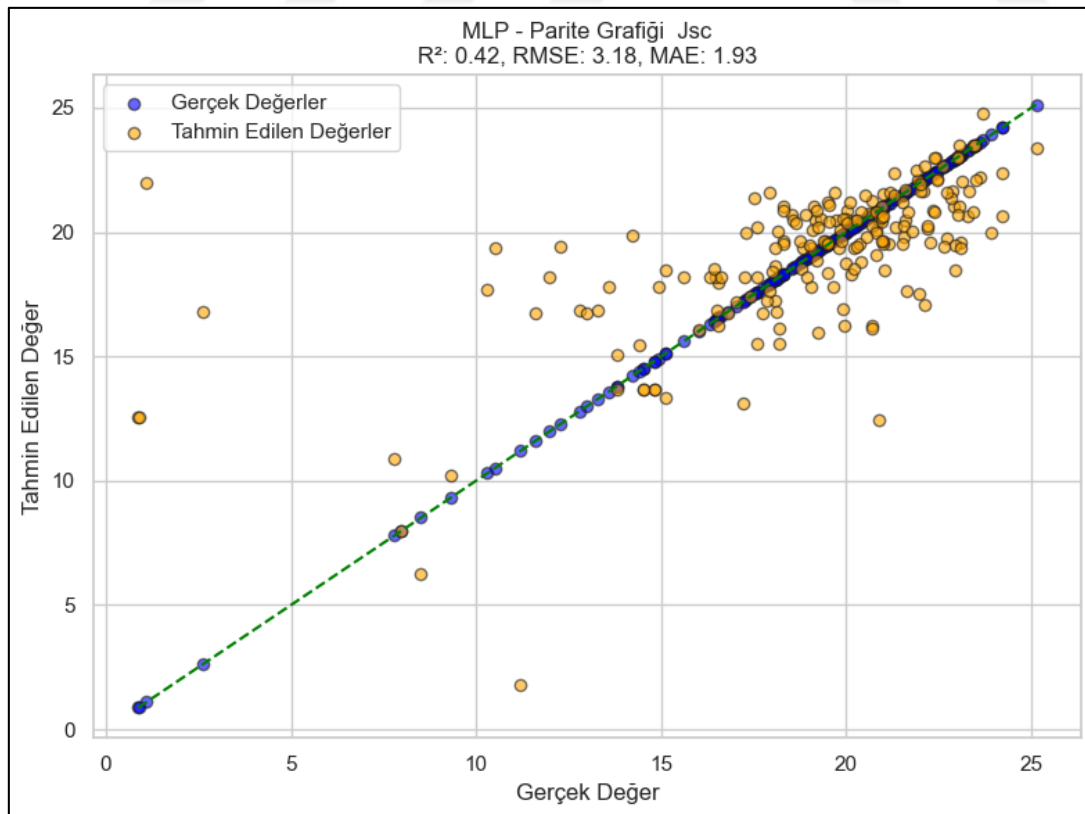
	Target	R^2	RMSE	MAE
Test	Voc	0,58	0,10	0,06
Eğitim	Voc	0,66	0,08	0,04
Test	Jsc	0,42	3,18	1,93
Eğitim	Jsc	0,63	2,43	1,45
Test	FF	0,46	0,07	0,06
Eğitim	FF	0,68	0,06	0,04
Test	PCE	0,58	2,75	2,09
Eğitim	PCE	0,70	2,323	1,61

V_{oc} , J_{sc} , FF ve PCE çıktıları için için R^2 değeri sırasıyla 0,58, 0,42, 0,46 ve 0,58’dir yani test setinde bulunan modelin görmediği verilerin %58, %42, %46 ve %58’ini doğru tahmin ettiği anlamına gelmektedir ayrıca RF modelinde olduğu gibi V_{oc} ve FF çıktıları için RMSE ve MAE değerleri düşüktür. MLP’nin RF’ye kıyasla daha düşük değerlere sahiptir. Modelin tahminlerinde özellikle belirli gerçek değer aralıkları için sapmalar vardır. Bu modelin tahminlerinin veri kümesi boyunca daha az tutarlı olduğunu gösterir. Gerçek değerlerin belirli aralıkları için aşırı veya yetersiz tahminler ve verilerdeki karmaşık ilişkiler modelin zorluk yaşamasından kaynaklı olabilir.

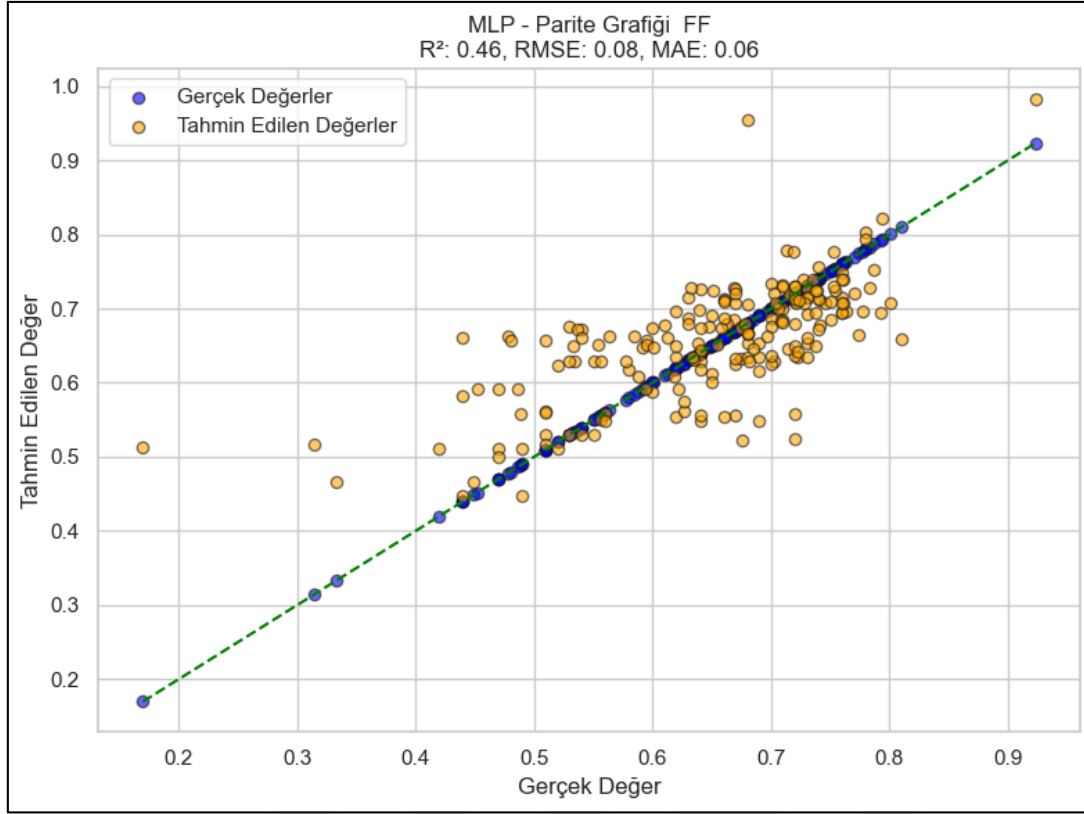
V_{oc} , J_{sc} , FF ve PCE için çizilen parite grafiği aşağıda verilmektedir. Bu grafiklerde de eğitim setlerinin yeşil çizgiye yakın yerde kümelendiği gözlemlenmektedir. Dolayısıyla, modelin eğitim setindeki bazı verilere iyi uyum sağlamaktadır. Yeşil çizgi etrafında daha fazla yayılım olması modelin J_{sc} ve PCE için tahmin yapmakta zorlandığını göstermektedir.



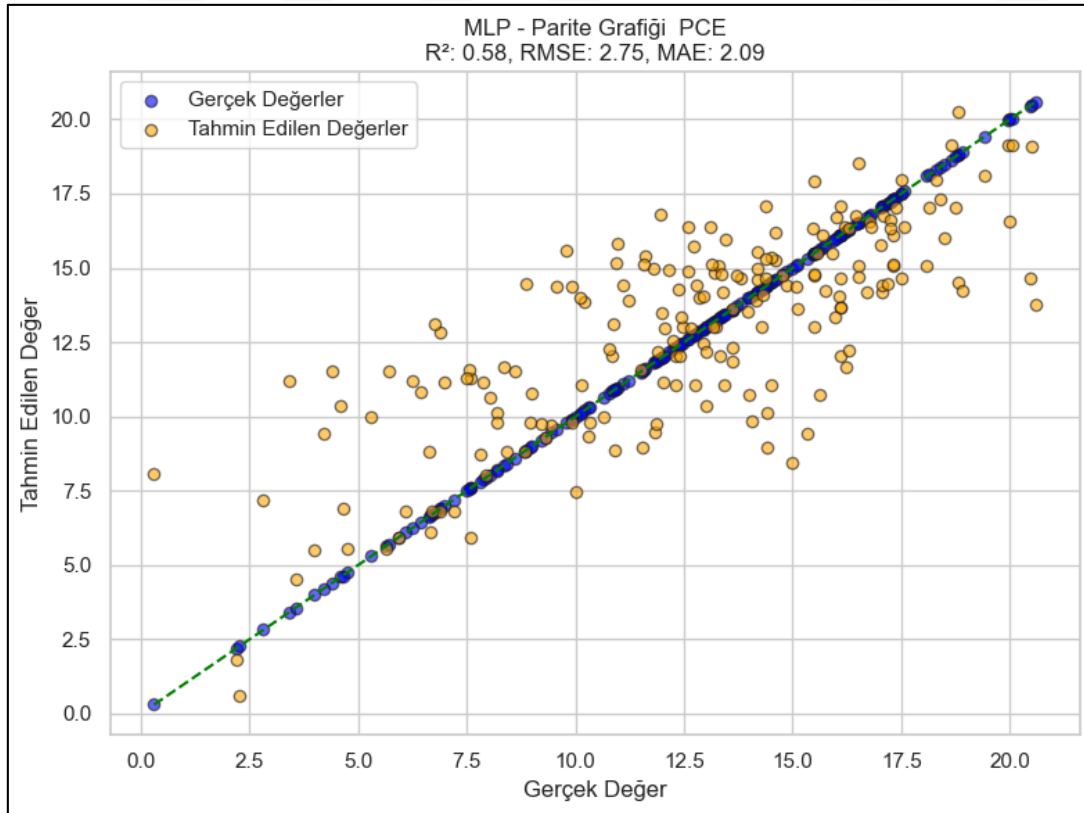
Şekil 4.9. MLP modelinin V_{oc} için tahmin edilen ve gerçek değerler grafiği



Şekil 4.10. MLP modelinin J_{sc} için tahmin edilen ve gerçek değerler grafiği

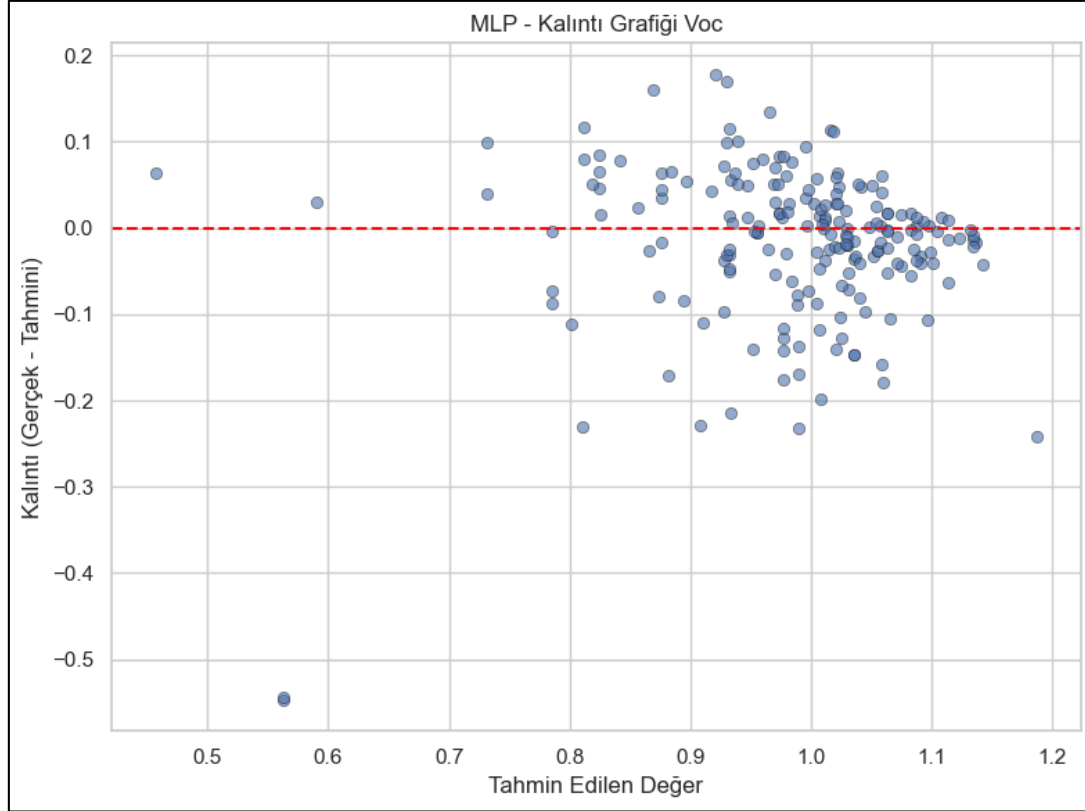


Şekil 4.11. MLP modelinin FF için tahmin edilen ve gerçek değerler grafiği

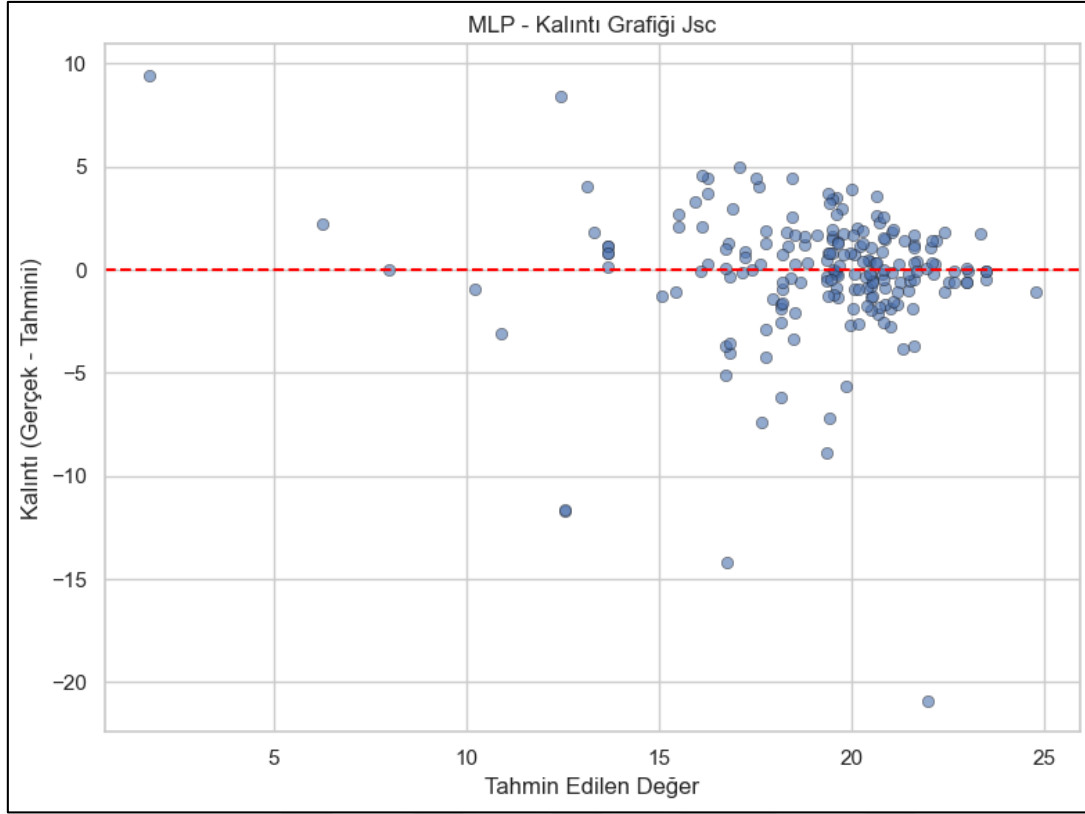


Şekil 4.12. MLP modelinin PCE için tahmin edilen ve gerçek değerler grafiği

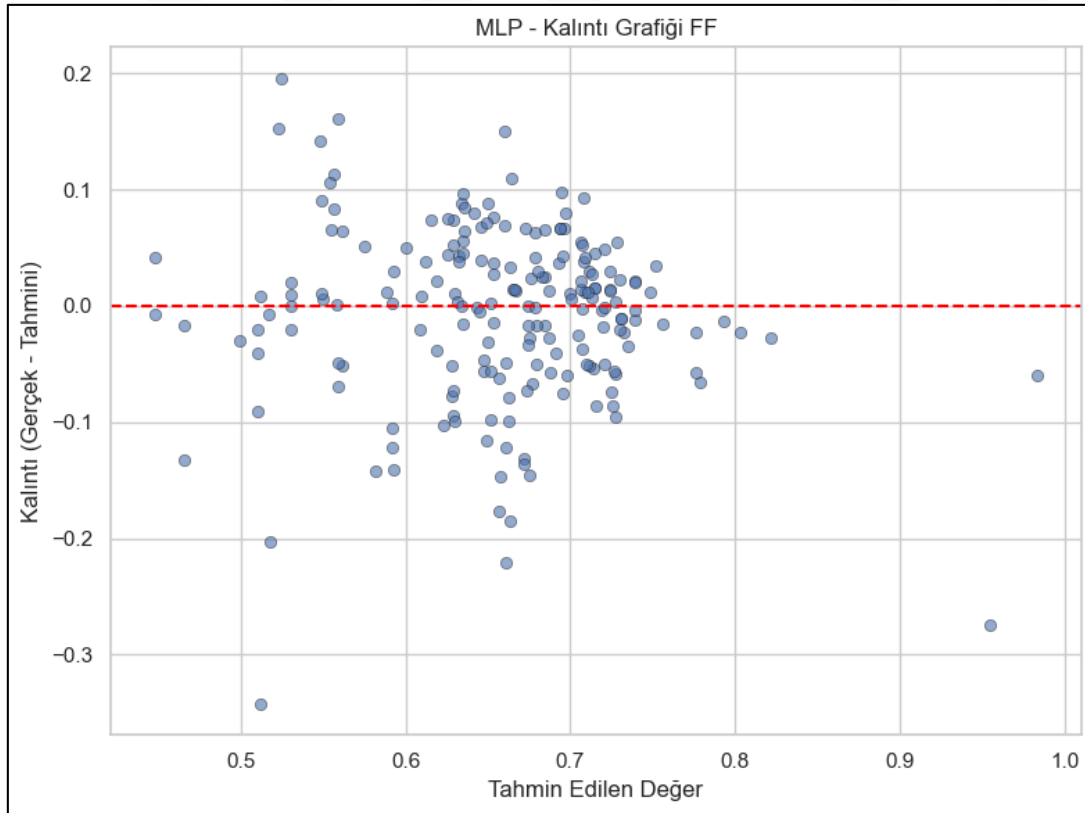
Kalıntı grafiklerinde, kalıntıların sıfırdaki kırmızı kesikli çizginin etrafına dağılması modelin tahminlerinin tarafsız olduğunu gösterir. Pozitif ve negatif yönlerde fark edilir sapmaların olması modelin bazı değerler için gerçek değerden daha düşük veya daha yüksek tahminler yaptığını göstermektedir.



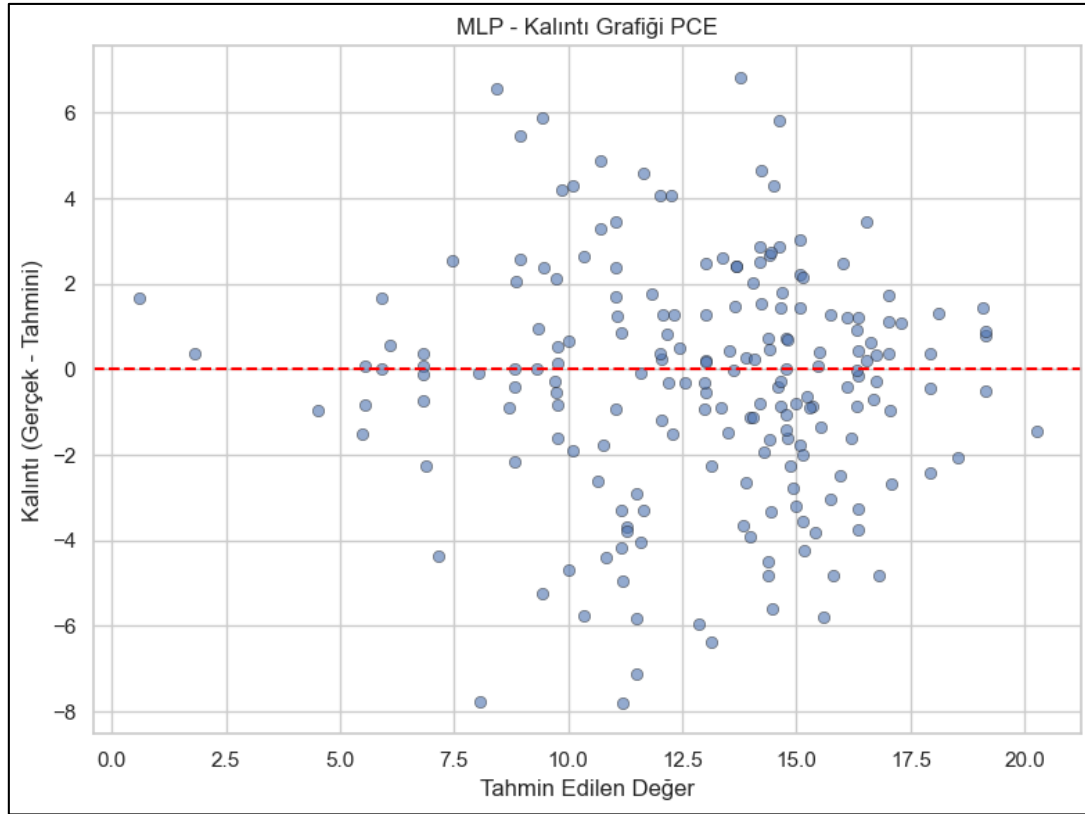
Şekil 4.13. MLP modeli için V_{oc} kalıntı grafiği



Şekil 4.14. MLP modeli için Jsc kalıntı grafiği



Şekil 4.15. MLP modeli için FF kalıntı grafiği



Şekil 4.16. MLP modeli için PCE kalıntı grafiği

4.3. DNN Modelinin Çıktıları

Çizelge 4.4’de DNN modelinin hem eğitim hem de test veri kümelerindeki performans ölçümleri yer almaktadır.

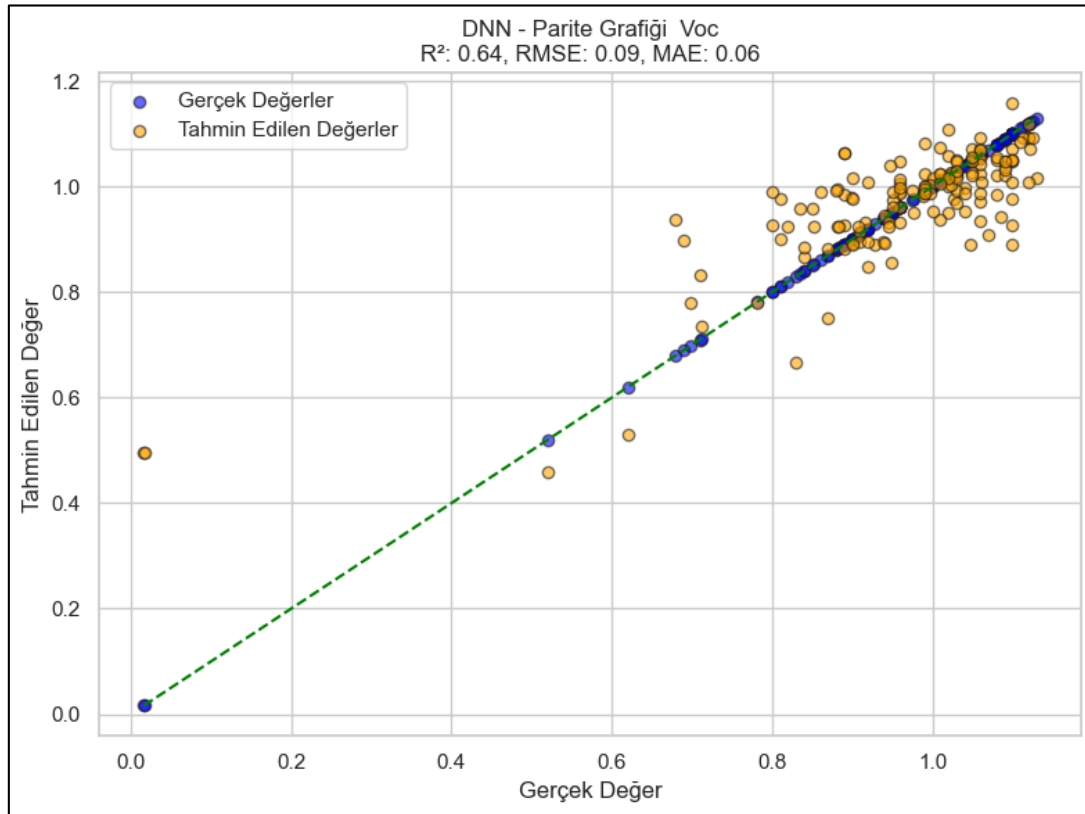
Çizelge 4.4. DNN modelinin çıktıları

	Target	R^2	RMSE	MAE
Test	Voc	0,64	0,09	0,06
Eğitim	Voc	0,68	0,08	0,04
Test	Jsc	0,45	3,29	2,03
Eğitim	Jsc	0,64	2,35	1,41
Test	FF	0,36	0,08	0,06
Eğitim	FF	0,66	0,06	0,04
Test	PCE	0,57	2,88	2,17
Eğitim	PCE	0,70	2,29	1,58

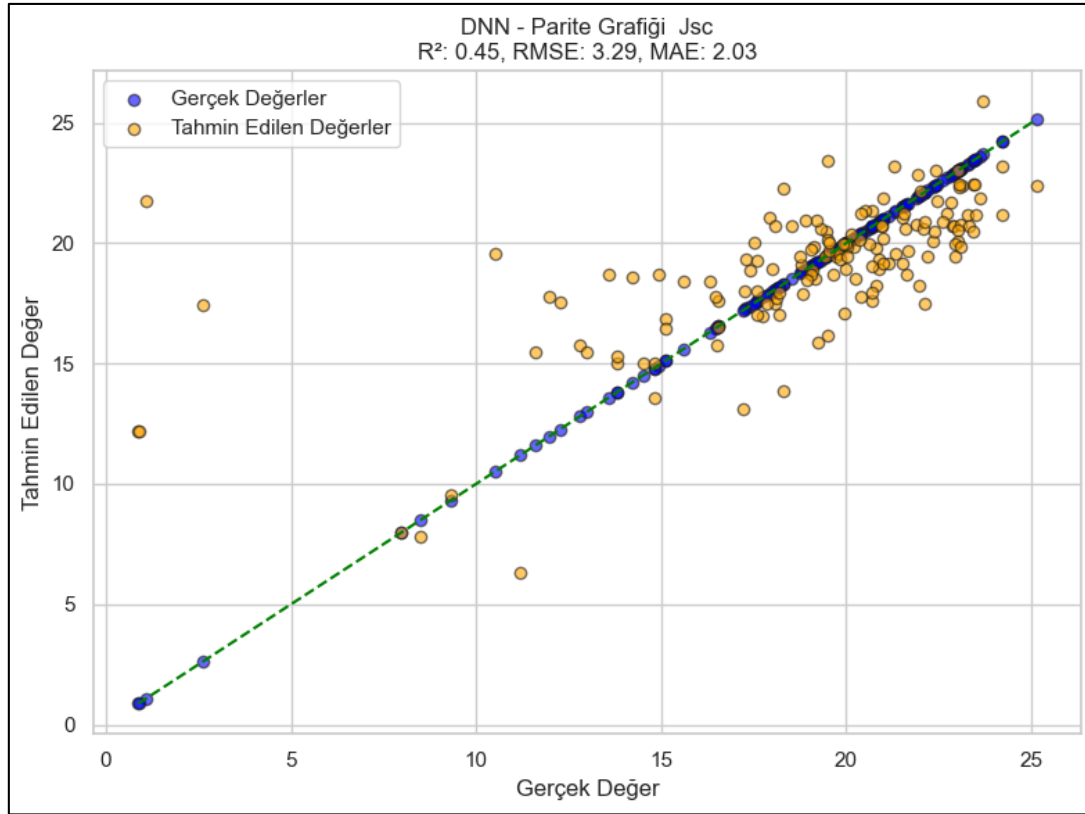
V_{oc} , J_{sc} , FF ve PCE çıktıları için R^2 değerleri sırasıyla 0,64, 0,45, 0,36 ve 0,57’dir. Bu test setinde bulunan modelin görmediği verilerin %64, %45, %36 ve %57’sini doğru tahmin

ettiği anlamına gelmektedir. Ayrıca, RF ve MLP modellerinde de görüldüğü gibi V_{oc} ve FF çıktıları için RMSE ve MAE değerleri düşüktür. DNN modelinin bütün hedef tahminleri, hesaplanan değerlerle karşılaştırıldığında, RF ve MLP'ye göre daha düşük değerlere sahip olduğu görülmektedir.

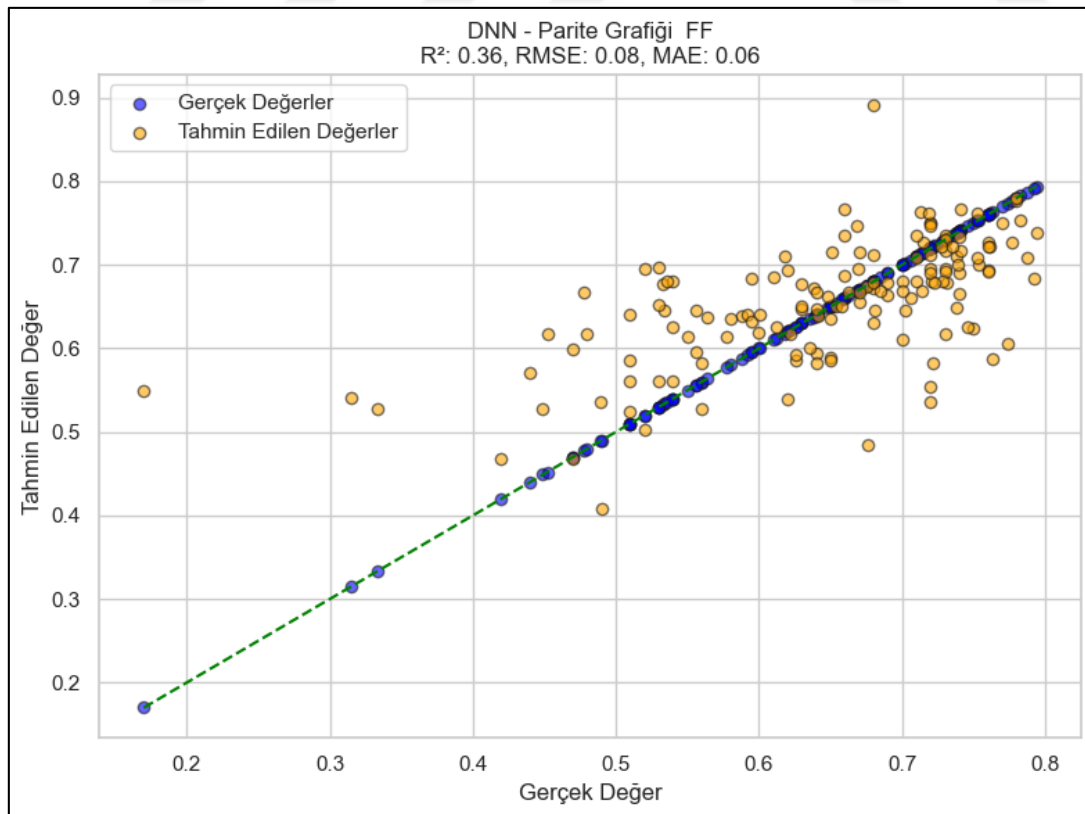
V_{oc} , J_{sc} , FF ve PCE için çizilen parite grafiği aşağıda verilmektedir. Diğer modeller için oluşturulan parite grafikleriyle benzer davranış gözlemlenmiştir.



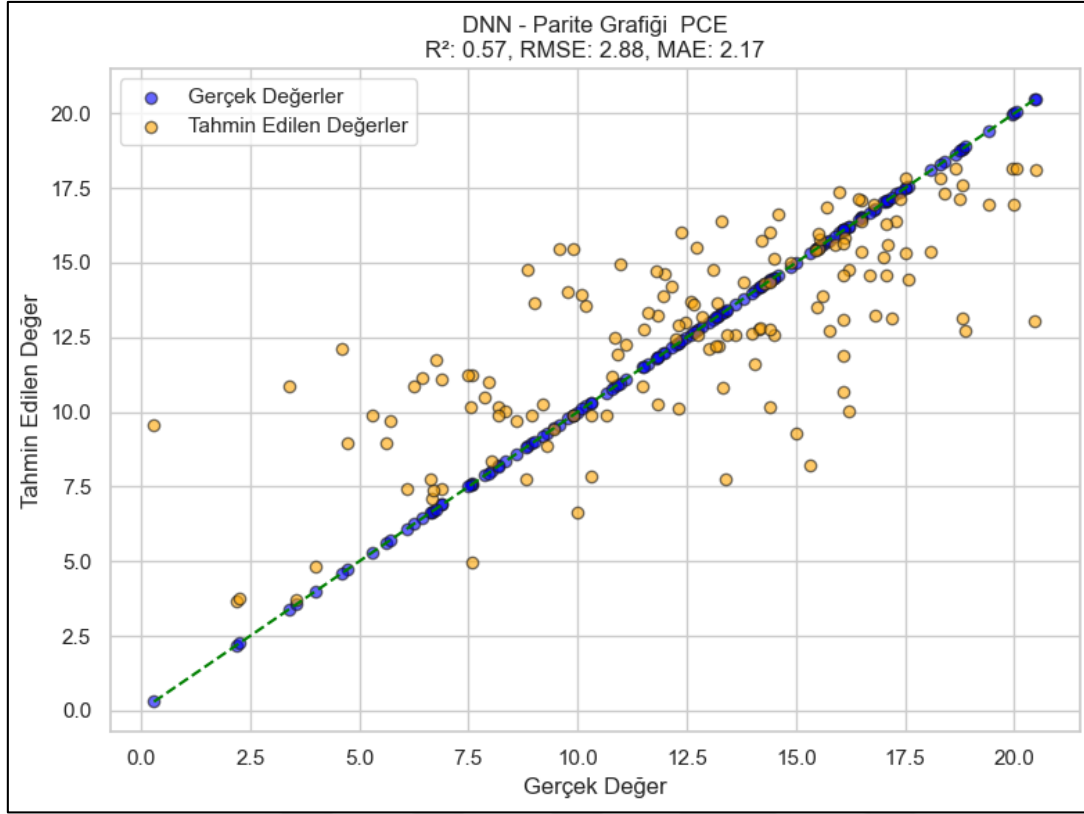
Şekil 4.17. DNN modelinin V_{oc} için tahmin edilen ve gerçek değerler grafiği



Şekil 4.18. DNN modelinin Jsc için tahmin edilen ve gerçek değerler grafiği

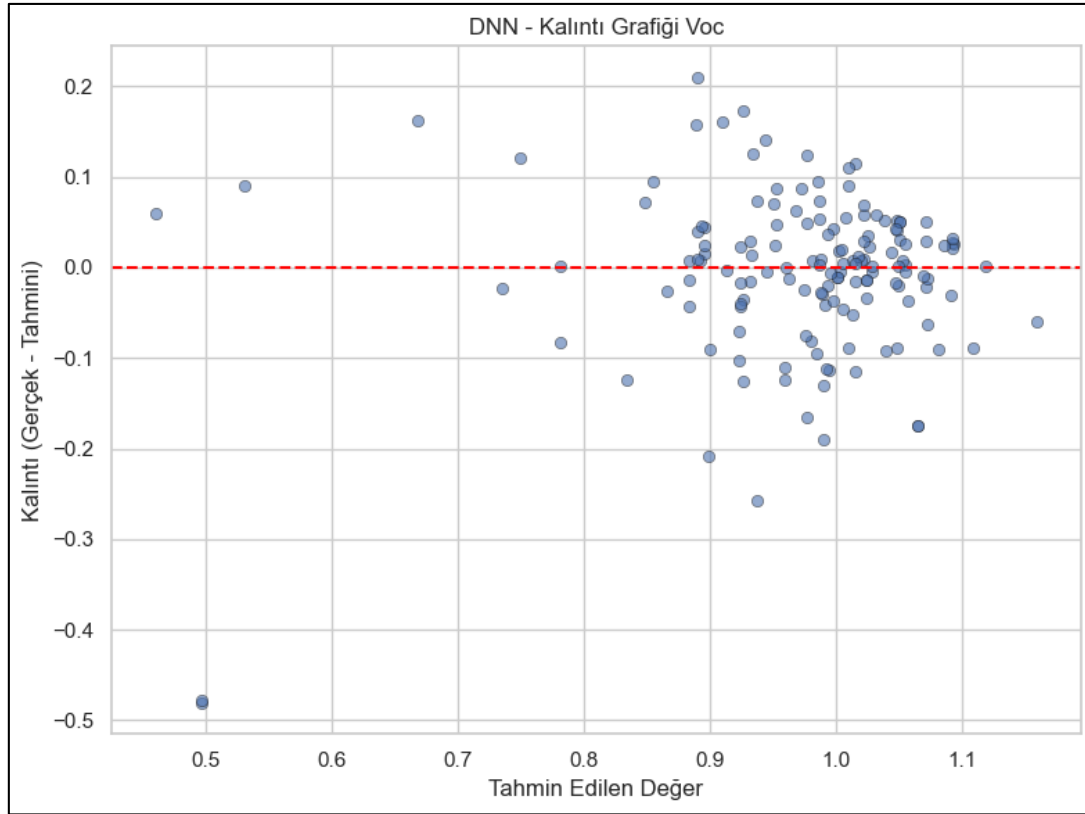


Şekil 4.19. DNN modelinin FF için tahmin edilen ve gerçek değerler grafiği

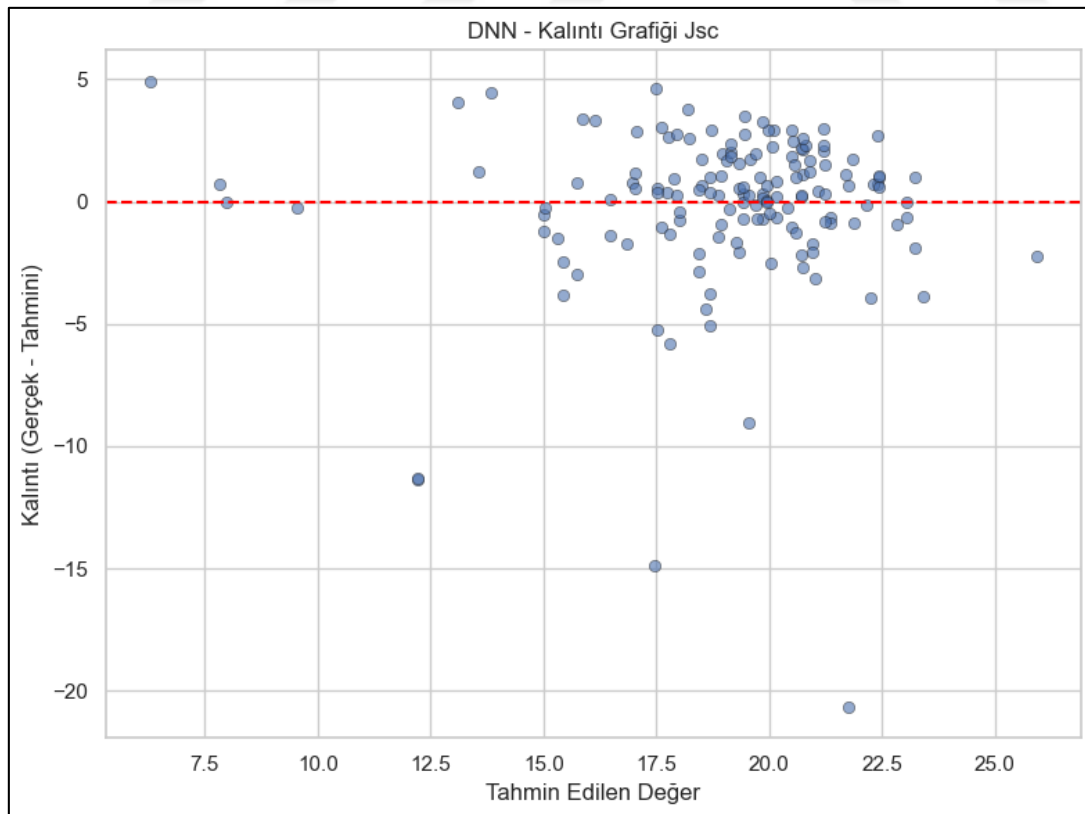


Şekil 4.20. DNN modelinin PCE için tahmin edilen ve gerçek değerler grafiği

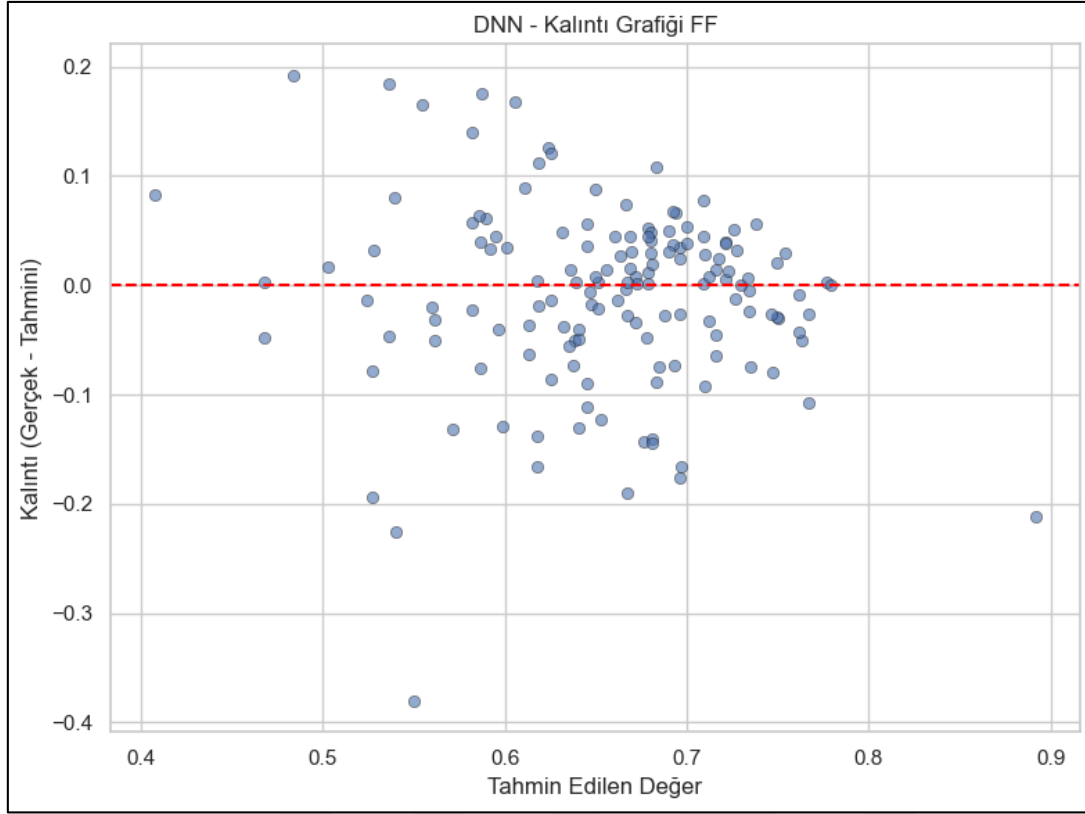
DNN modelinin kalıntı grafiklerindeki davranışlar da RF ve MLP modelinde gözlemlenenler ile benzerdir.



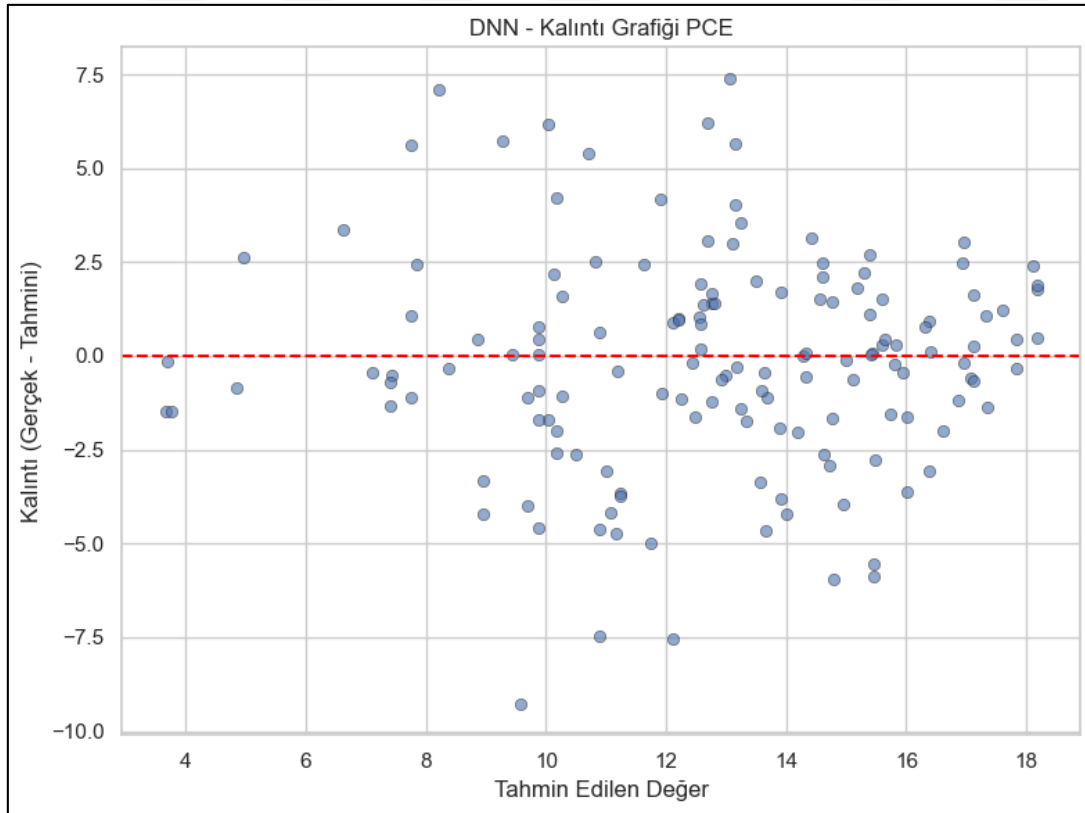
Şekil 4.21. DNN modeli için V_{oc} kalıntı grafiği



Şekil 4.22. DNN modeli için J_{sc} kalıntı grafiği



Şekil 4.23. DNN modeli için FF kalıntı grafiği



Şekil 4.24. DNN modeli için PCE kalıntı grafiği

Oluşturulan modeller hedef değişkenleri olan V_{oc} , J_{sc} , FF ve PCE verileri arasındaki ilişkilerin bir kısmını yakalamakta ancak tüm ilişkileri yakalayamamaktadır. Ayrıca, modelin genelleme yapmakta zorlandığı da gözlenmektedir. Kullanılan modellerin R^2 , RMSE, MAE değerleri, parite ve kalıntı grafikleri incelendiğinde en iyi sonuçların RF modelinde elde edildiği görülmüştür. Kullanılan bütün modellerde önyargılılık ve az/çok uyumluluk görülse de modelin performansını etkileyecek kadar büyük değildir. Veriler arasındaki ilişkinin kompleks bir yapıya sahip olmasından dolayı modellerin tahmin etme aşamasında zorluk yaşadıkları görülmektedir.

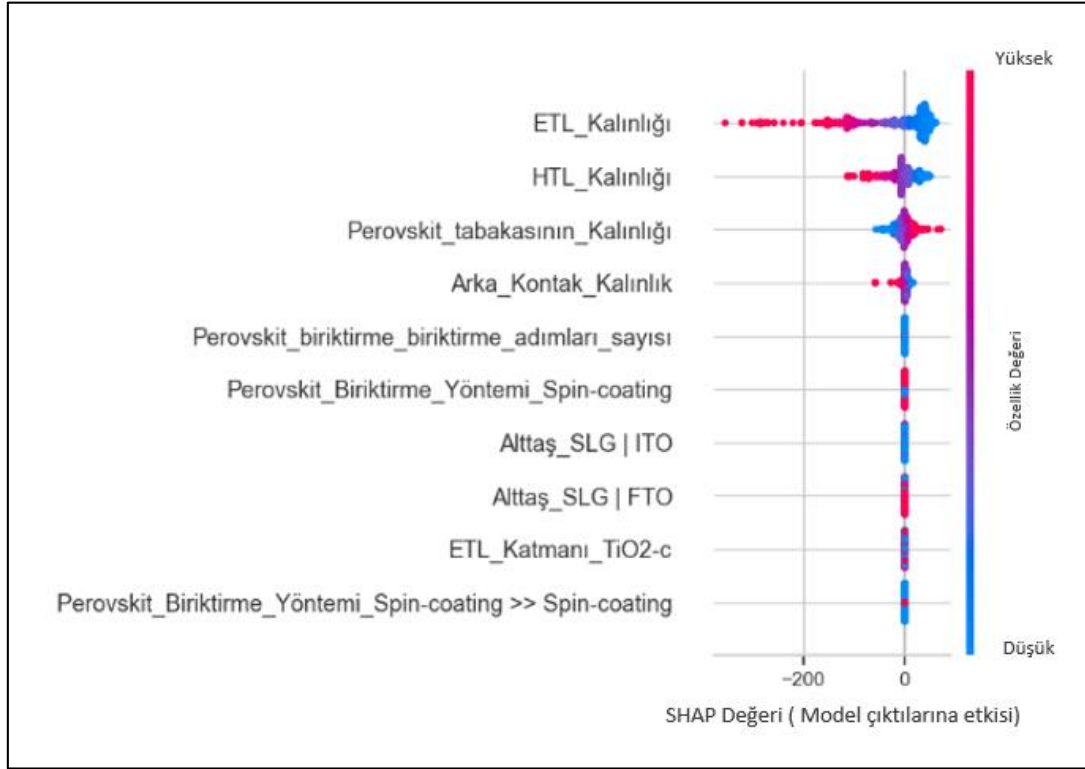
Modeller için özellik analizi yapmak amacıyla SHAP grafikleri kullanılmıştır. SHAP, modeller tahmin yaparken özelliklerin hedef değişkenleri olan V_{oc} , J_{sc} , FF ve PCE üzerindeki etki miktarını gösterir. SHAP değerleri, yani, her bir özelliğin hedef değişkenlerine katkıları hesaplanmıştır. Pozitif/negatif bir SHAP değeri öngörülen çıktı parametrelerine pozitif/negatif bir katkıyı göstermektedir [68]. Pembe noktalar yüksek SHAP değerlerini, mavi noktalar ise düşük SHAP değerlerini göstermektedir.

SHAP grafikleri incelendiğinde, HTL ve ETL kalınlıklarının en önemli özellikler olduğu görülmektedir. HTL kalınlığının çok düşük veya çok yüksek olması PSC'lerin performansını etkilemektedir. Çünkü, boşluklar HTL'den yük çıkarma hızını ve cihazdaki rekombinasyonu engellemektedir. HTL çok ince olduğunda, perovskit ile elektrot arasında teması izin verebilmekte ve rekombinasyonu artırabilmektedir [69]. HTL çok kalın olduğunda ise, seri direnç artış göstermekte vedeşiklerin HTL yeniden birleşme olmadan anoda ulaşması zorlaşmaktadır [70].

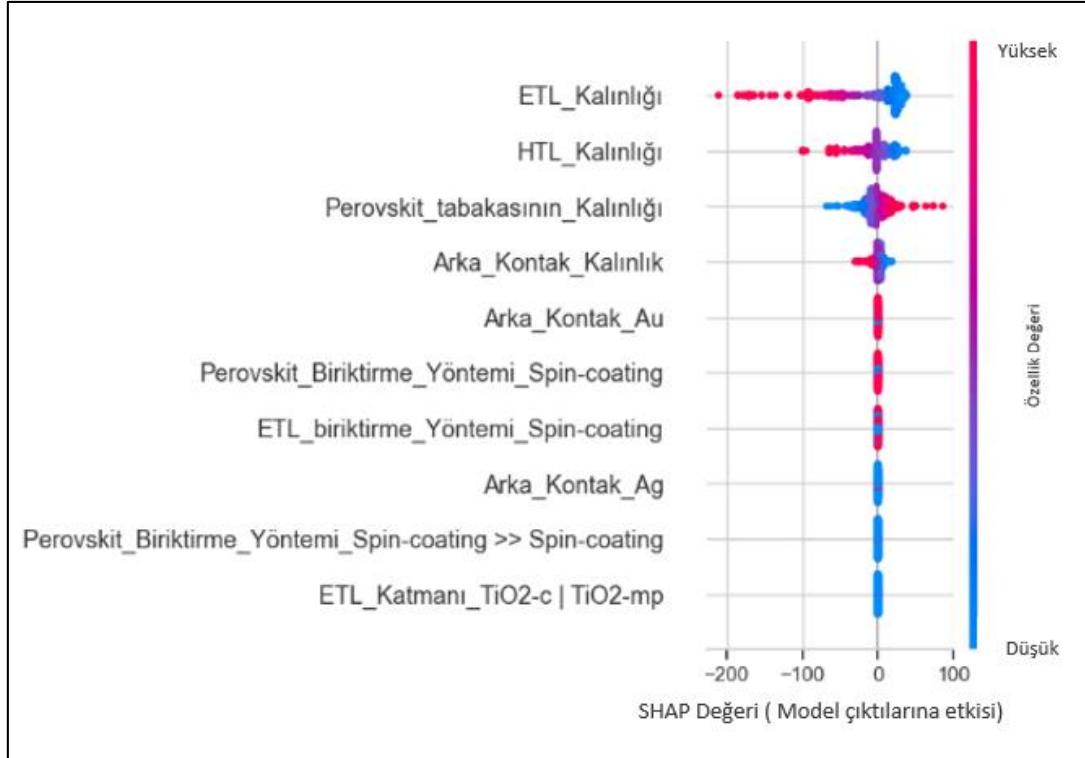
ETL çok kalın olduğunda, rekombinasyonda artış meydana gelmektedir. PSC elektronlarının üst elektroda ulaşmak için daha uzun bir yol almak zorunda kalması hücrenin performansını etkilemektedir. ETL çok ince olduğunda, küçük kaçak akım ve düşük rekombinasyon oranına sahip olmakta ve ayrıca yüksek geçirgenlik sağlamaktadır [70].

Perovskit tabakasının kalınlığı hücrenin performans parametrelerini etkilemektedir. Çok ince olması durumunda, arka kontak tabakasının tükenme bölgesine çok yakın olmasına neden olmaktadır. Yeterli kalınlıkta olması durumunda, daha fazla sayıda fotonun soğurulması nedeniyle PSC'nin performansında artış görülmektedir [71].

MLP ve DNN grafikleri incelendiğinde, hedef değişkenleri tahmininde HTL ve ETL kalınlıklarının çok yüksek olması negatif katkı, çok düşük olması pozitif katkı sağladığı beklendiği üzere görülmektedir. Perovskit tabakasının kalınlığı hedef değişkenler üzerinde daha yüksek etkiye sahip olup pozitif bir katkı yapmaktadır, daha düşük değere sahip olmak da negatif katkı yapmaktadır.

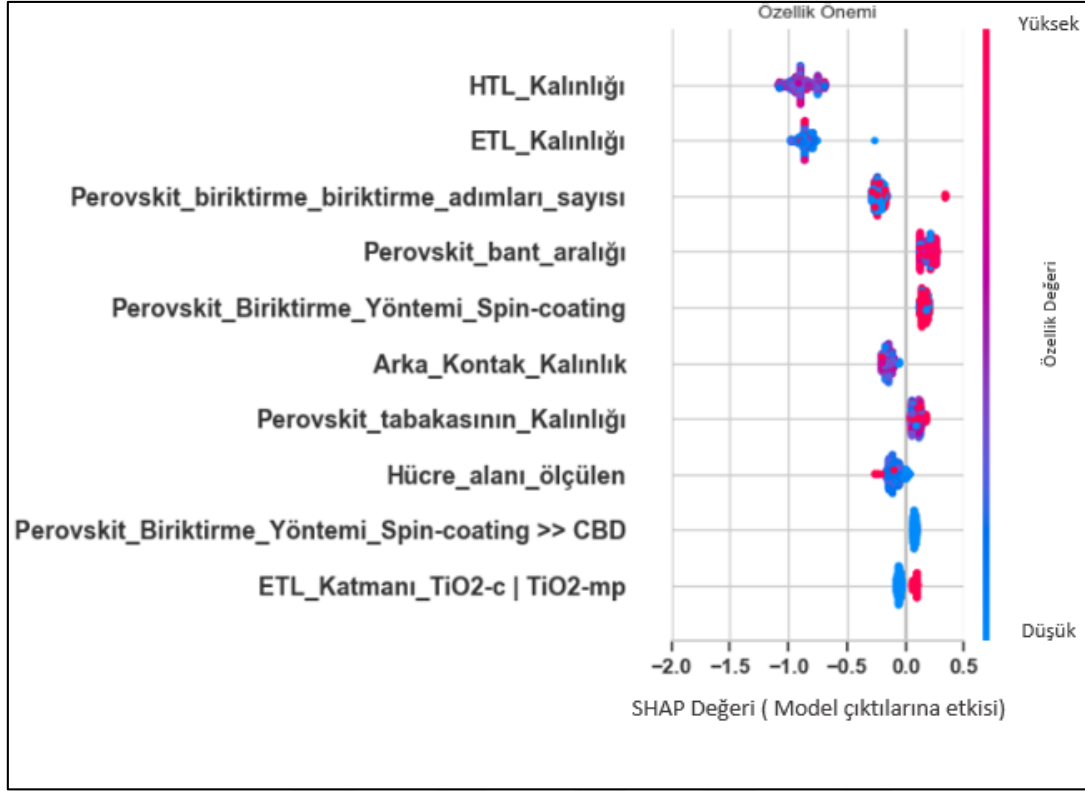


Şekil 4.25. MLP modelinin SHAP grafiği



Şekil 4.26. DNN modelinin SHAP grafiği

RF modeli incelendiğinde, SHAP grafiğindeki en önemli parametrelerin yine HTL ve ETL kalınlığı olmasına rağmen MLP ve DNN modellerinde gözlemlenenden farklı olarak, bu katmanların kalınlıklarının çok yüksek veya çok düşük olmasının hedef parametrelerin tahmininde negatif bir etkiye sahip olduğu görülmektedir.



Şekil 4.27. RF modelinin SHAP grafiği

Bu çalışmada kullanılan çoklu çıktı yaklaşımı tüm hedef parametreleri tek model ile elde etmiştir. Böylece, parametreler arasındaki karmaşık ilişkileri ortaya çıkarma ve sistemin daha kapsamlı bir şekilde anlaşılmasını sağlama gibi optimizasyon olanakları sağlanmıştır [55]. Bu çalışmada kullanılan çoklu çıktı yaklaşımı ile elde edilen performans, literatürde bulunan benzer çalışmalarda elde edilen performanslar ile benzerdir [15, 72, 73]. Perovskite Database Project'in veri seti kullanılarak tek çıktı yaklaşımı ile yapılan bir başka çalışmada J_{sc} ve PCE değerleri bu çalışmada elde edilen MAE ve RMSE değerleri gibi yüksek bulunmuştur [74]. Bu değerlerdeki yükseklik veri setine ve J_{sc} ile PCE değerlerini etkileyen parametreler arasındaki kompleks ilişkilere atfedilebilir. Kullanılan modeller için SHAP grafiklerindeki en önemli özelliklerde farklılıklar görülmesine rağmen en çok etkiye sahip olan özellikler ETL ve HTL kalınlıkları olmuştur.



5. SONUÇ VE ÖNERİLER

MAPbI₃ PSC'lerin en yüksek verimliliğe ulaşması ve perovskit soğurucu tabakasının parametrelerinin, ETL/HTL malzemelerinin ve katman kalınlıklarının önemleri ile ilgili çalışma yapılmıştır. Çoklu çıktı regresyonu öğrenimi kullanılarak MAPbI₃ PSC'lerin PCE, V_{oc}, J_{sc}, FF parametrelerini tahmin etmek için RF, MLP ve DNN modelleri kullanılmıştır. Çoklu çıktı yaklaşımı ile her bir model bu parametreler için aynı anda tahmin üretmiştir. Bu yaklaşım ile parametreler arasındaki karmaşık ilişkiler ve yapının kapsamlı değerlendirilmesi gibi optimizasyon olanakları sağlanmıştır.

Modellerin performansını değerlendirmek için R², RMSE, MAE değerleri hesaplanmıştır ve parite ve kalıntı grafikleri oluşturularak modellerin performansları incelenip karşılaştırılmıştır. Ayrıca, modeller hedef değişkenlerinin tahminini yaparken en büyük etkiye sahip özellikleri belirlemek için SHAP grafikleri çizilmiştir.

RF modeli, MLP ve DNN'ye göre daha yüksek R² (0,75-0,68), ve düşük RMSE ve MAE (0,05-2,58, 0,03-1,76) değerleri sergilemiştir. Modellerin performansları PCE, V_{oc}, J_{sc}, FF parametreleri için çizilen parite ve kalıntı grafikleri ile desteklenmiştir. Sonuç olarak, RF modeli hedef değişkenleri tahmin etmede daha iyi sonuç sergilemiştir. Özellik önemini görmek için çizilen SHAP grafikleri incelendiğinde en önemli özellikler olan HTL ve ETL katmanlarının çok yüksek veya düşük olmasının PSC'lerin performansı üzerinde önemli bir etkiye sahip olduğu gözlenmiştir.

Birçok veri kümesinin birden fazla çıktısı vardır ve çıktıları ayrı ayrı ele almak mümkün olsa da, bu yaklaşım çıktıları arasındaki potansiyel ilişkileri göz ardı etmektedir. Çoklu çıktı yaklaşımı, her eşleme işlevini öğrenirken mevcut tüm bilgileri kullandığı için, karmaşık bir süreç olan PSC tasarımı konusunda kolaylıklar sağlayabilir. Literatürdeki çoklu çıktı yaklaşımı ile yapılan çalışmalara bakıldığında bu çalışmanın sonuçlarıyla uyumlu olduğu gözlenmiştir.

Literatür taramasında PSC'ler üzerine çoklu çıktı regresyonu kullanılarak yapılan çalışmalar az görüldüğü için gelecekteki bu çalışmanın gelecekteki çalışmalara katkı sağlayacağı düşünülmektedir. MAPbI₃ PSC'lerin için yapılacak olan gelecekteki çalışmalarda,

kullanılan modellerin performanslarını arttırmak için veri seti genişletilip çeşitlendirilebilir, one-hot dönüşüm yerine logaritmik dönüşüm gibi farklı dönüşümler, farklı model optimizasyonları ve farklı hiper-parametreler kullanılabilir. Ayrıca SHAP grafiklerindeki önemli özellikleri kullanarak optimizasyon yaparak hedef değişkenleri iyileştirilip modellerin optimize edilmiş bir MAPbI₃ PSC yapısı önermesi sağlanabilir.



KAYNAKLAR

1. Zuo, C., Bolink, H. J., Han, H., Huang, J., Cahen, D. ve Ding, L. (2016). Advances in Perovskite Solar Cells. *Advanced Science*, 3(7), 1500324.
2. Nazir, S., Ali, A., Aftab, A., Muqet, H. A., Mirsaeidi, S. ve Zhang, J.-M. (2023). Techno-Economic and Environmental Perspectives of Solar Cell Technologies: A Comprehensive Review. *Energies*, 16(13), 4959.
3. Pastuszak, J., Wegierek, P. (2022). Photovoltaic Cell Generations and Current Research Directions for Their Development. *Materials*, 15(16), 5542.
4. Sahoo, S. K., Manoharan, B. ve Sivakumar, N. (2018). *Perovskite Photovoltaics Basic to Advanced Concepts and Implementation: Chapter 1 - Introduction: Why Perovskite and Perovskite Solar Cells?*, Academic Press, 1-24.
5. Lee, S. W., Bae, S., Kim, D. ve Lee, H. S. (2020). Historical Analysis of High-Efficiency, Large-Area Solar Cells: Toward Upscaling of Perovskite Solar Cells. *Advanced Materials*, 32(51), 2002202.
6. Kumar, N. S., Naidu, K. C. B. (2021). A review on perovskite solar cells (PSCs), materials and applications. *Journal of Materiomics*, 7(5), 940-956.
7. Li, J., Pradhan, B., Gaur, S. ve Thomas, J. (2019). Predictions and Strategies Learned from Machine Learning to Develop High-Performing Perovskite Solar Cells. *Advanced Energy Materials*, 9(46), 1901891.
8. Cueto, M., Rawski-Furman, C., Aragón, J., Ortí, E. ve Troisi, A. (2022). Data-Driven Analysis of Hole-Transporting Materials for Perovskite Solar Cells Performance. *The Journal of Physical Chemistry C*, 126(31), 13053-13061.
9. Li, F., Peng, X., Wang, Z., Zhou, Y., Wu, Y., Jiang, M. ve Xu, M. (2019). Machine learning (ML)-assisted design and fabrication for solar cells. *Energy & Environmental Materials*, 2(4), 280-291.
10. Devi, V. L., Kuchhal, P., Debasis, D., Sharma, A., Shukla, N. K. ve Aggarwal, M. (2024). Machine Learning-Driven Optimization of Transport Layers in MAPbI₃ Perovskite Solar Cells for Enhanced Performance. *IEEE Access*, 12, 179546-179565.
11. Hui, Z., Wang, M., Yin, X., Wang, Y.N. ve Yue, Y. (2023). Machine learning for perovskite solar cell design. *Computational Materials Science*, 226, 112215.
12. Salah, M. M., Ismail, Z. ve Abdellatif, S. (2023). Selecting an appropriate machine-learning model for perovskite solar cell datasets. *Materials for Renewable and Sustainable Energy*, 12(3), 187-198.

13. Nguyen, H. A., Dou, F. Y., Park, N., Wu, S., Sarsito, H., Diakubama, B., Larson, H., Nishiwaki, E., Homer, M., Cash, M. ve Cossairt, B. M. (2022). Predicting Indium Phosphide Quantum Dot Properties from Synthetic Procedures Using Machine Learning. *Chemistry of Materials*, 34(14), 6296-6311.
14. Liu, Y., Yan, W., Han, S., Zhu, H., Tu, Y., Guan, L. ve Tan, X. (2022). How Machine Learning Predicts and Explains the Performance of Perovskite Solar Cells. *Solar RRL*, 6(6), 2101100.
15. Pretto, T., Baum, F., Gouvêa, R. A., Brolo, A. G. ve Santos, M.J.L. (2024). Optimizing the Synthesis Parameters of Double Perovskites with Machine Learning Using a Multioutput Regression Model. *The Journal of Physical Chemistry C*, 128(17), 7041-7052.
16. Xu, D., Shi, Y., Tsang, I. W., Ong, Y. S., Gong, C. ve Shen, X. (2020). Survey on Multi-Output Learning. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 31(7), 2409-2429.
17. Suman, P., Goyal, P. (2020). Evolution of PV technology from conventional to nano-materials. *Materials Today: Proceedings*, 28, 1593-1597.
18. El Chaar, L., Lamont, L. A. ve El Zein, N. (2011). Review of photovoltaic technologies. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 15(5), 2165-2175.
19. Tyagi, V. V., Rahim, N. A. A., Rahim, N. A. ve Selvaraj, J. A. L. (2013). Progress in solar PV technology: Research and achievement. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 20, 443-461.
20. Ghosh, S., Yadav, R. (2021). Future of photovoltaic technologies: A comprehensive review. *Sustainable Energy Technologies and Assessments*, 47, 101410.
21. Heidarzadeh, H., Tavousi, A. (2019). Performance enhancement methods of an ultra-thin silicon solar cell using different shapes of back grating and angle of incidence light. *Materials Science and Engineering: B*, 240, 1-6.
22. Kettle, J., Aghaei, M., Ahmad, S., Fairbrother, A., Irvine, S., Jacobsson, J. J., Kazim, S., Kazukauskas, V., Lamb, D., Lobato, K., Mousdis, G. A., Oreski, G., Reinders, A., Schmitz, J., Yilmaz, P. ve Theelen, M. J. (2022). Review of technology specific degradation in crystalline silicon, cadmium telluride, copper indium gallium selenide, dye sensitised, organic and perovskite solar cells in photovoltaic modules: Understanding how reliability improvements in mature technologies can enhance emerging technologies. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 30(12), 1365-1392.
23. Kumar, M., Kumar, A. (2017). Performance assessment and degradation analysis of solar photovoltaic technologies: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 78, 554-587.

24. Jiang, W., Ni, X. ve Liu, F. (2021). Exotic Topological Bands and Quantum States in Metal-Organic and Covalent-Organic Frameworks. *Accounts of Chemical Research*, 54(2), 416-426.
25. Zhang, Y., Park, N. G. (2020). A thin film (<200 nm) perovskite solar cell with 18% efficiency. *Journal of Materials Chemistry A*, 8(34), 17420-17428.
26. Green, M., Dunlop, E., Yoshita, M., Kopidakis, N., Bothe, K., Siefert, G., Hao, X. ve Jiang, J. (2025). Solar Cell Efficiency Tables (Version 65). *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 33, 3-15.
27. Dambhare, M. V., Butey, B. ve Moharil, S. V. (2021). Solar photovoltaic technology: A review of different types of solar cells and its future trends. *Journal of Physics: Conference Series*, 1913(1), 012053.
28. Ahmad, Z., Najeeb, M. A., Shakoar, R. A., Al-Muhtaseb, S. A. ve Touati, F. (2018). Limits and possible solutions in quantum dot organic solar cells. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 82, 1551-1564.
29. Singh, A. K., Srivastava, S., Mahapatra, A., Baral, J. K. ve Pradhan, B. (2021). Performance optimization of lead free-MASnI₃ based solar cell with 27% efficiency by numerical simulation. *Optical Materials*, 117, 111193.
30. Green, M. A., Ho-Baillie, A. ve Snaith, H. J. (2014). The emergence of perovskite solar cells. *Nature Photonics*, 8(7), 506-514.
31. Li, S., Zhang, C., Song, J. J., Xie, X., Meng, J. Q. ve Xu, S. (2018). Metal Halide Perovskite Single Crystals: From Growth Process to Application. *Crystals*, 8(5), 220.
32. Bello, S., Urwick, A., Bastianini, F., Nedoma, A. J. ve Dunbar, A. (2022). An introduction to perovskites for solar cells and their characterisation. *Energy Reports*, 8, 89-106.
33. Wang, Q., Shao, Y., Dong, Q., Xiao, Z., Yuan, Y. ve Huang, J. (2014). Large fill-factor bilayer iodine perovskite solar cells fabricated by a low-temperature solution-process. *Energy and Environmental Science*, 7, 2359-2365.
34. Xing, G., Mathews, N., Sun, S., Lim, S. S., Lam, Y. M., Graetzel, M., Mhaisalkar, S. ve Sum, Tze C. (2013). Long-Range Balanced Electron- and Hole-Transport Lengths in Organic-Inorganic CH₃NH₃PbI₃. *Science*, 342, 344-347.
35. Dong, Q., Fang, Y., Shao, Y., Mulligan, P., Qiu, J., Cao, L. ve Huang, J. (2015). Solar cells. Electron-hole diffusion lengths > 175 μ m in solution-grown CH₃NH₃PbI₃ single crystals. *Science*, 347(6225), 967-970.
36. Lian, J., Wang, Q., Yuan, Y., Shao, Y. ve Huang, J. (2015). Organic solvent vapor sensitive methylammonium lead trihalide film formation for efficient hybrid perovskite solar cells. *Journal of Materials Chemistry A*, 3, 9146-9151.

37. Sum, T. C., Chen, S., Xing, G., Liu, X. ve Wu, B. (2015). Energetics and dynamics in organic-inorganic halide perovskite photovoltaics and light emitters. *Nanotechnology*, 26, 342001.
38. Jodlowski, A. D., Roldán-Carmona, C., Grancini, G., Salado, M., Ralaifarisoa, M., Shahzada, A., Koch, N., Camacho, L., Miguel, G. ve Nazeeruddin, M. K. (2017). Large guanidinium cation mixed with methylammonium in lead iodide perovskites for 19% efficient solar cells. *Nature Energy*, 2, 972-979.
39. Bhattarai, S., Mhamdi, A., Hossain, I., Raoui, Y., Pandey, R., Madan, J., Bouazizi, A., Maiti, M., Gogoi, D. ve Sharma, A. (2022). A detailed review of perovskite solar cells: Introduction, working principle, modelling, fabrication techniques, future challenges. *Micro and Nanostructures*, 172, 207450.
40. Mahmood, K., Sarwar, S. ve Mehran, M. T. (2017). Current status of electron transport layers in perovskite solar cells: materials and properties. *RSC Advances*, 7(28), 17044-17062.
41. Azri, F., Meftah, A., Sengouga, N. ve Meftah, A. (2019). Electron and hole transport layers optimization by numerical simulation of a perovskite solar cell. *Solar energy*, 181, 372-378.
42. Sirotinskaya, S., Schmechel, R. ve Benson, N. (2020). Influence of the cathode microstructure on the stability of inverted planar perovskite solar cells. *RSC advances*, 10(40), 23653-23661.
43. Bryant, D., Aristidou, N., Pont, S., Sanchez-Molina, I., Chotchunangatchaval, T., Wheeler, S., Durrant, J. R. ve Haque, S. A. (2016). Light and oxygen induced degradation limits the operational stability of methylammonium lead triiodide perovskite solar cells. *Energy & Environmental Science*, 9(5), 1655-1660.
44. Edri, E., Kirmayer, S., Henning, A., Mukhopadhyay, S., Gartsman, K., Rosenwaks, Y., Hodes, G. ve Cahen, D. (2014). Why lead methylammonium tri-iodide perovskite-based solar cells require a mesoporous electron transporting scaffold (but not necessarily a hole conductor). *Nano Letters*, 14(2), 1000-1004.
45. O'Mahony, F. T. F., Lee, Y. H., Jellett, C., Dmitrov, S., Bryant, D. T. J., Durrant, J. R., O'Regan, B. C., Graetzel, M., Nazeeruddin, M. K. ve Haque, S. A. (2015). Improved environmental stability of organic lead trihalide perovskite-based photoactive-layers in the presence of mesoporous TiO₂. *Journal of Materials Chemistry A*, 3(14), 7219-7223.
46. Chowdhury, T. A., Bin Zafar, M. A., Sajjad-Ul Islam, M., Shahinuzzaman, M., Islam, M. A. ve Khandaker, M. U. (2023). Stability of perovskite solar cells: issues and prospects. *RSC Advances*, 13(3), 1787-1810.
47. Zhang, M., Yu, H., Lyu, M., Wang, Q., Yun, J. H. ve Wang, L. (2014). Composition-dependent photoluminescence intensity and prolonged recombination lifetime of perovskite CH₃NH₃PbBr₃-xCl_x films. *Chemical Communications*, 50(79), 11727-11730.

48. Badia, L., Mas-Marzá, E., Sánchez, R. S., Barea, E. M., Bisquert, J. ve Mora-Seró, I. (2014). New iridium complex as additive to the spiro-OMeTAD in perovskite solar cells with enhanced stability. *APL Materials*, 2(8), 081507.
49. Wang, D., Wright, M., Elumalai, N. K. ve Uddin, A. (2016). Stability of perovskite solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 147, 255-275.
50. Machui, F., Hösel, M., Li, N., Spyropoulos, G. D., Ameri, T., Søndergaard, R. R., Jørgensen, M., Scheel, A., Gaiser, D., Kreul, K., Lenssen, D., Legros, M., Lemaitre, N., Vilkman, M., Välimäki, M., Nordman, S., Brabec, C. J. ve Krebs, F. C. (2014). Cost analysis of roll-to-roll fabricated ITO free single and tandem organic solar modules based on data from manufacture. *Energy & Environmental Science*, 7(9), 2792-2802.
51. Müller, A. C., Guido, S. (2018). *Introduction to Machine Learning with Python: A Guide for Data Scientists*, O'Reilly Media, Incorporated, Sebastopol, California, 1-88.
52. Ayodele, T. O. (2010). *New Advances in Machine Learning: Types of Machine Learning Algorithms*, InTech, Rijeka, Croatia, 19-24.
53. Sarker, I. H. (2021). Machine Learning: Algorithms, Real-World Applications and Research Directions. *SN Computer Science*, 2(3), 160.
54. Van Engelen, J. E., Hoos, H. H. (2020). A survey on semi-supervised learning. *Machine Learning*, 109(2), 373-440.
55. Borchani, H., Varando, G., Bielza, C., ve Larrañaga, P. (2015). A survey on multi-output regression. *WIREs Data Mining and Knowledge Discovery*, 5(5), 216-233.
56. İnternet: Multiclass and multioutput algorithms. URL: <https://scikit-learn.org/stable/modules/multiclass.html#regressor-chain/> Erişim Tarihi: 29.11.2024.
57. Tran, N. K., Kühle, L. C. ve Klau, G. W. (2024). A critical review of multi-output support vector regression. *Pattern Recognition Letters*, 178, 69-75.
58. İnternet: Perovskite Database Project. URL: <https://www.perovskitedatabase.com/> Erişim Tarihi: 29.11.2024.
59. Putatunda, S., Kiran R, D. (2018, 28 November). *A Comparative Analysis of Hyperopt as Against Other Approaches for Hyper-Parameter Optimization of XGBoost*. Paper presented at the 2018 International Conference on Signal Processing and Machine Learning, Shanghai, China, 6-10.
60. Yang, L., Shami, A. (2020). On hyperparameter optimization of machine learning algorithms: Theory and practice. *Neurocomputing*, 415, 295-316.
61. Raschka, S. (2018). Model evaluation, model selection, and algorithm selection in machine learning. *arXiv preprint arXiv:1811.12808*.

62. Li, W., Hu, J., Chen, Z., Jiang, H., Wu, J., Meng, X., Fang, X., Lin, J., Ma, X., Yang, T., Cheng, P. ve Xie, R. (2023). Performance prediction and optimization of perovskite solar cells based on the Bayesian approach. *Solar Energy*, 262, 111853.
63. Mishra, S., Gaikwad, S. B. ve Singh, T. (2024). Machine Learning Guided Strategies to Develop High Efficiency Indoor Perovskite Solar Cells. *Advanced Theory and Simulations*, 2301193.
64. Alpaydin, E. (2020). *Introduction to Machine Learning (3rd Ed.)*, The MIT press, London, England, 279-281.
65. Hassanbaki Garabaghi, F., Benzer, S., Benzer, R. (2023). Modeling dissolved oxygen concentration using machine learning techniques with dimensionality reduction approach. *Environmental Monitoring and Assessment*, 195(7), 879.
66. Mohanasundaram, R., Malhotra, A. S., Arun, R. ve Periasamy, P. S. (2019). *Deep Learning and Parallel Computing Environment for Bioengineering Systems: Chapter 8 - Deep Learning and Semi-Supervised and Transfer Learning Algorithms for Medical Imaging*, Academic Press, St. Louis, Missouri, 139-151.
67. Islam, M. S., Islam, M. T., Sarker, S., Jame, H. A., Nishat, S., Jani, M., Rauf, A., Ahsan, S., Shorowordi, M., Efstathiadis, H., Carbonara, J. ve Ahmed, S. (2022). Machine Learning Approach to Delineate the Impact of Material Properties on Solar Cell Device Physics. *ACS Omega*. 7(26), 22263-22278.
68. Lundberg, S., Lee, S. I. (2017, December). *A Unified Approach to Interpreting Model Predictions*. Paper presented at the Conference on Neural Information Processing Systems, Long Beach, California.
69. Rombach, F. M., Haque, S. A. ve Macdonald, T. J. (2021). Lessons learned from spiro-OMeTAD and PTAA in perovskite solar cells, *Energy & Environmental Science*, 14(10), 5161-5190.
70. Hossain, M. K., Samajdar, D. P., Das, R. C., Arnab, A. A., Rahman, M. F., Rubel, M. H. K., Islam, M. R., Bencherif, H., Pandey, R., Madan, J. ve Mohammed, M. K. A. (2023). Design and Simulation of Cs₂BiAgI₆ Double Perovskite Solar Cells with Different Electron Transport Layers for Efficiency Enhancement, *Energy & Fuels*, 37(5), 3957-3979.
71. AlZoubi, T., Moghrabi, A., Moustafa, M. ve Yasin, S. (2021). Efficiency boost of CZTS solar cells based on double-absorber architecture: Device modeling and analysis. *Solar Energy*, 225, 44-52.
72. Sanimu, S. N., Yang, H. Y., Kandel, J., Moon, Y. C., Sharma Gaudel, G., Yu, S. J., Kim, Y. J., Kim, S., Jun, B. H. ve Rho, W. Y. (2024). Machine Learning-Assisted Fabrication of PCBM-Perovskite Solar Cells with Nanopatterned TiO₂ Layer. *Energy & Environmental Materials*, 7(4), e12676.

73. Khatua, R., Das, B. ve Mondal, A. (2024). Physics-Informed Machine Learning with Data-Driven Equations for Predicting Organic Solar Cell Performance. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 16(42), 57467-57480.
74. Rumman, A. H., Sahriar, M. A., Islam, M. T., Shorowordi, K. M., Carbonara, J., Broderick, S. ve Ahmed, S. (2023). Data-driven design for enhanced efficiency of Sn-based perovskite solar cells using machine learning. *APL Machine Learning*, 1(4), 046117.







Gazili olmak ayrıcalıktır