

유전자 알고리즘과 일반화된 회귀신경망을 이용한 플라즈마 증착공정 예측모델

이덕우, 김병환
세종대학교 전자공학과

Prediction model of plasma deposition process using genetic algorithm and generalized regression neural network

Duk-Woo Lee, Byungwhan Kim
Sejong University, Electronic Engineering

Abstract

경제적인 공정분석과 최적화를 위해서는 컴퓨터를 이용한 플라즈마 예측모델이 요구되고 있다. 본 연구에서는 일반화된 회귀 신경망 (GRNN)을 이용하여 플라즈마 증착공정 모델을 개발한다. GRNN의 예측성능은 패턴층 뉴런의 가우시안 함수를 구성하는 학습인자, 즉 spread에 의존한다. 종래의 모델에서는 모든 가우시안 함수의 spread가 동일한 값에서 최적화되었으며, 이로 인해 모델의 예측성능을 향상시키는 데에는 한계가 있었다. 본 연구에서는 유전자 알고리즘 (GA)를 이용하여 다변수 spread를 최적화하는 기법을 개발하였으며, 그 성능을 PECVD 공정에 의해 증착된 SiN 박막의 증착률에 적용하여 평가하였다. 2^{6-1} 부분인자 실험계획법에 의해 수집된 데이터를 이용하여 신경망을 학습하였고, 모델적합성 점검을 위해 별도의 12번의 실험을 수행하였다. 가우시안 함수의 spread는 0.2에서 2.0까지 0.2간격으로 증가시켰으며, 최적화한 GA-GRNN모델의 예측성능은 6.6 A/min이었다. 이는 종래의 방식으로 최적화한 모델의 예측성능 (13.5 A/min)과 비교하여 50.7% 향상된 예측성능이며, 이러한 향상은 제한한 GA-GRNN 모델이 플라즈마 공정 모델의 예측성능을 증진하는데 매우 효과적임을 보여준다.

Key Words : 플라즈마, 증착, 일반화된회귀신경망, 유전자 알고리즘, 모델

1. 서론

플라즈마 증착공정은 공정변수에 따른 플라즈마 특성의 고도의 비선형성으로 인해 그 예측모델을 개발하기가 매우 어렵다. 물리적 모델은 많은 가정 (assumptions)을 포함하고 있어 모델 예측치의 신뢰도가 낮으며, 동시에 모델개발과 시뮬레이션에 소요되는 시간이 상당하여 실제 공정개발에 응용하기에는 적합하지가 않다. 이를 극복하기 위한 다른 방식으로 신경망과 통계적 실험계획법을 이용한 예측모델이 개발되어 왔다. 신경망은 주어진 입력출력간의 비선형성을 가정 없이 정확히 학습할 수 있는 능력을 보였으며, 식각과 증착공정의 모델링

에 많이 응용되었다 [1-2]. 신경망 중에서, 역전파 신경망 (error backpropagation neural network-BPNN) [3]이 가장 많이 응용되었으나, BPNN 모델개발에는 다수의 학습인자가 관여하고 있어 모델성능을 최적화하기가 매우 어렵다 [4]. 특히 뉴런간의 연결하중치의 불규칙성 (randomness)은 성능최적화를 더욱 어렵게 하고 있다. BPNN에 비해 그 최적화가 용이한 다른 신경망에는 일반화된 회귀 신경망 (generalized regression neural network-GRNN) [5]이 있으나, 반도체 플라즈마 공정에서의 그 응용은 별로 보고된 바가 없다. 최근 GRNN은 플라즈마 방전 특성, 즉 Langmuir probe를 이용하여 수집한 플라즈마 특성에 응용된 바가

있었다 [6]. 당시에 GRNN 모델은 통계적인 회귀 모델과 비교하였으나, 두 모델간의 성능차이는 미미하였다. GRNN은 학습이 용이하고, 학습제어인자도 가우시안(gaussian)함수의 spread 변수 하나 밖에 없어, 예측기의 설계가 용이하다. 일반적으로 GRNN의 성능은 패턴 층 뉴런의 가우시안함수가 동일한 값에서 그 성능이 최적화된다. 그러나, 모든 입력 패턴에 대해서 서로 다른 spread를 가질 때, 모델성능의 향상이 기대된다.

본 연구에서는 GRNN의 예측성능을 증진하기 위해서 가우시안 함수가 단일 spread가 아닌, 다중 spread에서 최적화시키는 기법을 유전자 알고리즘(generic algorithm-GA) [7]을 이용하여 개발한다. 개발한 기법을 SiN 박막 증착공정 데이터에 적용한다. SiN 박막은 plasma-enhanced chemical deposition system (PECVD)를 이용하여 증착하였고, 통계적인 실험계획법을 이용하여 실험을 수행하였다. 모델링에 이용된 증착특성은 증착률 이다. 개발된 모델의 예측성능은 종래의 방식으로 개발된 모델과 비교하여 평가한다.

표 1. 실험변수와 범위.

Parameter	Range	Unit
Substrate Temperature	200-400	°C
Pressure	0.6-1.2	Torr
RF Power	20-40	Watts
NH ₃ Flow	1.0-1.4	sccm
SiH ₄ Flow	180-260	sccm
N ₂ Flow	0-1000	sccm

2. 실험 데이터

PECVD (Plasma-Therm 700) 장비를 이용하여 SiN 박막을 4인치, 2.0 Ω-cm 저항의 p-type 실리콘 기판 위에 증착하였다. 증착률은 Metriton 2010 prism coupler를 사용하여 측정하였다 [8]. 모델개발을 위해, 2⁶⁻¹ 부분인자 실험계획법 [9]을 적용하였으며, 6개의 실험변수와 그 범위는 표 1에 나타나 있다. 수집된 32개의 실험과 실험계획의 중심점에 해당하는 하나의 실험을 추가한 33번의 실험데이터가 모델개발을 위한 학습 데이터를 구성한다. 모델 예측능력을 평가하기 위한 테스트 데이터는 총 12개로 구성되었으며, 따라서 모델개발에 이용된 전체 실험수는 45개이었다.

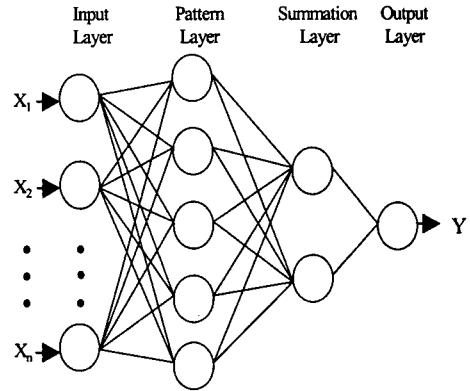


그림 1. GRNN의 구조.

3. 결과

3.1 일반화 된 회귀 신경망

그림 1에서와 같이, GRNN은 총 4개의 층, 즉 입력층, 패턴층, 합층 그리고 출력층으로 구성된다. 입력층의 뉴런 수는 독립 변수의 수와 일치하며, 패턴층의 뉴런수는 학습패턴의 수와 일치한다. 합층은 모델링하고자 하는 각 출력변수에 대해, 2개의 S 와 D 뉴런으로 구성된다. 입력층과 패턴층간의 하중치(W_p)는 입력패턴 (X)에 의해 결정되며, 이를 표현하면,

$$W_p = X^T \quad (1)$$

여기서 “ T ”는 이항(transposition)을 의미한다. 패턴층의 하나의 뉴런은 합층의 두 개의 뉴런에 연결되며, 패턴층의 i 번째의 뉴런과 합층 S 뉴런간의 연결 하중치는 y_i 가 된다. 여기서 y_i 는 i 번째의 실험조건 (x_i)에서 측정된 증착률에 해당한다. 한편 패턴층의 i 번째의 뉴런과 합층 D 뉴런간의 연결 하중치는 동일한 1값을 가진다. 따라서 연결하중치는 (2)식으로 표현된다.

$$W_s = [Y \ 1] \quad (2)$$

출력층에서의 예측치는 (3)식으로 구해진다.

$$\hat{y}_i(x) = \frac{\sum_{i=1}^n y_i \exp[-D(x, x_i)]}{\sum_{i=1}^n \exp[-D(x, x_i)]} \quad (3)$$

여기서 x_i 는 저장된 i 번째의 입력 학습패턴을 지칭하며, n 은 전체 학습데이터의 수를 의미한다. (3)에서 함수 D 는

$$D(x, x_i) = \sum_{j=1}^P \left(\frac{x_j - x_{ij}}{\zeta} \right)^2 \quad (4)$$

여기서 P 는 각 입력패턴을 구성하는 전체 독립변수의 수를 지칭한다. x_j 와 x_{ij} 는 x_j 와 x_{ij} 의 j 번째의 요소를 의미한다. 그리고 변수 ζ 는 spread라 불리며, GRNN의 성능을 결정하는 유일한 학습인자이다. 일반적으로 spread는 실험적으로 일정한 범위 내에서 결정하며, 결정된 spread는 그림 1의 패턴층을 구성하는 모든 가우시안 함수에 대해서 동일하다. spread 값을 여러 값에서 결정할 때, GRNN의 성능이 향상될 수 있음을 본 연구를 통해 살펴보고자 한다.

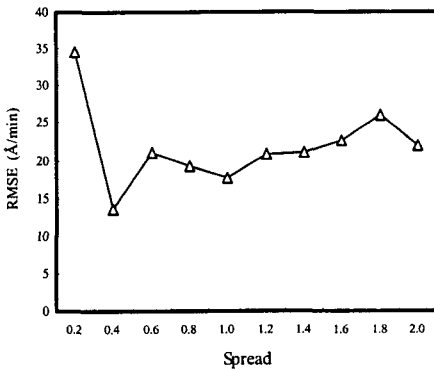


그림 2. GRNN의 spread에 따른 RMSE의 변화.

3.2 모델링과 평가

3.2.1 종래 GRNN 모델

비교 평가를 위해 종래의 방식으로 GRNN 모델을 개발한다. 이를 위해 설정한 spread 범위는 0.2-2.0이며, 이 범위에서 spread를 0.2간격으로 증가하였다. 각 spread에서 결정된 모델의 RMSE는 그림 2에 도시되어 있다. 그림 2에서와 같이, RMSE는 spread에 따라 상당히 변화하며, 모델 예측성능은 0.4에서 최적화되었다. 이에 해당하는 RMSE는 13.5 A/min이다.

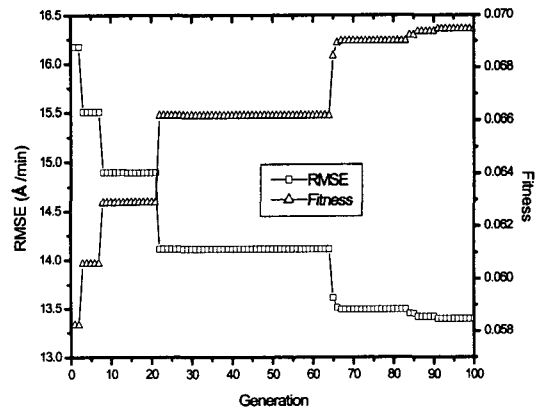


그림 3. GA-GRNN의 generation 수에 따른 RMSE와 적합도 함수.

3.2.2 GA-GRNN

GA를 이용하여 예측모델을 개발한다. 초기 해는 100개로 설정하였으며, 각 chromosome은 총 33개의 다변수 spread로 구성되었다. spread 범위는 0.2-2.0이며, 0.2간격으로 증가시켰다. 주어진 spread에서 난수발생기 (random generator)를 이용하여 33개의 spread값을 설정하였다. 결정된 교배와 돌연변이 확률은 각 0.95와 0.05였으며, generation 수는 100으로 설정하였다. 각 chromosome의 적합도는 (5)식을 이용하여 판정하였다.

$$F = \frac{1}{1 + RMSE} \quad (5)$$

여기서 $RMSE$ 는 테스트 데이터에 대한 예측에러이다.

그림 3은 spread 1.0에서의 GA 최적화 과정을 RMSE와 적합도 (fitness)함수로 도시하고 있다. 각 RMSE는 각 generation 수에서 결정된 최적의 모델의 예측에러이다. 그림 3에서와 같이, generation 수의 증가에 따라, 모델의 적합도는 증가하며, 동시에 예측 RMSE는 작아지고 있음을 알 수 있다. 그림 3에서와 같이, 최적 모델은 generation 수 91에서 발생하며, 그 RMSE는 13.4 A/min이다. 이와 동일한 방식으로, 각 spread에서

최적 모델을 결정하였으며, 그 결과가 RMSE의 경우 그림 4 그리고 적합도 값의 경우 그림 5에 도시되어 있다. 그림 4에서와 같이, 모델의 RMSE는 spread에 따라서 상당한 변화를 보이고 있으며, 최적모델은 spread 0.6에서 결정이 되었고, 그 RMSE는 6.6 Å/min이었다. 이는 종래의 모델에 비해 50.7% 예측성능이 향상된 수치이다. 이는 제안하는 방식이 기존 GRNN 모델의 예측성능을 획기적으로 증진하는데 효과적임을 보여준다.

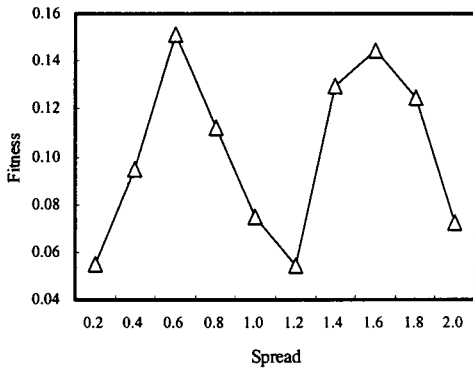


그림 4. spread 따른 모델 RMSE의 변화.

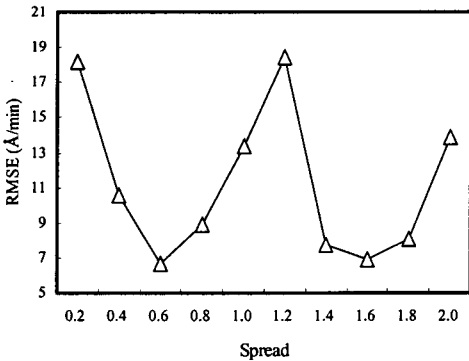


그림 5. spread에 따른 모델 적합도함수의 변화.

4.결 론

본 연구에서 GA-GRNN 예측기 설계방식을 제안하였으며, 그 성능을 PECVD 공정에 의해 증착된 SN박막의 증착률 예측에 적용하였다. 종래의 GRNN모델과 비교하였으며, 비교결과 50%이상의 예측성능을 향상시켰다. 개발된 모델은 현재 공정 변수에 따른 증착물의 변화를 예측하고, 그 메커니

즘을 해석하는데 응용이 되고 있다.

참고 문헌

- [1] B. Kim, S. S. Han, T. S. Kim, B. S. Kim, and I. J. Shim, "Modeling refraction characteristics of silicon nitride film deposited in a SiH₄/NH₃/N₂ plasma using neural network," *IEEE Trans. Plasma Sci.*, vol. 31, no. 3, 317-323, 2003.
- [2] B. Kim, S. M. Kong, and B. T. Lee, "Modeling SiC etching in C₂F₆/O₂ inductively coupled plasma using neural networks," *J. Vac. Sci. Technol. A*, vol. 20, no.1, pp. 146-152, 2002.
- [3] D. E. Rummelhart and J. L. McClelland, *Parallel Distributed Processing*, Cambridge, M.I.T. Press, 1986.
- [4] B. Kim and S. Park, "An optimal neural network plasma model: A case study," *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, vol. 56, pp. 39-50, 2001.
- [5] D. F. Specht, "A generalized regression neural network," *IEEE Trans. Neural Networks*, vol. 2, no. 6, 568, 1991.
- [6] B. Kim and S. Park, "Modeling of process plasma using a radial basis function network: A case study," *Trans. Cont. Autom. Syst. Eng.*, vol. 2, no. 4, pp. 268-273, 2000.
- [7] D. E. Goldberg, *Genetic Algorithms in Search, Optimization & Machine Learning*, Addison Wesley, 1989.
- [8] S. S. Han, "Modeling and optimization of plasma-enhanced chemical vapor deposition using neural networks and genetic algorithms," *Georgia Institute of Technology*, Ph. D. Thesis, 1996.
- [9] D. C. Montgomery, *Design and Analysis of Experiments*, John Wiley & Sons, Singapore, 1991.