

УДК 539.1.074.55

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАДАЧИ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ПРОФИЛЯ КОНЦЕНТРАЦИИ ПРИМЕСИ ПО ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКОМУ РЕНТГЕНОВСКОМУ ИЗЛУЧЕНИЮ, ВОЗБУЖДАЕМОМУ ПРОТОНАМИ

И.К. Ковальчук, В.В. Левенец, А.А. Щур, М.Ф. Кожевникова

Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»,

61108, г. Харьков, Украина, ул. Академическая, 1.

E-mail: levenets@kipt.kharkov.ua

Поступила в редакцию 21 марта 2005 г.

В работе путем численного моделирования проведен сравнительный анализ восстановления профиля концентрации примеси в образце по характеристическому рентгеновскому излучению (х.р.и.), возбуждаемому пучком протонов, методом максимального правдоподобия и методом регуляризации Тихонова. Выход рентгеновского излучения моделировался для четырех тестовых профилей примеси: постоянного, монотонно растущего, гауссовского и монотонно падающего. Восстановление профилей по вычисленному выходу рентгеновского излучения (с погрешностью и без погрешности) проводилось методом максимального правдоподобия и методом регуляризации Тихонова. Проанализировано качество восстановления обоими методами для разных уровней погрешности, а также влияние параметров численных алгоритмов (параметр регуляризации в одноименном методе и абсолютная погрешность алгоритма максимального правдоподобия) на характер восстановления профиля. Установлено, что в отсутствии погрешности в выходе рентгеновского излучения метод максимального правдоподобия позволяет надежно (с точностью до 5–6%) восстанавливать тестовый профиль. При увеличении погрешности качество восстановления ухудшается, а при уровне 8% становится практически невозможным. Численное моделирование показывает, что даже в отсутствии модельной погрешности в выходе рентгеновского излучения метод регуляризации не позволяет надежно восстанавливать тестовый профиль.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: характеристическое рентгеновское излучение, некорректные задачи, метод максимального правдоподобия, метод регуляризации, восстановление профиля примеси.

Характеристическое рентгеновское излучение, возбуждаемое заряженными частицами (ХРИ, английский вариант – PIXE) широко используется для анализа элементного состава материалов. ХРИ обладает хорошими метрологическими характеристиками и позволяет, помимо элементного состава, исследовать пространственное распределение элементов. Однако, в последнее время, все более актуальным становится проведение 3D-анализа, а возможности ХРИ для этого несколько ограничены. Существует ряд попыток определения профиля концентрации с помощью ХРИ [1-4]. В основе таких измерений лежит регистрация характеристического рентгеновского излучения под разными углами к поверхности образца, измерение отношения интенсивностей линий в мультиплете (например, K_{α}/K_{β}) измерение выхода излучения для различных энергий падающих частиц с последующим определением профиля концентрации из интегрального уравнения. С математической точки зрения этот тип задач, часто встречающийся в различных приложениях, относится к обратным. Подобные задачи присутствуют в компьютерной томографии, при восстановлении профилей различных параметров в диагностике плазмы и пучков заряженных частиц и в других областях. Во многих диагностических методах часто невозможно измерить пространственное распределение какой-либо физической величины непосредственно, поэтому измерения носят косвенный характер. При этом непосредственно измеряемая величина связана с искомой, интегральным соотношением вида:

$$I(\vec{x}) = \int_V K(\vec{x}, \vec{y}) c(\vec{y}) d\vec{y}, \quad (1)$$

где $I(\vec{x})$ – непосредственно измеряемая величина, $c(\vec{y})$ – подлежащая определению характеристика, в общем случае трехмерная, V – область по которой производится интегрирование, $K(\vec{x}, \vec{y})$ – ядро интегрального преобразования, которое определяется используемым для диагностики конкретным физическим методом.

Уравнение (1) относится к интегральным уравнениям первого рода, а сама задача его решения является некорректной. Основополагающая теория таких задач изложена в монографии [5], а методы их решения получили достаточно широкое развитие и изложены в различных монографиях и научных статьях (см., например, [5]). Не вдаваясь в детали определения понятия некорректной задачи, отметим, что характерной особенностью их решения является неустойчивость его по отношению к малой погрешности исходных данных $I(\vec{x})$ и ядра интегрального преобразования $K(\vec{x}, \vec{y})$. Обычно экспериментальные результаты известны с некоторой погрешностью. При численном решении уравнения (1) его ядро аппроксимируется с ошибкой, кроме того, оно само может быть известно приближенно. Алгоритм решения уравнения (1) сводится к замене интеграла суммами, что приводит к неоднородной системе линейных алгебраических уравнений. На практике оказывается, что решение системы не имеет ничего общего с решением задачи в плане определения искомой

физической величины. Оно чаще всего имеет сильно осциллирующий характер, что является прямым следствием неустойчивости численного решения некорректной задачи. В последние десятилетия разработано большое число численных методов решения таких задач. Некоторые из них, например, изложены в монографии [6]. Значительное место принадлежит методу регуляризации А.Н. Тихонова и методу максимального правдоподобия.

Итерационный алгоритм максимального правдоподобия (maximum likelihood algorithm) впервые предложен в [7]. Он был успешно применен в области компьютерной томографии и для восстановления изображений. Использование метода максимального правдоподобия для определения профилей концентрации примесей в образцах с помощью возбуждаемого заряженными частицами рентгеновского излучения описано в работе [8]. Авторами предложен алгоритм и представлены результаты его тестирования.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Схематически геометрия эксперимента по определению профиля концентрации примеси в образце методом ХРИ приведена на рис.1.

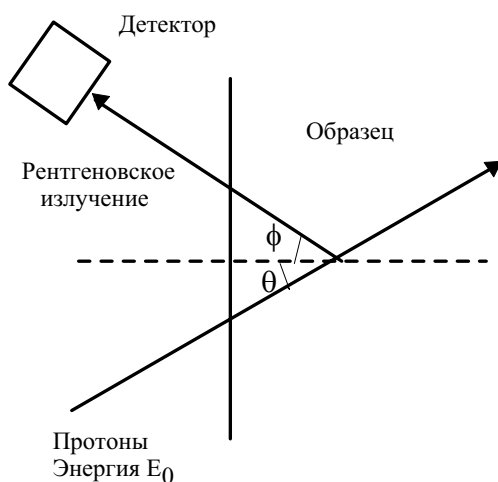


Рис.1. Геометрия эксперимента при определении профиля примеси методом ХРИ

Пучок протонов с энергией E_0 падает на исследуемый образец под углом θ к нормали. Рентгеновское излучение, возникающее при взаимодействии протонов с атомами примеси, регистрируется под углом φ к нормали. Интегральное уравнение, описывающее указанный процесс, согласно [8] имеет вид:

$$Y(E_0, \theta, \varphi) = \frac{\eta N_p \Omega}{4\pi} \int_0^{R \cos \theta} c(x) \sigma(E(x)) \exp(-\mu x / \cos \varphi) dx, \quad (2)$$

где N_p – количество упавших на мишень протонов, η – собственная эффективность детектора по отношению к регистрируемым квантам, Ω – телесный угол детектора, $c(x)$ – концентрация примеси как функция глубины x , $\sigma(E(x))$ – сечение возбуждения характеристического рентгеновского излучения протонами с энергией E , μ – коэффициент поглощения рентгеновского излучения в исследуемом образце, R – пробег протонов с начальной энергией E_0 в исследуемом образце. Сечение возбуждения х.р.и. монотонно возрастает с энергией протонов приблизительно по степенному закону ($\sigma \sim E^{3,5-4,5}$) до энергий в несколько десятков МэВ. Величина пробега протонов в веществе мишени зависит от их энергии. Варьируя энергию пучка при фиксированных углах θ и φ , можно получить набор экспериментальных данных для определения концентрации профиля примеси $c(x)$ в исследуемом образце до глубины, определяемой пробегом протонов с максимальной энергией.

Дискретизация уравнения (2) приводит к системе линейных алгебраических уравнений:

$$Y_i = \sum_j A_{ij} c_j, \quad (3)$$

где $Y_i = Y(E_{0i}, \theta, \varphi)$, $A_{ij} = \frac{\eta N_p \Omega}{4\pi} \int_{x_{j-1}}^{x_j} \sigma(E(x)) \exp(-\mu x / \cos \varphi) dx$.

Матричный элемент A_{ij} определяется экспериментальными условиями и составом исследуемого образца. При малой концентрации примеси ее влиянием на тормозные потери протонов и поглощение рентгеновского излучения в образце можно пренебречь. В этом случае интегральное уравнение (2) является линейным, а матричные элементы A_{ij} не зависят от c_j .

Во многих случаях матрица A_{ij} является плохо обусловленной, что приводит к неустойчивости получаемого решения. Предлагаемый в [8] итерационный алгоритм максимального правдоподобия, по утверждению авторов, свободен от этого недостатка. При этом предполагается, что Y_i и слагаемые $X_{ij}=A_{ij}c_j$ являются случайными пуассоновскими величинами, для которых приводится выражение распределения вероятностей значений X_{ij} в зависимости от c_j . В качестве решения берется такая совокупность c_j , которой соответствует максимальная плотность вероятности для множества значений X_{ij} при условиях $Y_i = \sum_j X_{ij}$. Вычислительный алгоритм задается следующей итерационной формулой:

$$c_j^{(n+1)} = \frac{c_j^{(n)}}{\sum_k A_{kj}} \sum_i A_{ij} \left(\frac{Y_i}{\sum_k A_{ik} c_k^{(n)}} \right). \quad (4)$$

Начальное приближение задается константой, определяемой из условия:

$$c_j^{(0)} = \frac{1}{i_{\max}} \sum_i \left(Y_i / \sum_k A_{ik} \right). \quad (5)$$

В статье [8] приведены результаты тестирования алгоритма максимального правдоподобия для трех различных профилей распределения примеси в образце: гауссовское распределение, монотонно-падающее и монотонно-растущее. Выход рентгеновского излучения, к которому добавлялся пуассоновский шум, вычислялся по формуле (2). Результаты восстановления профилей хорошо согласуются с полученными авторами тестовыми распределениями.

Целью настоящей работы была проверка возможности восстановления профилей концентрации по спектрам характеристического рентгеновского излучения, возбуждаемого пучком протонов с различными значениями энергии, при использовании метода максимального правдоподобия и метода регуляризации Тихонова, изучение влияния величин погрешностей измерения выходов х.р.и на ошибки в значениях восстановленных концентраций.

ИТЕРАЦИОННЫЙ АЛГОРИТМ МАКСИМАЛЬНОГО ПРАВДОПОДОБИЯ

Мы провели тестирование алгоритма максимального правдоподобия для данных идентичных тем, что использовались в [8]. Рассматривался образец из кремния с примесью фосфора. Диапазон энергий пучка протонов составлял 0,6...2,0 МэВ. Максимальная глубина проникновения пучка разбивалась на пятнадцать слоев. Кроме трех профилей, рассмотренных в [8], использовался также профиль с постоянным распределением примеси. К расчетным значениям выхода рентгеновского излучения также был добавлен шум, но в отличие от [8] он был гауссовским с нулевым средним значением и разной дисперсией. Ее относительные значения (ΔY_r) составляли 0,0; 0,001, 0,003; 0,01; 0,03 и 0,08 для каждого профиля. Для остановки алгоритма используется один из его параметров, абсолютная погрешность вычисления плотности примеси $\delta_{alg} = \max_j |c_j^{(n)} - c_j^{(n+1)}|$, которая представляет собой максимальное значение модуля разности концентраций, полученных для соседних итераций. При тестировании алгоритма исследовалась зависимость восстанавливаемых профилей концентраций от абсолютной погрешности алгоритма. Плотность исследуемого образца составляла $5,0 \cdot 10^{22}$ атомов в см^3 . Максимальная концентрация примеси \bar{c}_{\max} для всех профилей принята равной 3% (атомные проценты) от полной плотности кремния. На представленных далее графиках приводится относительное значение погрешности $\delta_{rel} = \delta_{alg} / \bar{c}_{\max}$. Вычисление элементов матрицы A_{ij} проводилось методом трапеций, интервал интегрирования разбивался на десять подинтервалов. Для определения A_{ij} использовали данные о сечениях ионизации К-оболочки протонами из [9]; сечения поглощения рентгеновского излучения в веществе, определялись с помощью программы XCOM [10]; для вычисления тормозных потерь и пробегах протонов использовали программу SRIM-2003.26.

Характерный вид восстановленных профилей при отсутствии погрешности в аналоге экспериментальных результатов $(\Delta Y_r = 0)$ приведен на рис.2 а,б,в,г. На этих и последующих рисунках тестовая функция представлена тонкой линией, а восстановленный профиль – жирной. По вертикальной оси отложена массовая концентрация примеси в процентах, по горизонтали – глубина анализируемого слоя в микронах. Для количественной оценки восстановления профиля введем критерий $\delta_{test} = \max_j |c_j - c_{test}(x_j)| / \bar{c}_{\max}$, где $c_{test}(x_j)$ – значение тестовой функции на глубине x_j .

Как видно из приведенных рисунков, метод наибольшего правдоподобия позволяет хорошо восстанавливать профили распределения примеси в исследуемом образце в отсутствии погрешности выхода рентгеновского излучения. Для постоянного распределения $\delta_{test} \sim 0,003$; гауссовского $\delta_{test} \sim 0,04$; растущего $\delta_{test} \sim 0,066$ и падающего $\delta_{test} \sim 0,02$. Абсолютная погрешность алгоритма δ_{alg} , при которой останавливалась его работа, была значительно меньше характерных значений плотности примеси.

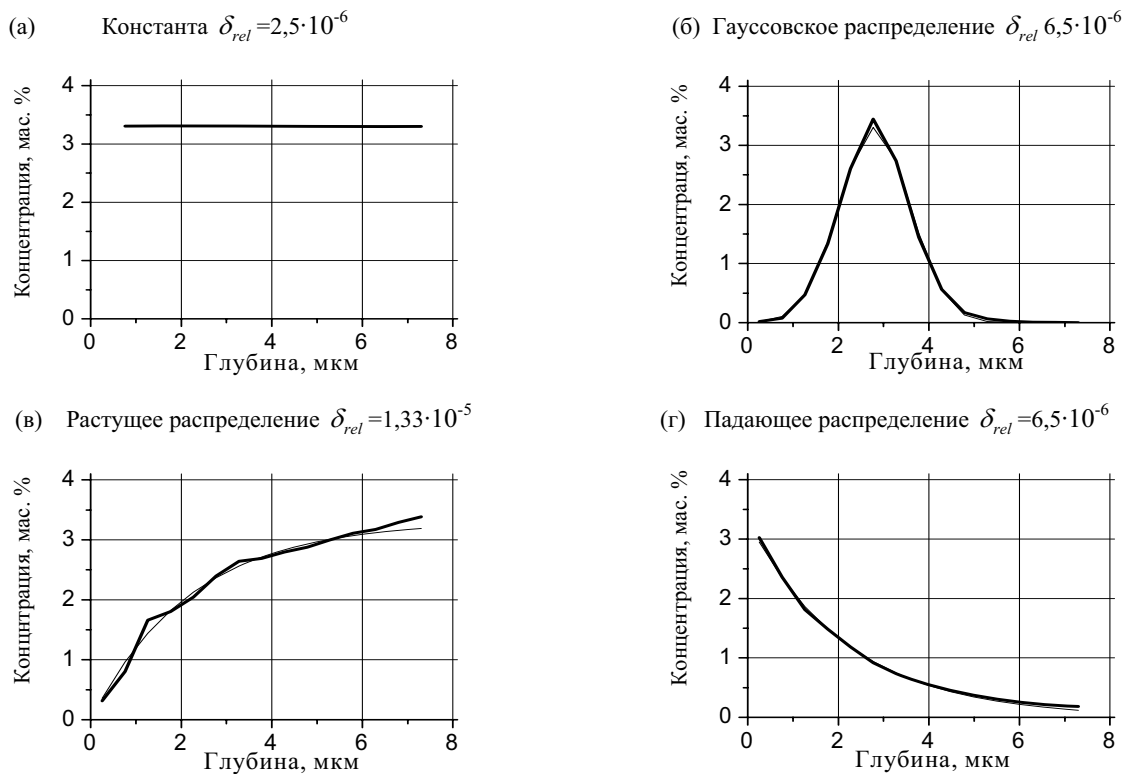


Рис.2. Характерный вид профилей, восстановленных методом максимального правдоподобия, при отсутствии погрешности в величине выхода рентгеновского излучения. — Восстановленный профиль, — тест.

Тестирование показывает, что уменьшение абсолютной погрешности алгоритма Δ_{alg} , которое, на первый взгляд, должно давать более качественное восстановлению профиля, может приводить к противоположному результату, решение становится осциллирующим и неустойчивым. При моделировании с достаточно высокой точностью это наблюдается на глубине более 2 – 3 мкм (что соответствует 30–40% максимальной глубины проникновения пучка), как видно на рис.3а ($\delta_{test} = 0,13$), на 3б ($\delta_{test} = 0,73$) для монотонно возрастающего профиля и 3г ($\delta_{test} = 0,056$), 3д ($\delta_{test} = 0,16$) для монотонно спадающего. Но с другой стороны из рис. 2в и 2г, а также рис. 3 следует, что с уменьшением δ_{alg} улучшается восстановление профиля на глубинах до 2 мкм и $\delta_{test} \sim 0,02-0,03$.

Что касается гауссовского профиля, то вплоть до $\delta_{rel} = 7 \cdot 10^{-11}$ результат его восстановления практически не отличается от того, который представлен на рис.2б. Из рис.3 видно, что с уменьшением погрешности алгоритма максимального правдоподобия, восстановленный профиль перестает быть гладким, на нем появляются осцилляции и решение становится неустойчивым. На эту особенность алгоритма в работе [8] не указано. Вопрос о том, наблюдали ли ее авторы, остается открытым, они только отмечают устойчивость алгоритма. Как указывается в [5], численная неустойчивость является характерной особенностью некорректных задач, и ее преодоление достигается с помощью специальных регуляризирующих алгоритмов, в которых используется численный параметр, называемый параметром регуляризации. Там же предлагается правило выбора параметра регуляризации. Далее эти вопросы будут рассмотрены подробнее. Что касается метода максимального правдоподобия, то предварительный анализ показывает, что при параметрах алгоритма, соответствующих рис. 2, когда достигались наименьшие значения δ_{test} , используемая в [8] функция правдоподобия не достигает максимума и продолжает расти. Это указывает на то, что используемое для нее приближенное выражение, а также сам алгоритм нуждаются в уточнении.

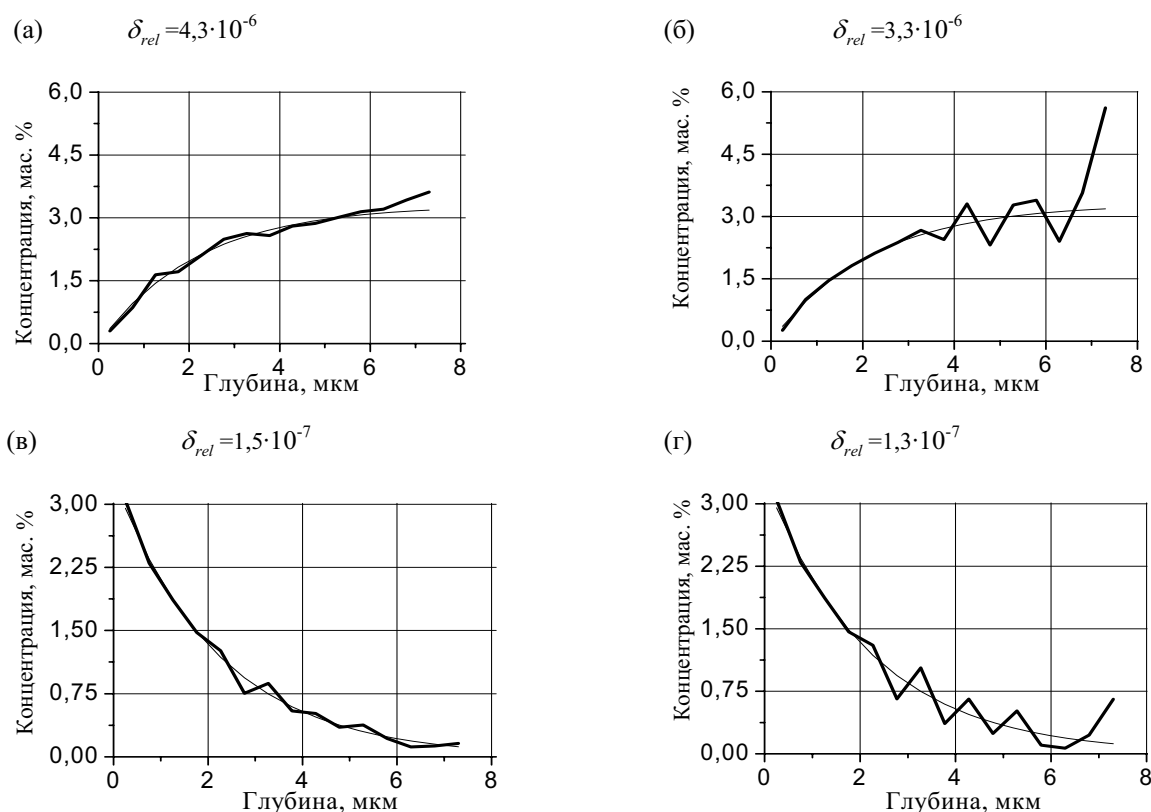


Рис.3. Влияние погрешности алгоритма максимального правдоподобия на восстановление возрастающего и спадающего профилей. — Восстановленный профиль, — тест

При численном моделировании с имитацией погрешности выхода рентгеновского излучения оказывается, что для каждого из упомянутых уровней средней погрешности моделирования выходов существует оптимальная абсолютная погрешность метода максимального правдоподобия, при которой восстановленный профиль наиболее близок к исходному. Критерием здесь может служить гладкость полученного решения. Более строгим критерием может быть тот, который используется в методе регуляризации (подобный методу невязки), однако он нуждается в строгом математическом обосновании. Рис. 4 и 5 демонстрируют влияние погрешности алгоритма максимального правдоподобия на восстановление профиля в зависимости от погрешности имитации выхода рентгеновского излучения. На рис.4 приведены результаты численного моделирования для имитации выхода рентгеновского излучения с дисперсией равной 0,1%, а на рис.5 – 1%. Значение критерия качества восстановления для рис. 4 а, б, в, г составляет соответственно $\delta_{test} = 6 \cdot 10^{-4}$; $6 \cdot 10^{-4}$; $9 \cdot 10^{-4}$; 0,15; а для рис. 5 а, б, в, г $\delta_{test} = 0,01$; 0,55; 0,7; 0,85.

Восстановленный постоянный профиль на рис. 4 остается близким к тестовому в широком диапазоне параметра δ_{alg} , однако при $\delta_{alg} = 5,0 \cdot 10^{-17}$ (что соответствует $\delta_{rel} = 3,33 \cdot 10^{-4}$) он уже существенно отличается от тестового. Как следует из рис.4, постоянное распределение примеси достаточно хорошо восстанавливается в широком диапазоне погрешностей алгоритма (с относительной ошибкой менее 0,001) для дисперсии ошибки выхода рентгеновского излучения равной 0,1%. Но из рис.5 видно, что при средней квадратичной ошибке в выходе регистрируемого рентгеновского излучения равной 1% качество восстановления заметно ухудшается, и при значениях δ_{rel} близких к тем, что использованы для случая рис. 4 достигают десятков процентов. В качестве оптимального восстановленного профиля, наиболее близкого к тестовому можно рассматривать приведенный на рис.5а, соответствующий $\delta_{rel} 1,33 \cdot 10^{-2}$.

Таким образом, с увеличением погрешности выхода рентгеновского излучения оптимальное значение абсолютной погрешности алгоритма δ_{alg} возрастает, кроме того, ухудшается качество восстановления. Интерес, в данном случае, представляет сравнение алгоритма максимального правдоподобия с методом регуляризации Тихонова, результаты моделирования для которого приведены в следующем разделе. Подобные закономерности наблюдаются и для других профилей.

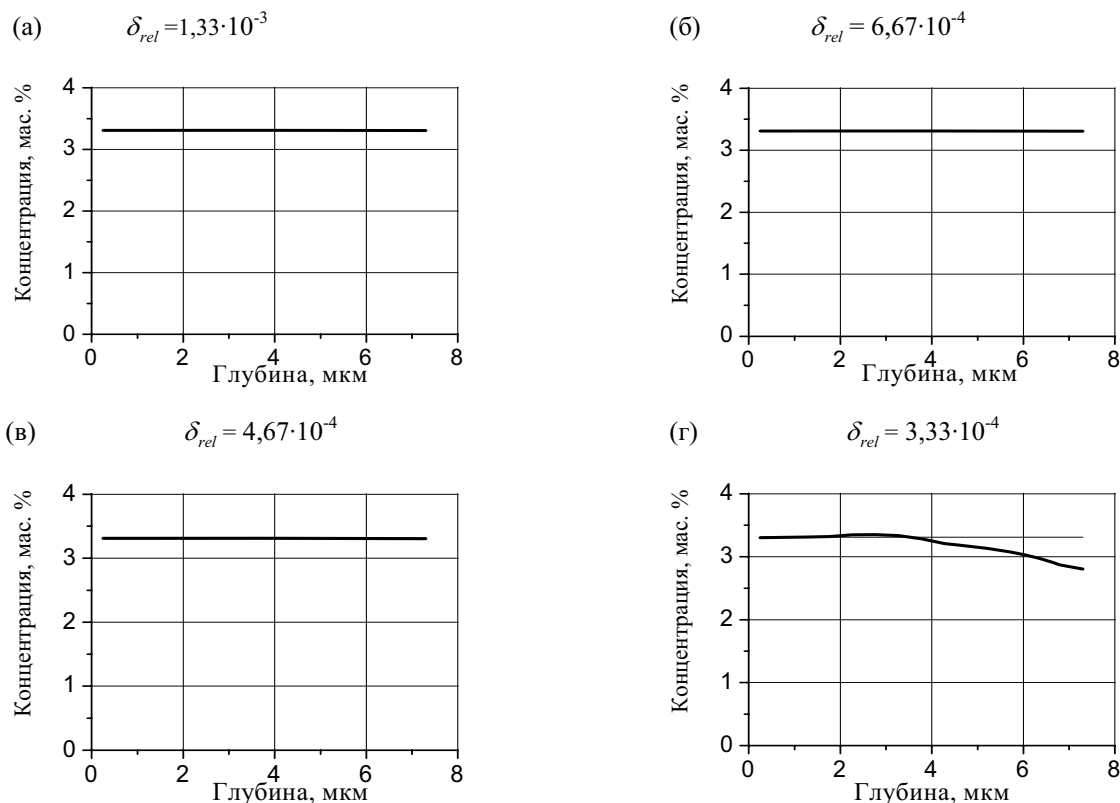


Рис.4. Восстановление постоянного профиля методом максимального правдоподобия для выхода рентгеновского излучения со среднеквадратичной погрешностью 0,1%. — Восстановленный профиль, — тест

В меньшей степени влияние погрешностей определения выхода рентгеновского излучения проявлялось для гауссовского и спадающего профилей, в большей – для возрастающего. Наилучшее совпадение восстановленных профилей с тестовыми наблюдается на глубинах до 2–3 мкм с относительной ошибкой в несколько процентов, поэтому возрастающий профиль восстанавливается хуже. Это объясняется уменьшением вклада в общий поток рентгеновского излучения из глубоких слоев вследствие уменьшения сечения его возбуждения и поглощения в образце. При среднеквадратичной ошибке выхода рентгеновского излучения 8% восстановление профиля оказывалось проблематичным.

МЕТОД РЕГУЛЯРИЗАЦИИ ТИХОНОВА

В [5] подробно изложены математические основы понятия «некорректные задачи математической физики». В общем случае они могут быть представлены в виде операторного уравнения

$$Az = u, \quad (6)$$

где A – оператор, выражающий физическую сущность проблемы, z – функция, подлежащая определению, u – экспериментально измеряемая величина. Во многих случаях оператор A является линейным. Формально решение может быть представлено в виде:

$$z = A^{-1}u, \quad (7)$$

где A^{-1} – оператор, обратный оператору A . Обычно при реализации численных алгоритмов для (6) приходится сталкиваться с тем, что решение является неустойчивым, т.е. сколь угодно малые изменения исходных данных приводят к большим изменениям решения z . Это обусловлено тем, что во многих случаях оператор A^{-1} не является непрерывным, и выражение (7) нельзя брать в качестве решения задачи. Для конкретной правой части u уравнения (6), которая является экспериментально определяемой с некоторой погрешностью величиной, решение может не существовать, т.е. нет взаимно однозначного соответствия между множеством элементов z и множеством элементов u . На практике приходится сталкиваться с тем, что пространство элементов Az является лишь подпространством всех возможных u . В этом случае привычное понятие «решение задачи (6)» теряет смысл.

При численном решении уравнения (6) возникает вопрос: что понимать под приближенным решением задачи (6)? Этому вопросу уделено большое внимание в [5]. Для практического использования достаточно ограничиться тем, что численные алгоритмы решения задачи (6) должны быть устойчивыми к малым изменениям в исходных данных u , а погрешность решения z должна стремиться к нулю в том случае, когда уменьшаются ошибки экспериментальных измерений. Для численного решения уравнений типа (6) в [5]

разработан специальный подход – метод регуляризации. Ему посвящено большое число статей и монографий, к которым, в частности, можно отнести [11–13] и цитированные в них источники.

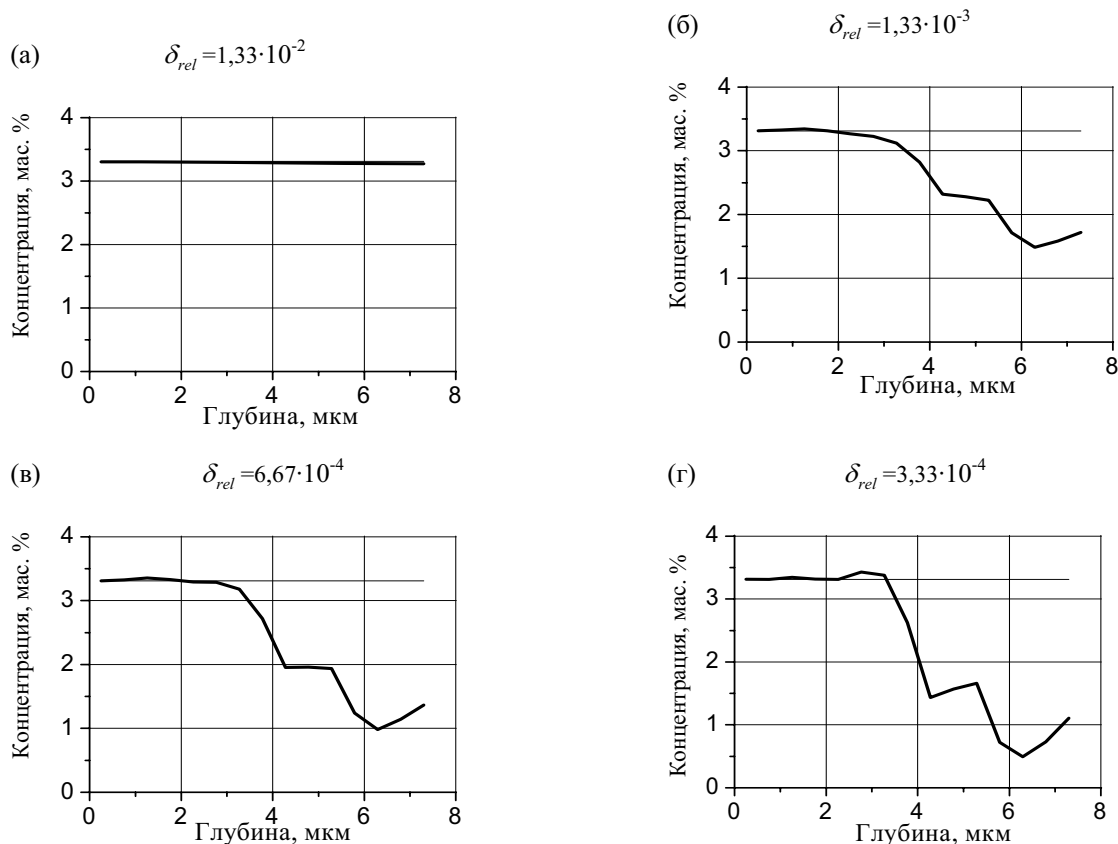


Рис.5. Восстановление постоянного профиля методом максимального правдоподобия для выхода рентгеновского излучения со среднеквадратичной погрешностью 1%. — Восстановленный профиль, — тест

Основная идея метода регуляризации заключается в наложении дополнительных условий на z . Для этого может быть использована какая-либо априорная информация о решении задачи. В [11] приведены алгоритмы решения задач типа (1) или (6) на специальных множествах функций: монотонных или выпуклых. В более универсальном подходе в [5] на решение накладывается требование, чтобы оно минимизировало некоторый дополнительный функционал, называемый стабилизирующим. На практике это сводится к замене уравнения (6) другим, которое имеет вид:

$$A^*Az_\alpha + \alpha z_\alpha = A^*u, \quad (8)$$

где A^* – оператор сопряженный A , α – параметр метода называемый параметром регуляризации, который обычно является малым и должен быть выбран подходящим образом. Вопросу выбора параметра регуляризации также уделяется большое внимание в литературе. В одном из методов – выборе α по невязке, α определяется из условия

$$\|Az_\alpha - u_\delta\| = \delta, \quad (9)$$

где u_δ – приближенно известная правая часть уравнения (6), δ – погрешность u_δ , $\|f, g\| = \left\{ \int_a^b [f(x) - g(x)]^2 dx \right\}^{1/2}$ –

норма в пространстве функций u . В этом случае предполагается, что A известно точно. На практике A также задается с некоторой погрешностью. И если оценку для δ получить несложно, то определение погрешности A представляет сложную и громоздкую математическую задачу.

Метод регуляризации Тихонова был также использован нами при решении задачи о восстановлении профиля примеси в образце методом ХРИ. Операторное уравнение (8) при этом сводится к системе линейных алгебраических уравнений, для решения которой использован метод Гаусса. На рис.6 представлены результаты восстановления профиля методом регуляризации Тихонова для тех же четырех профилей, что и для метода максимального правдоподобия, без имитации погрешности выхода рентгеновского излучения. Параметр

регуляризации для каждого из профилей выбирался так, чтобы последний был максимально близким к тестовому в как можно более широком диапазоне глубин. Значение параметра δ_{test} для рис. 6 а,б,в,г составляло 0,79; 0,023; 0,67; 0,036. Максимальное значение δ_{test} для профилей с аналогичным выходом рентгеновского излучения, полученных методом максимального правдоподобия составляло 0,066 для растущего профиля. Сравнение обоих методов показывает, что при имитации выхода рентгеновского излучения без погрешности для постоянного, монотонно возрастающего и монотонно спадающего распределений, метод максимального правдоподобия дает (рис.2) более качественный результат по сравнению с методом регуляризации (рис.6). Следует отметить, что для рассмотренного случая метод регуляризации позволил достаточно достоверно восстановить тестовые профили на глубинах меньших 5–6 мкм с максимальной относительной ошибкой δ_{test} не более 5%. Это соответствует примерно 80% максимальной глубины, на которую распространялся пучок. На рис.7 продемонстрировано влияние параметра регуляризации при восстановлении монотонно растущего профиля методом регуляризации. Как видно из рис.7 в,г, уменьшение параметра регуляризации, приводит к тому, что решение становится неустойчивым. Значение параметра δ_{test} для рис. 7 а,б,в,г составляет 0,85; 0,76; 0,65 и 0,41 соответственно. С уменьшением параметра регуляризации максимальная относительная погрешность восстановления растущего профиля для исходных данных без имитации погрешности уменьшается, однако, при этом появляются осцилляции на глубинах менее 5–6 мкм. Так на рис. 7 б при значении параметра регуляризации $1 \cdot 10^{-36}$ $\delta_{test}=0,026$ для этой области глубин; то при значении параметра регуляризации $1 \cdot 10^{-37}$ (рис. 7г) $\delta_{test}=0,17$, в то время как для метода максимального правдоподобия при аналогичных исходных данных на всей глубине распространения пучка $\delta_{test}=0,066$.

На рис.8 приведены результаты восстановления постоянного профиля примеси в случае, когда выход рентгеновского излучения моделируется со среднеквадратичной погрешностью 0,1%, а на рис.9 – с погрешностью 1%. Для рисунков 8 а,б,в,г $\delta_{test}=0,94$; 0,89; 0,82 и 0,83 соответственно. Аналогично для рис. 9 имеем $\delta_{test}=0,99$; 0,98; 0,99; 1,65. С уменьшением параметра регуляризации решение становится неустойчивым. При среднеквадратичной погрешности выхода рентгеновского излучения всего лишь в 1%, восстановить профиль методом регуляризации адекватно тестовому профилю оказывается невозможным. Тогда как методом максимального правдоподобия это удается сделать с точностью до 7–20% в зависимости от глубины и вида профиля.

СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ПРОФИЛЯ ПРИМЕСИ МЕТОДОМ ТИХОНОВА И МЕТОДОМ МАКСИМАЛЬНОГО ПРАВДОПОДОБИЯ

В изложенных методах решения некорректных задач обязательно присутствует некоторый параметр самого алгоритма. Для метода Тихонова – это параметр регуляризации, для метода максимального правдоподобия – это абсолютная погрешность самого метода. Казалось бы, чем меньше значения этих величин, тем ближе должен быть численный результат к точному решению. При неизбежных погрешностях в исходных данных и равенстве этих параметров нулю, полученное решение становится неустойчивым. Это наблюдалось и при тестировании метода максимального правдоподобия. Как только абсолютная погрешность алгоритма становилась меньше некоторого значения, решение теряло гладкость, становилось неустойчивым. С увеличением параметра регуляризации и абсолютной погрешности метода максимального правдоподобия (напомним, что он является итерационным) результат становится более гладким, но при этом он «удаляется» от истинного решения. Возникает вопрос о выборе параметра регуляризации и абсолютной погрешности метода максимального правдоподобия. В [5,11] для выбора параметра α предлагается метод невязки, определяемый условием (9). Это простейший его вариант, не учитывающий погрешности оператора A .

В работе [8], где излагается метод максимального правдоподобия применительно к ХРИ, вопрос о погрешности решения и критериях останова не обсуждается. Более того, он не подвергнут такому подробному математическому исследованию, как метод регуляризации или другие методы, изложенные в [6]. Определение оценок погрешности самой задачи, в частности, погрешность оператора A обсуждается в [6], этому также посвящена статья [12]. Численная реализация алгоритмов оценки погрешности A требует привлечения аппарата функционального анализа. В практических целях критерием останова может служить гладкость решения, а саму погрешность можно оценить исходя из численного моделирования для подходящих профилей при соответствующем уровне погрешности.

Более детальное численное моделирование показало, что те профили, которые представлены на рис. 2 не удовлетворяют тому приближенному критерию отбора, который используется в работе [8], хотя визуально они воспринимаются как наиболее близкие к тестовым. Таковым критерием в [8] является достижение максимума функцией правдоподобия.

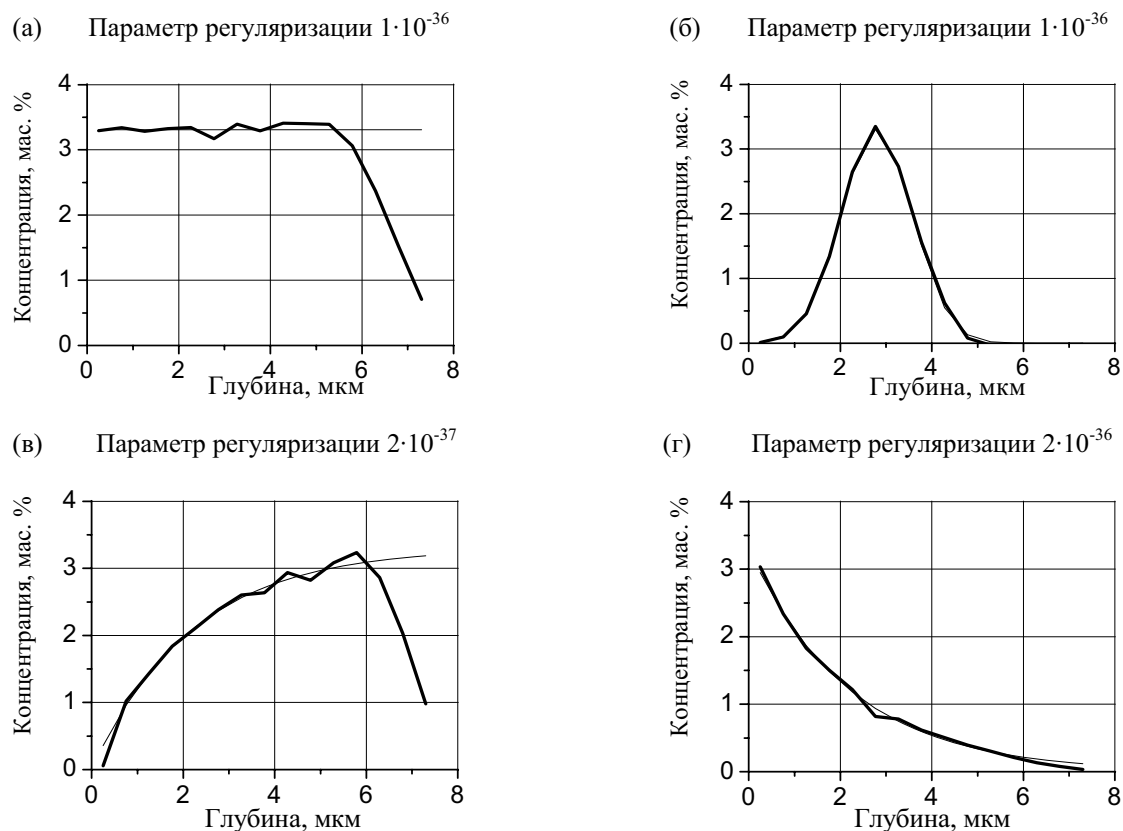


Рис.6. Характерный вид восстановленных профилей методом регуляризации при отсутствии погрешности определения выхода рентгеновского излучения. — Восстановленный профиль, — тест

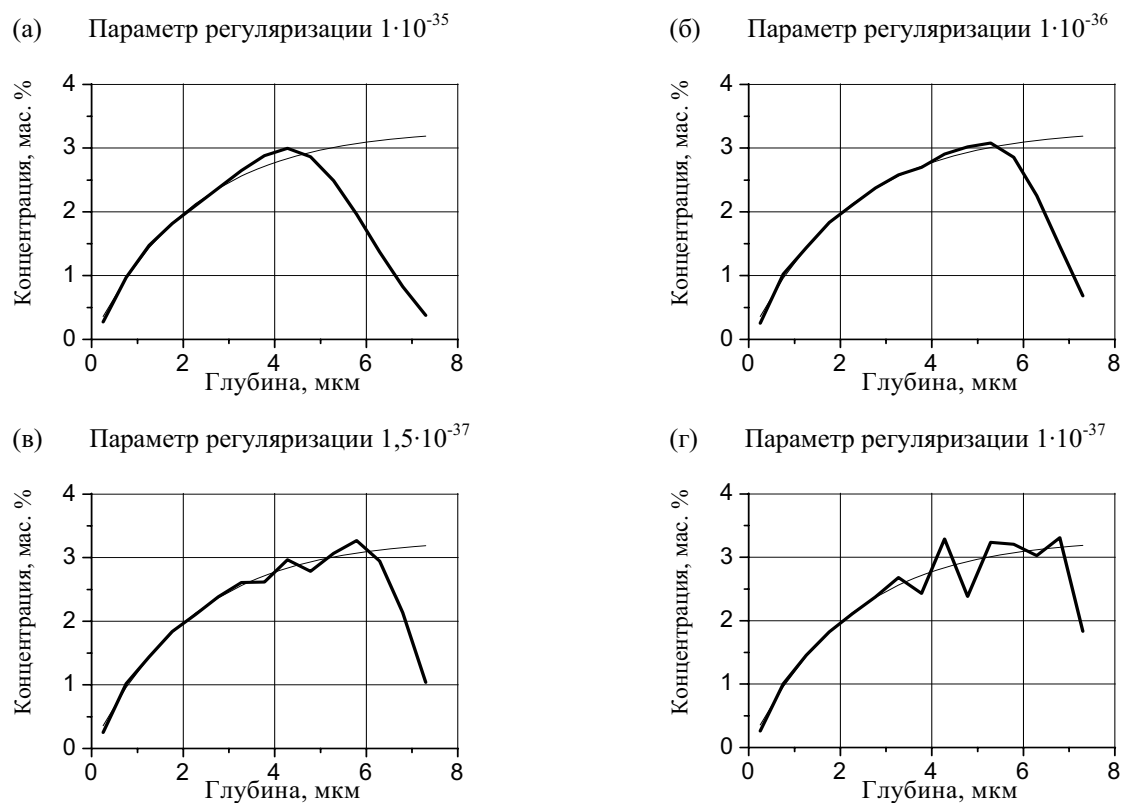


Рис.7. Влияние параметра регуляризации на восстановление растущего профиля. — Восстановленный профиль, — тест

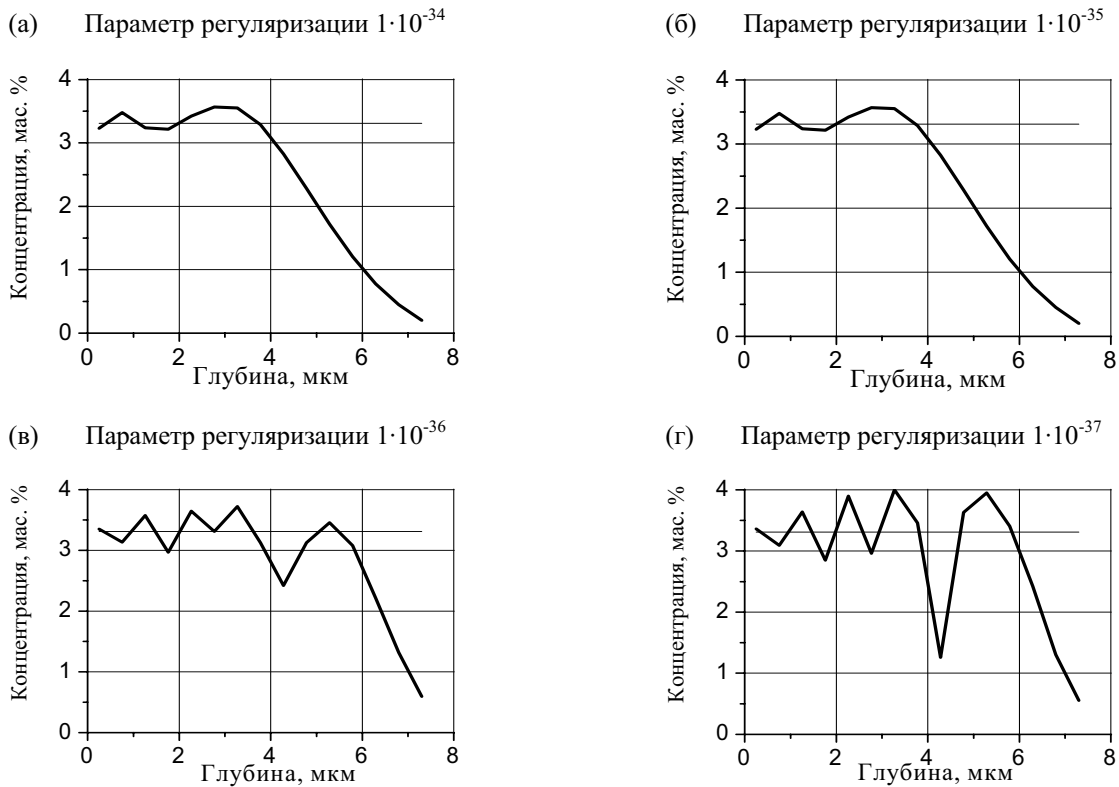


Рис.8. Восстановление постоянного профиля методом регуляризации для выхода рентгеновского излучения заданного со среднеквадратичной погрешностью 0,1%. — Восстановленный профиль, — тест.

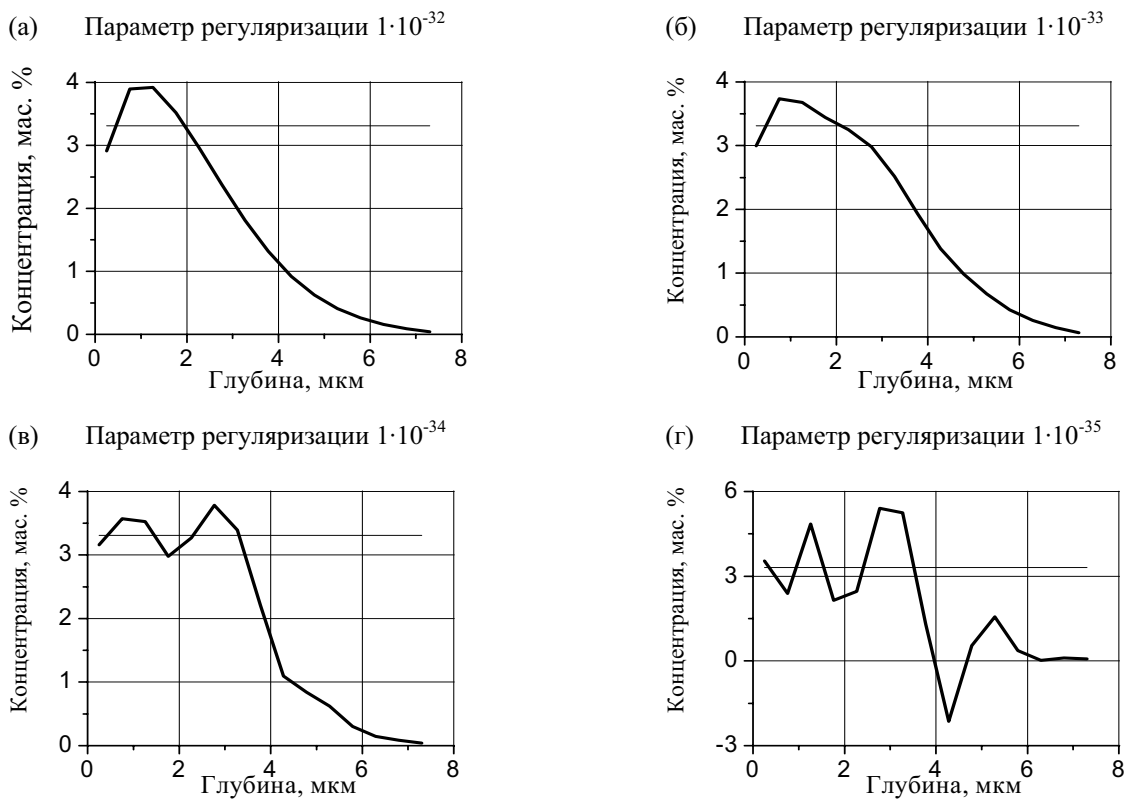


Рис.9. Восстановление постоянного профиля методом регуляризации для выхода рентгеновского излучения, заданного с погрешностью 1%. — Восстановленный профиль, — тест

По мнению авторов, тот алгоритм нахождения максимума, который предложен в [8] требует некоторой доработки, а также требует уточнения само выражение для функции правдоподобия, на основании которого строится алгоритм. Предварительное численное моделирование с уточненной авторами функцией правдоподобия (которое по мнению авторов является более адекватным) показывает, что при условиях, соответствующих рис. 2 максимум функции правдоподобия еще не достигается и при дальнейшем уменьшении δ_{alg} функция правдоподобия (используемая авторами) продолжает еще возрастать. Тем не менее, предложенный в [8] алгоритм является очень простым и позволяет надежно численно отыскивать решение уравнения (2) (с точностью до нескольких процентов) при отсутствии погрешности правой части.

В монографии [5] рассматривается возможность использования итерационных методов для решения некорректных задач. Чтобы приближенное решение было устойчивым к малым изменениям исходных данных, там предлагается выбирать номер итерации, согласованный с погрешностью правой части уравнения (2). Это позволяет рассматривать метод максимального правдоподобия как один из вариантов метода регуляризации, хотя он отличается от того, который описан в третьем разделе, когда задача сводится к системе линейных алгебраических уравнений, решаемой одним из прямых методов.

В [5,11] отмечается особая роль априорной информации о решении, которая используется при построении регуляризирующих алгоритмов. В частности, в [11] рассматриваются алгоритмы для монотонных и выпуклых функций. Идея метода максимального правдоподобия также использует некоторую априорную информацию, а именно то, что регистрируемое рентгеновское излучение является случайной пуассоновской величиной. Кроме того, предполагается, что такими же случайными величинами являются $A_{ij}c_j$. Сам алгоритм основывается на том, что отыскиваются такие c_i , которые обеспечивают максимальную плотность вероятности для множества случайных величин $A_{ij}c_j$ при условиях $Y_i = \sum_j A_{ij}c_j$. Регуляризирующие алгоритмы, рассмотренные в [5]

основаны на некотором принципе отбора решений, из всего множества возможных выбираются те, которые обеспечивают заданную погрешность исходных данных. А среди последних те, которые минимизируют стабилизирующий функционал. В методе максимального правдоподобия также отыскивается решение, при котором достигается максимума вышеупомянутая плотность вероятности. По-видимому, его также можно считать регуляризирующим, хотя он основан на других принципах.

ВЫВОДЫ

Проведено численное моделирование восстановления четырех видов профилей примеси в исследуемом образце с помощью характеристического рентгеновского излучения, возбуждаемого заряженными частицами. Восстановление профилей проводилось как методом максимального правдоподобия, так и методом регуляризации Тихонова. Выход рентгеновского излучения из исследуемого образца моделировался как без погрешности, так и с ошибкой, имеющей гауссовское распределение с нулевым средним значением и относительными значениями дисперсии равными 0,1%, 0,3%, 1%, 3% и 8%. Проанализировано качество восстановления профилей обоими методами для указанных уровней погрешности выхода рентгеновского излучения. Показано, что в отсутствие погрешности метод максимального правдоподобия позволяет надежно (в пределах 6%) восстановить тестовый профиль примеси в образце. Проанализировано влияние параметров обоих численных методов: абсолютной погрешности метода максимального правдоподобия и параметра регуляризации на характер восстановления. Установлено, что для метода максимального правдоподобия может существовать оптимальное значение абсолютной погрешности алгоритма δ_{alg} , при которой восстановленный профиль наиболее близок к тестовому. С увеличением погрешности правой части значение δ_{alg} возрастает. Показано, что с увеличением погрешности выхода рентгеновского излучения качество восстановления ухудшается. При погрешности правой части 0,1% различные виды профилей восстанавливались с максимальной ошибкой 2–5% в зависимости от глубины и вида профиля. При погрешности исходных данных 1% максимальная ошибка возрастает до 7–20%. При этом наилучшее качество восстановления (с точностью порядка 2–3%) наблюдается на небольших глубинах, составляющих 35–40% от глубины на которую распространяется протонный пучок с максимальной энергией. При относительной среднеквадратичной погрешности 8% восстановление всех четырех профилей методом максимального правдоподобия оказалось невозможным. Получить достоверное восстановление профиля примеси методом регуляризации не удастся даже при среднеквадратичной погрешности выхода рентгеновского излучения равной 1% (см. рис.9). Максимальное значение погрешности в этом случае превышает 90%. Для небольших глубин (2–3 мкм) возможно восстановление с точностью порядка 10%. Эта закономерность проявлялась для всех упомянутых распределений примеси. При исследовании результатов восстановления профиля, полученных методом максимального правдоподобия, оказалось, что с уменьшением погрешности в выходе рентгеновского излучения, уменьшается погрешность алгоритма, при которой решение является достаточно гладким и близким к тестовому профилю. Таким образом, результаты численного моделирования показывают, что метод максимального правдоподобия позволяет более надежно восстанавливать профиль примеси в исследуемом

образце, основываясь на экспериментальных результатах, полученных с помощью ХРИ, по сравнению с методом регуляризации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ahlberg M. Simple depth profile determination by proton-induced X-ray emission // Nucl. Instr. Meth.-1975.-V.131.-P.381-384.
2. Vegh J., Berenyi D., Koltay E. et al. Concentration profile determination by PIXE analysis utilizing the variation of beam energy // Nucl. Instr. Meth. -1978. -V.153. -P.553-555.
3. Frontier J-P., Regnier P., Brilliard L. et al. A test of depth profiling techniques using PIXE // Nucl. Instr. Meth. -1985. - V.B14. - P.348-352.
4. Zhengming L. A new method for determining the depth profile of trace elements by PIXE // J.Phys.D: Appl.Phys. -1990. - V.23. - P.184-191.
5. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. - М.: Наука, 1986. -285 с.
6. Натерпер Ф. Математические аспекты компьютерной томографии. - М.: Мир, 1990. -279 с.
7. Dempster A.P., Laird N.M. and Rubin D.B. Maximum likelihood from incomplete data via the EM algorithm // Journal of the Royal Statistical.-1977. - V.39. - P.1-38.
8. Liew S.C., Loh K.K., Tang S.M. Application of an iterative maximum-likelihood algorithm in PIXE depth profiling of trace elements // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res.-1994.-V.B85.-P.621-626.
9. Paul H. and Sacher J. Fitted Empirical Reference Cross Sections for K-Shell Ionization by Protons // At. Data and Nucl. Data Tabl.-1989.-V.42.-P.105-110.
10. Berger M.J. and Hubbell J.H. XCOM: Photon Cross Sections on a Personal Computer, NIST-87 –3597. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD, USA, 1987.
11. Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г. Регуляризирующие алгоритмы и априорная информация. - М.: Наука, 1983. -183 с.
12. Сизиков В.С. О способах невязки при решении некорректных задач // Журн. выч. мат. и мат. физ.-2003. - Т.43. - №9. - С.1294-1312.
13. Морозов В.А. Регулярные методы решения некорректно поставленных задач. - М.: Наука, 1987.-239 с.

NUMERICAL SIMULATIONS OF RECONSTRUCTION PROBLEM POINTED AT PROFILE OF IMPURITY CONCENTRATION USING PIXE

I.K. Kovalchuk, V.V. Levenets, A.O. Shchur, M.P. Kozhevnikova

National Science Center "Kharkov Institute of Physics and Technology"

61108, Academicheskaya str., 1, Kharkiv, Ukraine

E-mail:levenets@kipt.kharkov.ua

The reconstruction algorithms of concentration profiles using measurements of characteristic X-ray emission yields induced by protons in thick targets at various energies of protons are considered in work. Four kinds of profiles are considered: increasing, subsiding, permanent and Gaussian. Reconstruction of profiles was made by method of maximum likelihood and a method of regularization by Tikhonov. The yields of X-ray emission from a sample were modeled without error, and with an error having Gaussian distribution. The quality of restoration of profiles by both methods for preset levels of X-ray emission yield error and influence of maximum likelihood method error and parameter of regularization by Tikhonov on character of restoration was estimated. It was established, that in absence of error at definition of an X-ray emission yield the method of maximum likelihood allows to reconstruct a test profile safely (with accuracy up to 5–6%), quality of restoration is worsened with increase of error, and at a relative error of 8 % restoration of profiles has become impossible. It was shown, that the method of maximum likelihood allows restoring a profile of an impurity more safely in a probed sample as contrasted to a method of regularization.

KEY WORDS: characteristic X-ray emission, ill-posed problems, method of maximum likelihood, method of regularization, instability of solution, restoration of profile of impurity.