

*Посвящается памяти Б.Н. Гречушникова*

## ОПТИМИЗАЦИЯ ГЕНЕТИЧЕСКОГО АЛГОРИТМА СОВМЕСТНОЙ ПОДГОНКИ КРИВЫХ РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ РАЗЛИЧНОГО ТИПА

© 2011 г. А. Г. Сутырин, Р. М. Имамов

*Институт кристаллографии РАН, Москва*

*E-mail: imamov@ns.crys.ras.ru*

Поступила в редакцию 27.05.2010 г.

Развит метод совместной обработки данных рентгеновского рассеяния различного типа. Показано, что путем оптимизации генетического алгоритма совместного решения обратной задачи методов рентгеновской дифрактометрии и рефлектометрии можно достичь уменьшения объема вычислений и надежно определить параметры слоев в исследуемой структуре даже в условиях ограниченной априорной информации о них.

### ВВЕДЕНИЕ

Для диагностики полупроводниковых гетероструктур наряду с другими методами эффективно используется комплекс рентгеновских методов: двухкристалльная рентгеновская дифрактометрия (ДРД) и высокоразрешающая рентгеновская рефлектометрия (ВРР). Генетические алгоритмы представляют значительный потенциал для решения обратной задачи рентгеновских методов [1–3]. Они используют общий концептуальный базис моделирования эволюции параметров в процессе повторяющихся циклов мутации, репродукции и селекции. Эти алгоритмы работают с наборами векторов (популяциями) в пространстве параметров  $\{\mathbf{p}_j\}$ , и возможность одновременно исследовать множество различных областей пространства параметров является ключом к их успеху.

В настоящей работе к решению обратной задачи восстановления параметров слоев в гетероструктуре привлечен метод “Дифференциальной эволюции” (ДЭ) [2, 3]. Использование вероятностных процедур позволяет данному методу избегать локальных минимумов в процессе глобальной минимизации оценочной функции. Выполнена оптимизация генетического алгоритма, позволившая сократить вычислительное время.

### АЛГОРИТМ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ЭВОЛЮЦИИ

Предположим, что экспериментальные данные рентгеновской рефлектометрии содержат  $N$  измеренных точек  $(\theta_j, I_j)$ , где  $\theta_j$  – угол падения

рентгеновского излучения,  $I_j$  – интенсивность рассеяния, измеренная в точке  $\theta_j$ ,  $j = 1, 2, \dots, N$ . Расчетные интенсивности  $I(\theta_j, \mathbf{p})$  вычисляются в соответствии с моделью с  $n$  искомыми параметрами, представленными вектором  $\mathbf{p} = [p_1, p_2, \dots, p_n]$  и сопоставляемыми с экспериментальными данными при использовании некоторой целевой функции  $E(\mathbf{p})$ . Под управлением функции  $E(\mathbf{p})$  алгоритм стремится оптимизировать вектор параметров  $\mathbf{p}$ , стартуя с начальной популяции из случайным образом сгенерированных векторов параметров, с повторением циклов мутации, рекомбинации и отбора. Параметры популяции хранятся в массиве  $m$ , векторов параметров  $\mathbf{P} = [\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_{m-1}]$ . Размер популяции  $m$  выбирается пользователем, и в данной работе использован  $m = 10\text{--}50 n$ . Вектор параметров  $\mathbf{p}_0$  задается пользователем в качестве начального приближения для структуры, в то время как остающиеся  $m - 1$  векторов инициализируются, назначая каждый параметр случайным начальным значением внутри его допустимого диапазона. После того как все векторы параметров инициализированы, для них вычисляется целевая функция  $E$ . Параметры с наименьшим значением  $E$  сохраняются в “наилучшем” векторе  $\mathbf{b}$ . Этот вектор используется для задания предпочтительного направления процесса оптимизации и модифицируется всякий раз, когда находится равное или лучшее решение.

Основная идея метода ДЭ – в его простой схеме создания новых членов популяции [2]. Из нее случайным образом выбираются два вектора:  $\mathbf{p}_a$  и  $\mathbf{p}_b$ . Затем вектор разности  $(\mathbf{p}_a - \mathbf{p}_b)$  используется

для изменения “наилучшего” вектора  $\mathbf{b}$ , согласно соотношению:

$$\mathbf{b}' = \mathbf{b} + k_M(\mathbf{p}_a - \mathbf{p}_b), \quad (1)$$

где  $k_M$  – константа мутации. Значение  $k_M$  выбирается эмпирически для быстрой сходимости. В данном случае использовалось значение  $k_M = 0.7$ . Поскольку по мере развития процесса ДЭ векторы популяции сходятся друг к другу, то при уменьшении разностей между ними искомое решение последовательно уточняется. Для каждого нового  $\mathbf{b}'$  строится пробный вектор  $\mathbf{t} = [t_1, t_1, \dots, t_n]$ , который сравнивается с вектором  $\mathbf{p}_0$ . Начиная со случайным образом выбранного  $j$ -го параметра, пробные параметры  $t_j$  последовательно берутся из  $\mathbf{b}'$  – с вероятностью  $k_r$ , или из  $\mathbf{p}_0$  – с вероятностью  $1 - k_r$ , где  $k_r$  – постоянная рекомбинации, определяемая пользователем. Здесь использовались значения  $k_r = 0.5-0.9$ . Если значение пробного параметра  $t_j$  выходит за пределы  $p_j^{\min}$  и  $p_j^{\max}$  допустимого интервала, то оно заменяется случайным образом выбранным значением из этого интервала. Если вектор  $\mathbf{t}$  удовлетворяет неравенству:

$$E(\mathbf{t}) < E(\mathbf{p}_0), \quad (2)$$

то он заменяет собой  $\mathbf{p}_0$ , иначе  $\mathbf{p}_0$  сохраняется в следующем поколении. Применение данной процедуры ко всем векторам параметров  $\mathbf{p}_i$  в популяции  $\mathbf{P}$  (с вектором  $\mathbf{b}$ , обновляемым каждый раз) создает одно из поколений, которые в свою очередь с помощью итераций сменяют друг друга до тех пор, пока величина  $E(\mathbf{b})$  не уменьшится до заданного значения  $E_0$ . При этом наилучший вектор  $\mathbf{b}$  сходится к глобальному минимуму. Подробная блок-схема этого алгоритма приведена в [2]. Величину  $E_0$  (глубину глобального минимума для данной модели) трудно определить заранее, поэтому нами добавлен еще один критерий остановки алгоритма. Повторение итераций прекращается, если максимальное расстояние между любыми двумя векторами  $\mathbf{p}_a$  и  $\mathbf{p}_b$  в пространстве параметров меньше некоторого малого значения  $\Delta p$ . В этом случае процедура (1) практически не меняет состояние популяции ни при каких  $\mathbf{p}_a$  и  $\mathbf{p}_b$ .

### СТРУКТУРА ЦЕЛЕВОЙ ФУНКЦИИ ДЛЯ СОВМЕСТНОЙ ПОДГОНКИ КРИВЫХ РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ РАЗЛИЧНОГО ТИПА

В процессе совместной обработки набора экспериментальных данных, полученных различными методами, для их описания необходимо выделить набор параметров в некоторой модели. В общем случае могут быть измерены  $N_c$  различных кривых рентгеновского рассеяния (дифрактометрии, рефлектометрии, кривые диффузного фона для каждого процесса рассеяния и др.) от одного

и того же образца. Каждая кривая задана для  $N_k$  значений углов падения излучения  $\theta$ ,  $k = 1, \dots, N_c$ . Модель структуры образца содержит  $N_t$  векторов параметров  $\mathbf{p}_j = \{p_{j1}, \dots, p_{jN_{vj}}\}$  ( $j = 1, \dots, N_t$ ,  $N_{vj}$  – число компонент вектора  $\mathbf{p}_j$ ) различного типа (толщины, плотности, деформация и аморфизация слоев, а также интенсивности фонового рассеяния), от которых в той или иной комбинации зависят кривые рентгеновского рассеяния.

Совместная подгонка ряда различных кривых позволяет увеличить точность и однозначность решения обратной задачи за счет возрастания объема экспериментальной информации на один искомый параметр. В качестве целевой функции  $E(\mathbf{p})$  используется функционал следующего вида:

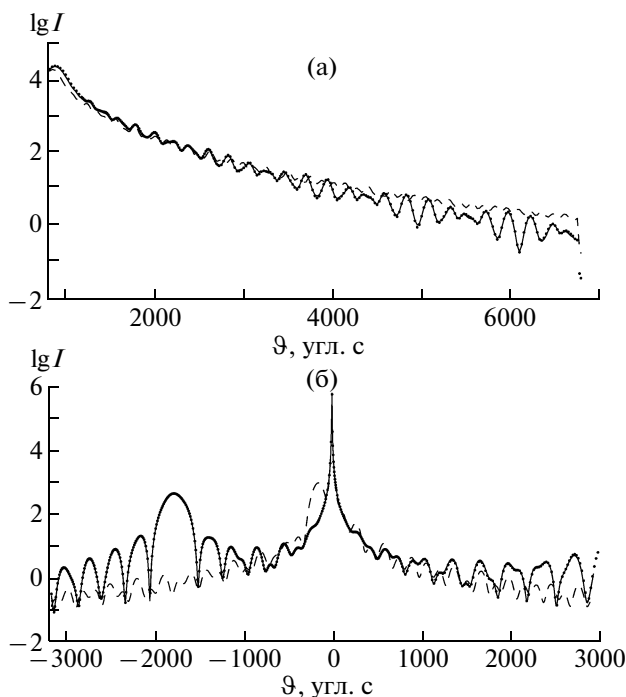
$$E(\mathbf{p}) = \chi^2 = \quad (3)$$

$$= \frac{1}{N - M} \sum_{k=1}^{N_c} w_k \sum_{i=1}^{N_k} \frac{(I_{ik}^{\text{ex}} - I(\theta_{ik}, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_{N_t}) - I^b(\theta_{ik}, \mathbf{p}_j))^2}{\sigma_{ik}^2},$$

где  $N = \sum_{k=1}^{N_c} N_k$  – суммарное число экспериментальных точек,  $M = \sum_{j=1}^{N_t} N_{vj}$  – суммарное число параметров в векторах  $\mathbf{p}_j$ ,  $w_k$  – вес, с которым учитывается  $k$ -я кривая,  $I^{\text{ex}}$ ,  $I$  и  $I^b$  – экспериментальные, теоретические и фоновые интенсивности,  $\sigma$  – статистическая ошибка измерений; при тестировании программы используется значение  $\sigma = 1$ .

### ОПТИМИЗАЦИЯ ГЕНЕТИЧЕСКОГО АЛГОРИТМА

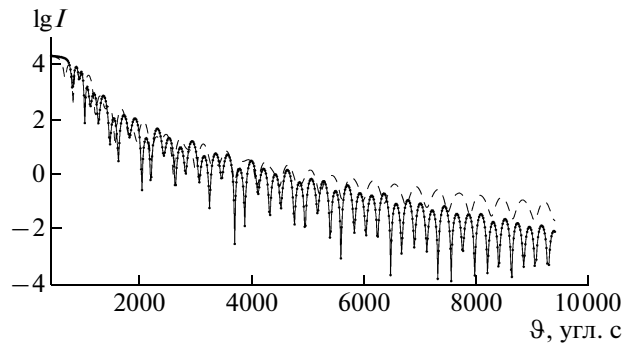
Оптимизация генетического алгоритма может быть основана на перегруппировке вычислений целевой функции  $E(\mathbf{p})$  (3). Значение этой функции определяется левой частью неравенства (2) при заранее известной величине правой части  $E(\mathbf{p}_0)$ , используемой в основном (по временным затратам) цикле вычислений. Выполнение условия (2) контролируется в процессе вычисления выражения (3) отдельно для каждой  $i$ -й экспериментальной точки. Так как величина  $E(\mathbf{p})$  (3) монотонно возрастает по мере суммирования (также независимо от порядка добавления слагаемых) по индексу  $i$ , то вычисление  $E(\mathbf{p})$  можно прекратить при первом же значении  $i$  в (3), при котором условие (2) перестанет выполняться. Дальнейшее суммирование в (3) никак не изменит ход процедуры (1) глобальной минимизации и на нем можно сэкономить вычислительное время. Иными словами, важно знать, что значение  $E(\mathbf{t})$  в какой-то момент стало больше, чем  $E(\mathbf{p}_0)$  в (2). При этом не имеет значения, насколько больше.



**Рис. 1.** Результат тестирования генетического алгоритма совместного решения обратной задачи по данным методов рентгеновской рефлектометрии (а) и дифрактометрии (б). Точки – “эксперимент”, сплошные кривые – результат глобальной оптимизации, штриховые кривые – пример одного из 650 стартовых наборов значений случайных параметров для структуры 1 (таблица), далекого от глобального минимума целевой функции.

**ТЕСТИРОВАНИЕ ПРОГРАММЫ**

Тестирование алгоритма проведено на модельных образцах. Структура 1 состоит из двух слоев и содержит 13 параметров (шесть для рефлектометрии, пять для дифрактометрии и два общих (таблица), подлежащих определению. Продемонстрировано, что при отсутствии априорной ин-



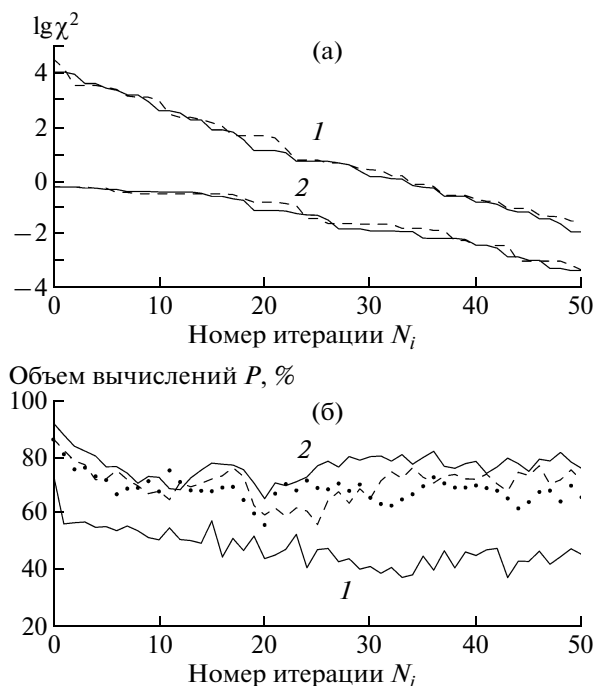
**Рис. 2.** Результат глобальной минимизации  $\chi^2$  при восстановлении параметров структуры 2 (таблица) с применением оптимизации генетического алгоритма подгонки кривых ВРР. Кривые ВРР; точки – “эксперимент”, сплошная кривая – подгонка, штриховая кривая – начальное приближение.

формации о значениях параметров слоев (известны только допустимые пределы) данный метод глобальной оптимизации позволил восстановить заложенные в модель параметры с хорошей точностью (рис. 1).

Тестирование оптимизации генетического алгоритма при подгонке кривых ВРР было выполнено с использованием двухслойной структуры 2, приведенной в таблице. Соответствующие кривые ВРР показаны на рис. 2. Вычисления проводились отдельно с линейным и логарифмическим (кривые 1, 2 на рис. 3 соответственно) учетом интенсивностей  $I$  в выражении для  $\chi^2$  (3). Кроме того, рассматривался дополнительный режим оптимизации с предварительным перемешиванием массива экспериментальной кривой ВРР (рис. 4). В этом режиме слагаемые по индексу  $i$  в выражении (3) добавляются в случайном порядке, что позволяет накапливать значение  $\chi^2$  в более равномерном режиме. Для случая логарифмического учета интенсивностей в (3) это приводит к дополнительному уменьшению объема вычислений (штриховая кривая и кривая 2 на рис. 3б).

Значения параметров (плотность  $\rho$ , толщина  $d$ , шероховатость  $\sigma$ , деформация  $\Delta a/a$ , фактор Дебая–Валлера  $f$ ) слоев многослойных структур 1 и 2, полученные методом глобальной оптимизации

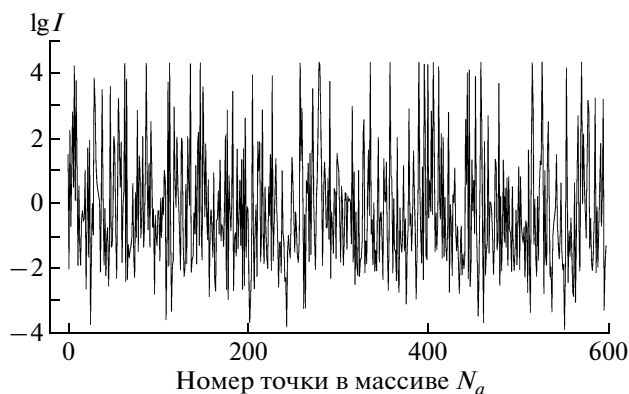
Слой	Материал	$\rho$	$d, \text{Å}$	$\sigma, \text{Å}$	$\Delta a/a, \%$	$f$
Структура 1						
1	$\text{In}_{0.56}\text{Ga}_{0.44}\text{As}$	0.792	682.8	8.6	1.395	0.953
2	$\text{In}_{0.47}\text{Al}_{0.53}\text{As}$	0.675	548.9	1.9	-3.050	0.974
3	подложка InP	1.046		5.8	0	0.870
Структура 2						
1	InAlAs	0.453	278.57	5.3		
2	InGaAs	0.612	453.11	7.19		
3	подложка InP	1.000		4		



**Рис. 3.** Зависимости  $\chi^2$  от номера итерации  $N_i$  процедуры подгонки для структуры 2 (сплошные кривые); с перемешиванием массива экспериментальной кривой (штриховые кривые); а – зависимости объема вычислений  $P$  (% от объема без оптимизации генетического алгоритма) от  $N_i$  (1, 2 – без перемешивания, точки и штриховая кривая – то же, что и для 1, 2, но с перемешиванием массива); б – 1, 2 – линейный и логарифмический учет интенсивностей в выражении для  $\chi^2$  соответственно.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в данной работе реализована оптимизация генетического алгоритма совместного решения обратной задачи методов ДРД и ВРР, приводящая к уменьшению объема вычислений. Показано, что использование совместного



**Рис. 4.** Вид перемешанной экспериментальной кривой ВРР.

решения обратной задачи по произвольному набору экспериментальных данных различных рентгеновских методов в комплексе с генетическим алгоритмом позволяет наиболее надежно определить параметры слоев даже в условиях ограниченной априорной информации о них (например, по технологии изготовления).

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы Президиума РАН “Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов” (Постановление № 21) и Ведущей научной школы (НШ-65.636.2010.2).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Goldberg D.* Genetic Algorithms: Search, Optimization and Machine Learning. Addison-Wesley, Reading, M.A. 1989. 412 p.
2. *Wormington M., Panaccione Ch., Matney K.M., Bowen D.K.* // Phil. Trans. R. Lond. A. 1999. V. 357. P. 2827.
3. *Сутырин А. Г., Прохоров Д. Ю.* // Кристаллография. 2006. Т. 51. № 4. С. 611.