

Исследование структуры и свойств Structure and properties research

**Физические методы
исследования и контроля**

**Physical methods
of research and monitoring**

DOI: 10.26896/1028-6861-2018-84-3-25-31

УДК (UDC) 539.26;519.65;51–72;543.44

ПОЛНОПРОФИЛЬНЫЙ РЕНТГЕНОФАЗОВЫЙ АНАЛИЗ НА ОСНОВЕ МЕТОДА РИТВЕЛЬДА, САМОКОНФИГУРИРУЕМОГО МНОГОПОПУЛЯЦИОННОГО ГЕНЕТИЧЕСКОГО АЛГОРИТМА И ДАННЫХ ЭЛЕМЕНТНОГО АНАЛИЗА*

© Александр Николаевич Залого¹, Петр Сергеевич Дубинин¹,
Игорь Степанович Якимов¹, Оксана Евгеньевна Безрукова¹,
Сергей Васильевич Бураков², Константин Александрович Гусев²,
Мария Евгеньевна Семенкина²

¹ Сибирский федеральный университет, г. Красноярск, Россия;
e-mail: zaloga@yandex.ru, dubinin-2005@yandex.ru, i-s-yakimov@yandex.ru

² Сибирский государственный университет науки и технологий имени акад. М. Ф. Решетнева, г. Красноярск, Россия;
e-mail: burakov_krasu@mail.ru, k.gusev17@yandex.ru, semenkina88@mail.ru

Статья поступила 6 июня 2017 г.

Полнопрофильный анализ по методу Ритвельда широко используется для лабораторного интерактивного количественного рентгенофазового анализа, однако его приложения для оперативного производственного аналитического контроля недостаточно развиты. Причина в том, что метод Ритвельда основан на нелинейном методе наименьших квадратов (МНК), который для сходимости требует достаточно точных исходных приближений уточняемых параметров для каждого образца. При эволюционном методе полнопрофильного количественного рентгенофазового анализа (КРФА) исходные приближения ищет генетический алгоритм. Вместе с тем эмпирическая настройка оптимальных параметров генетических операций, выполняемая в интерактивном режиме, остается трудоемкой. Для ее автоматизации предложен подход, основанный на самонастройке в процессе эволюционного КРФА с помощью самоконфигурируемого генетического алгоритма (СГА). Для улучшения сходимости в целевую функцию генетического алгоритма, представляющую взвешенный профильный R -фактор метода Ритвельда, вводили данные о количественном химическом составе образца. Программная реализация метода основана на параллельных вычислениях, обеспечивающих ускоренную сходимость генетического алгоритма, и позволяет проводить нестандартный КРФА в автоматическом режиме на многоядерном персональном компьютере. Метод опробован на группе тестовых многофазных образцов известного состава и показал хорошую точность полнопрофильного КРФА.

Ключевые слова: генетические алгоритмы; самоконфигурация; рентгеновская порошковая дифракция; полнопрофильный анализ; метод Ритвельда; количественный рентгенофазовый анализ.

* Работа выполнена при поддержке РФФИ, правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда поддержки научной и научно-технической деятельности (проект № 16-43-243049), а также фонда В. Потанина (проект № ГПК 95/16).

EVOLUTIONARY QUANTITATIVE FULL-PROFILE X-RAY PHASE ANALYSIS BASED ON THE RIETVELD METHOD, A SELF-CONFIGURABLE MULTIPOPULATION GENETIC ALGORITHM AND ELEMENTAL ANALYSIS DATA

© Alexandr N. Zaloga,¹ Petr S. Dubinin,¹ Igor S. Yakimov,¹ Oksana E. Bezrukova,¹ Sergey V. Burakov,² Konstantin A. Gusev,² Maria E. Semenkina²

¹ Siberian Federal University, Krasnoyarsk, Russia;

e-mail: zaloga@yandex.ru, dubinin-2005@yandex.ru, i-s-yakimov@yandex.ru

² Siberian State Science and Technology University, Krasnoyarsk, Russia;

e-mail: burakov_krasu@mail.ru, k.gusev17@yandex.ru, semenkina88@mail.ru

Submitted June 6, 2017.

We developed a self configuring genetic algorithm to quantify phase concentrations in a crystalline sample from powder X-ray diffraction data. The algorithm does not require the fine-tuning of parameters, which is inherent to most evolutionary algorithms. The software executing the algorithm uses parallel computing and allows performing reference-free quantitative phase analysis on a personal computer, a computing cluster or with the help of a computer network. The suggested method was tested on a set of trial samples with known composition. It was demonstrated that one may use data on the chemical composition of a sample to increase the accuracy of quantitative phase analysis.

Keywords: genetic algorithm; self-configuring; full-profile analysis; X-ray powder diffraction; Rietveld Method.

Исследуя рентгеновскую порошковую дифрактограмму таким универсальным методом, как полнопрофильный анализ по методу Ритвельда [1], можно получить данные о кристаллическом строении вещества: фазовом составе, кристаллической решетке, микрокристаллической структуре и атомной структуре фаз. Метод основан на моделировании дифрактограммы по результатам расчета ее профиля из исходных приближений указанных характеристик вещества и их уточнения по нелинейному методу наименьших квадратов (МНК). Критерием минимизации служит профильный R -фактор — взвешенная невязка между профилями расчетной и экспериментальной дифрактограмм.

При количественном рентгенофазовом анализе (КРФА) по методу Ритвельда [2] концентрации фаз рассчитывают из масштабных коэффициентов вхождения их расчетных дифрактограмм в модель экспериментальной дифрактограммы. Точность метода существенно зависит от качества моделирования формы профиля дифракционных рефлексов фаз и фона.

Полнопрофильный КРФА по методу Ритвельда имеет ряд проблем, осложняющих его применение. Основная из них состоит в том, что метод интерактивен, поскольку требует достаточно точных исходных приближений и их поэтапного уточнения. Тем не менее он широко применяется, так как не нуждается в градуировке по стандартным образцам фазового состава (СОФС) и при квалифицированном моделировании обеспечивает высокую точность анализа за счет уточнения микроструктурных характеристик (размеров частиц, текстур и др.) и особенностей атом-

но-кристаллической структуры фаз в многофазных материалах.

Для расширения сфер применения КРФА по методу Ритвельда, особенно в области производственного контроля, требуется его автоматизация, которая в настоящее время основана, как правило, на предварительной настройке к конкретным приложениям и классам анализируемых проб и ограничивается автоматическим определением только наиболее важных профильных параметров (включая характеристики решетки и текстуры, без уточнения кристаллической структуры фаз). Причина в том, что автоматическое уточнение слишком большого числа профильных и структурных параметров по их универсальным исходным значениям, не достаточно хорошо подходящим одновременно ко всем пробам, часто приводит к расходимости МНК.

Суть предлагаемого подхода к автоматизации КРФА по методу Ритвельда — эволюционного полнопрофильного КРФА под управлением генетического алгоритма (ГА) [3] — состоит в том, что ГА выбирает эволюционным способом по критерию минимизации профильного R -фактора исходные приближения модельных профильных и структурных параметров фаз индивидуально для каждой анализируемой пробы и управляет их автоматическим уточнением по методу Ритвельда.

Цель работы — автоматизация эволюционного метода полнопрофильного КРФА с помощью самоконфигурируемого многопопуляционного генетического алгоритма и данных элементного анализа.

Стохастические ГА имитируют эволюционные процессы естественного биологического отбора и включают формализованные операции парного скрещивания (рекомбинации), мутаций и селекции над множеством (популяцией) параметрических строк тестовых моделей. Исходные тестовые модели генерируются случайным образом. Оптимизация выполняется в ходе циклического процесса формирования с помощью генетических операций новых моделей и отбора лучших из них в новые эволюционные поколения популяции. При этом критерий оптимизации — некоторая функция пригодности моделей, определяемая задачей оптимизации.

ГА относятся к методам искусственного интеллекта и успешно применяются во многих областях науки и техники, в том числе для решения многоэкстремальных нелинейных задач многопараметрической оптимизации [4]. Одна из них — определение неизвестной атомной кристаллической структуры вещества в прямом пространстве по порошковой дифрактограмме [5 – 7].

Для улучшения сходимости ГА в структурном анализе использовали подход, основанный на мультипопуляционном параллельном генетическом алгоритме (МПГА) и локальной оптимизации тестовых структурных моделей (координат атомов и др.) по методу Ритвельда, реализованный в специальной компьютерной программе [8]. Суть подхода в том, что индивидуальные процессы ГА часто попадают в многочисленные локальные минимумы гиперповерхности R -фактора, а управляемая межпопуляционная миграция лучших структурных моделей способствует выходу из этих минимумов и вкупе с локальной оптимизацией приводит к повышению эффективности структурного анализа.

Адаптированный МПГА использовали также и для повышения эффективности эволюционного полнопрофильного КРФА, что обеспечило возможность применения нового варианта КРФА при решении некоторых задач автоматизированного производственного контроля (например, при контроле состава электролита алюминиевых электролизеров [9]).

Общий недостаток ГА (особенно при использовании для КРФА) — необходимость эмпирической настройки оптимальных значений параметров генетических операторов (вероятность мутаций, режимы скрещивания, селекции и др.) для решения конкретных задач. Поэтому для полной автоматизации эволюционного КРФА необходима и автоматизация выбора параметров генетических операторов [10, 11], для чего использовали параллельный самоконфигурируемый генетический алгоритм (СГА), обеспечивающий централизованный динамический выбор параметров генетических операторов на уровне индивиду-

альных популяций и основанный на методе самоконфигурации [12].

Обмен данными между параллельными популяциями реализовали в качестве островной модели с кооперативно-конкурирующей схемой [13]. Кроме того, для улучшения сходимости КРФА по СГА в его функцию пригодности к R -фактору добавили невязку между расчетным и независимо измеренным химическим составом многофазного образца.

Эффективность оптимизации по ГА зависит от выбора видов и настройки генетических операторов (селекции, скрещивания, мутации и замещения). При этом на первый план выходят их динамическая самоадаптация и самоконфигурирование [14, 15].

Метод самоконфигурирования основан на том, что подбор оптимальных операторов производится из заданного множества их возможных вариантов самим алгоритмом в ходе решения задачи. Вероятность для операторов быть выбранными определяется, исходя из их успешности на последнем поколении. На следующем поколении у лучшего типа оператора она повышается, у остальных — снижается, что приводит к автоматическому выбору наилучшего типа.

Работа СГА безусловной оптимизации, подразумевающего выбор каждого вида оператора в отдельности, может быть описана следующим образом:

1. При старте алгоритма выбор того или иного варианта для каждого вида оператора (селекция, скрещивание, мутация) равновероятен:

$$p = 1/z,$$

где z — число операторов данного вида.

2. На каждом поколении эффективность варианта операторов ГА оценивается по средней пригодности индивидов эволюции, получаемых с его помощью:

$$\text{average fitness}_i = f_i/n_i, \quad i = 1, 2, \dots, z,$$

где average fitness_i — средняя пригодность порожденных потомков; f_i — сумма пригодностей индивидов, полученных i -м оператором; n_i — количество индивидов, полученных i -м оператором.

3. При генерации следующего поколения вероятность использования наиболее эффективного варианта оператора увеличивается на $(z-1)K/(zN)$, а вероятности всех остальных уменьшаются на $K/(zN)$, где N — число поколений, K — константа (обычно равная 2). В то же время вероятность ни одного из вариантов не может стать равной нулю (ниже заданного порога). Сумма вероятностей для одного вида оператора всегда равна единице. При достижении заданного порога соответствующий вариант оператора

перестает «отдавать» часть своей вероятности, а наиболее эффективный, соответственно, не получает ее.

4. Для порождения каждого потомка следующего поколения стохастически, согласно полученным распределениям вероятностей, выбираются операторы, при помощи которых он и будет сгенерирован.

Самоконфигурирование освобождает от подбора настроек генетических операторов, но эффективность ГА зависит от выбранного способа самоконфигурирования.

Апробацию самоконфигурирования в реализованной версии мультипопуляционного параллельного СГА осуществляли следующим образом. Генерировали n различных популяций моделей вещества, и на каждом из n вычислительных узлов многоядерного ПК запускали индивидуальный однопопуляционный ГА. Первоначально генерировали случайные индивиды эволюции — строки, состоящие из значений уточняемых параметров метода Ритвельда для сформированных моделей, равномерно распределенных по заданному пространству поиска. На каждом из вычислительных узлов с помощью операторов рекомбинации и локальной селекции происходило формирование потомков с меньшими значениями целевой функции пригодности. Операторы мутации случайным образом «разбрасывали» их по пространству поиска (иногда с ухудшением пригодности). Часть моделей с лучшей пригодностью обрабатывали с помощью МНК метода Ритвельда. Затем в результате общей селекции формировалась новая популяция тестовых моделей — потомков с лучшей, в среднем, пригодностью. Определенное количество лучших тестовых моделей из популяций на рабочих узлах направляли на управляющий вычислительный узел СГА. Решения, накопленные на управляющем узле, сортировали в порядке увеличения значения пригодности. Периодически из лучшей половины отсортированных решений случайным образом отбирали и посылали обратно в популяции на случайно выбранные рабочие узлы то или иное число разных моделей. Умеренная миграция обеспечивала распространение удачных решений по популяциям и улучшала общую сходимость.

Для каждого процесса задавали стандартный набор генетических операторов — по несколько операторов каждого типа (в частности, одно-, двухточечное и равномерное скрещивание; ранговая и турнирная селекции с разными размерами турнира; низкая, средняя и высокая вероятность мутации). Распределение вероятностей для выбора типа оператора при генерации следующего поколения данной популяции постоянно смещается в пользу более эффективных вариан-

тов операторов за счет менее эффективных. Заметим, в данном случае эффективность генетических операторов оценивается только локально, для индивидуальных ГА — на отдельных рабочих узлах, без учета их эффективности в процессах ГА на других узлах.

КРФА по методу Ритвельда основан на итерационной минимизации с помощью нелинейного МНК невязки между расчетным и экспериментальным профилями дифрактограммы:

$$\Phi(\mathbf{P}_{k+1}) = \sum_i w_i [Y_o(2\Theta_i) - Y_c(\mathbf{P}_k + \Delta\mathbf{P}_k, 2\Theta_i)]^2 \rightarrow 0, \quad (1)$$

где Y_o , Y_c — экспериментальные и вычисленные интенсивности в точках профиля $2\Theta_i$; w_i — весовые коэффициенты; $\mathbf{P}_k$ — вектор значений профильных, микроструктурных и кристаллоструктурных параметров, полученных на k -й итерации; $\Delta\mathbf{P}_k$ — приращения к ним, вычисляемые по МНК (при $k = 0$ задаются исходные значения параметров).

Уточняемая по методу Ритвельда часть параметров вектора $\mathbf{P}$ определяет состав параметрических строк — индивидов эволюции по ГА. Полный набор параметров, включая фиксированные и изменяемые, представляет тестовую модель характеристик многофазного образца.

При эволюционном КРФА необходимо задать область значений уточняемых параметров. Лучшие из значений, определяемых в этой области в процессе эволюции по ГА, дальше используются в качестве исходных.

Для задания области поиска на параметры накладывали ограничения — для каждого параметра задавали интервал значений, перекрывающий его возможные вариации. Так, в качестве исходных значений структурных параметров использовали кристаллические структуры фаз, выбранные из базы кристаллоструктурных данных, в результате качественного РФА образца. При этом в качестве уточняемых структурных характеристик могут задаваться координаты атомов, расположенных в общих кристаллографических позициях, а также коэффициенты их заполнения атомами, если данная фаза — твердый раствор. Соответствующие интервалы значений определяют возможные окрестности, в которых могут меняться координаты атомов и коэффициенты заполнения.

Для автоматизации полнопрофильного КРФА важно то, что всегда известно целевое значение R -фактора, предварительно определяемое в результате декомпозиции профиля дифрактограммы (обычно по методу Ле Бэйла [16]).

После достижения одной из тестовых моделей значения R -фактора, близкого к целевому, выполняли ее финальное уточнение по методу Ритвельда и рассчитывали концентрации фаз

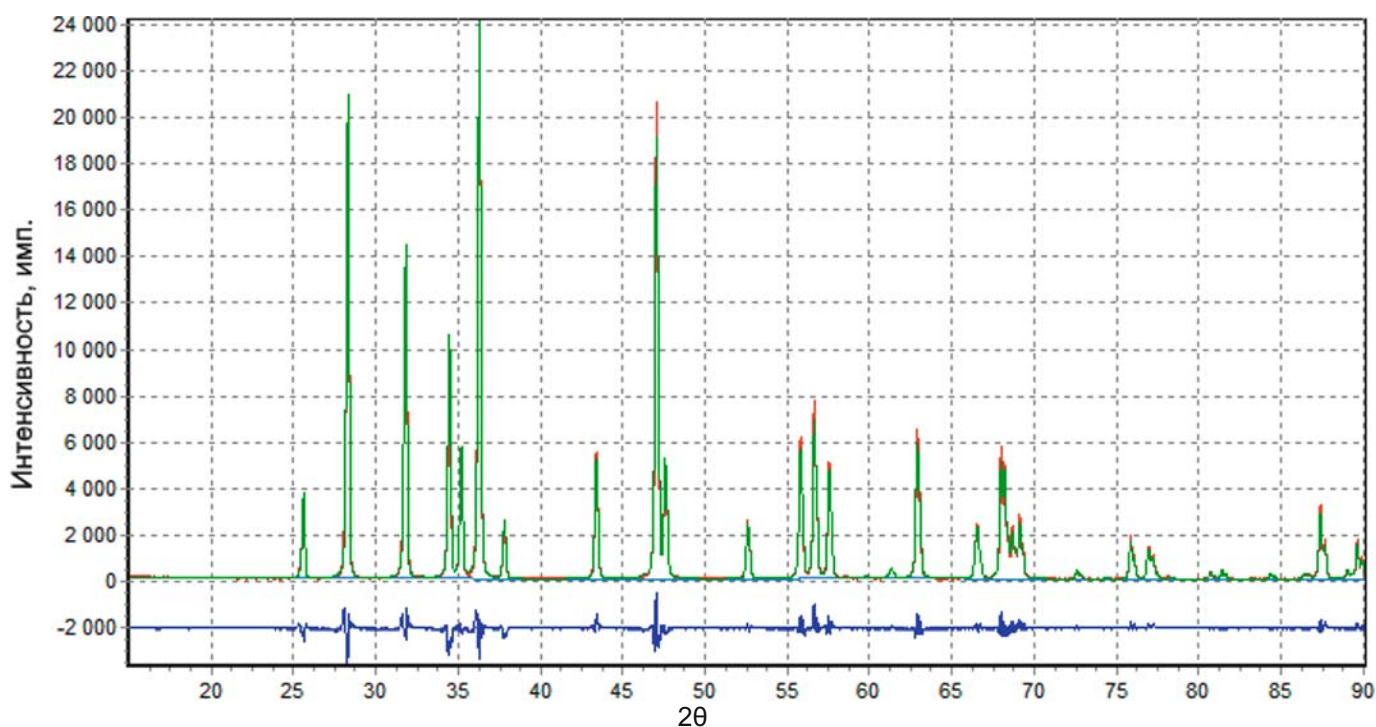


Рис. 1. Результат моделирования дифрактограммы смеси CPD1-h по параллельному СГА (экспериментальная дифрактограмма — красная линия, расчетная — зеленая, разность — синяя)

(C_a) в образце. При отсутствии аморфной фазы для расчета использовали нормированное выражение (в присутствии аморфной фазы — вариант КРФА с внутренним стандартом [2]):

$$C_a = S_a Z_a M_a V_a / \sum_{j=1}^N S_j Z_j M_j V_j, \quad (2)$$

где S_a — шкальный фактор — коэффициент вхождения расчетной дифрактограммы фазы a (Y_{c_a}) в экспериментальную (Y_o); V_a , Z_a , M_a — объем ячейки, число формульных единиц в ячейке и молекулярная масса фазы a ; N — число фаз многофазного образца.

Ввиду узости области поиска, в которой R -фактор меняется недостаточно значительно, чтобы служить эффективным критерием пригодности для эволюционного поиска по ГА, для усиления чувствительности целевой функции пригодности к R -фактору добавили невязку между вычисленными (из данных КРФА) и измеренными значениями элементного состава:

$$R_p = 100 \left\{ (1 - w_{XA}) \sqrt{\sum_i \frac{w_i [Y_{o_i} - Y_{c_i}(\mathbf{P})]^2}{\sum_i w_i (Y_{o_i})^2}} + \frac{w_{XA}}{\sum_t w_t (C_t^{XA})^2} \sum_t w_t \left[\sum_a P_{ta} \frac{S_a Z_a M_a V_a}{\sum_a S_a Z_a M_a V_a} - C_t^{XA} \right]^2 \right\}, \quad (3)$$

где C_t^{XA} — измеренные значения элемента t в образце; P_{ta} — массовая доля элемента t в фазе a ; w_{XA} — весовой вклад в R -фактор данных о химическом составе образца (обычно 0,5).

Испытание и оценку точности КРФА проводили на дифрактограммах восьми тестовых трехфазных смесей флюорита (CaF_2), цинкита (ZnO) и корунда (Al_2O_3) (структурные модели фаз брали из базы данных ICSD [18]) [17]. Для исследуемых образцов по СГА определяли следующие параметры (всего 28): смещение дифрактограммы вдоль горизонтальной оси; профильные параметры фаз Al_2O_3 , CaF_2 и ZnO .

Поскольку анализируемые смеси содержали всего по три фазы, чтобы приблизить испытания к реальным условиям, в химической части функции пригодности (3) использовали содержание лишь одного химического элемента — кислорода, определенного по данным РФА.

На рис. 1 представлен пример результата полнопрофильного КРФА по параллельному СГА — итог моделирования дифрактограммы одной из смесей (CPD1-h) (профильный R -фактор составляет 10,5 % отн.) [17].

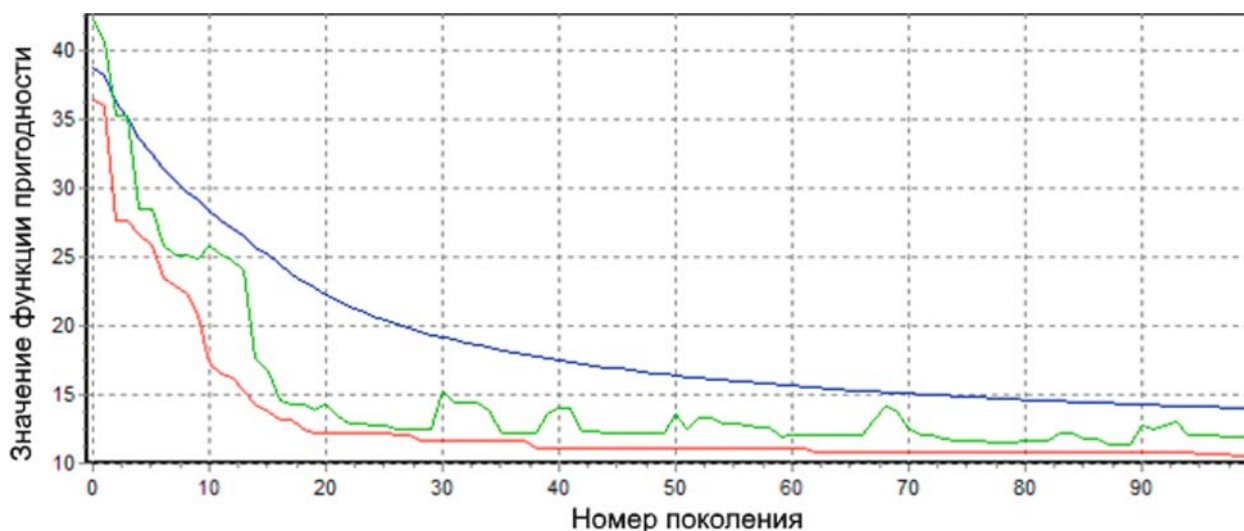


Рис. 2. График сходимости анализа образца CPD1-h по параллельному СГА

Результаты определения фазового состава образцов тестовых смесей, полученные КРФА по СГА и взвешиванием, % масс. (в скобках — стандартные отклонения)

Образец/ Фаза	Способ определения								
	Взвешивание			КРФА по СГА			Разность		
	CaF ₂	ZnO	Al ₂ O ₃	CaF ₂	ZnO	Al ₂ O ₃	CaF ₂	ZnO	Al ₂ O ₃
a	94,81	4,04	1,15	94,77 (0,02)	3,93 (0,04)	1,30 (0,02)	0,04	0,11	-0,15
b	4,33	1,36	94,31	4,18 (0,07)	1,23 (0,03)	94,59 (0,09)	0,15	0,13	-0,28
c	1,36	93,59	5,04	1,53 (0,02)	93,49 (0,02)	4,98 (0,04)	-0,17	0,10	0,06
d	53,58	32,89	13,53	53,65 (0,04)	32,15 (0,08)	14,20 (0,08)	-0,07	0,74	-0,67
e	29,62	15,25	55,12	29,14 (0,19)	14,32 (0,05)	56,54 (0,21)	0,48	0,93	-1,42
f	17,72	55,22	27,06	18,00 (0,04)	54,27 (0,33)	27,73 (0,35)	-0,28	0,95	-0,67
g	34,42	34,21	31,37	34,70 (0,23)	33,14 (0,29)	32,16 (0,27)	-0,28	1,07	-0,79
h	34,69	30,19	35,12	34,99 (0,20)	29,15 (0,12)	35,86 (0,27)	-0,30	1,04	-0,74
Среднее							-0,05	0,63	-0,58
СКП							0,27	0,44	0,46

На рис. 2 приведен типичный график сходимости, полученный в процессе анализа по СГА того же образца (CPD1-h). По оси абсцисс отложены номера поколений эволюции (нулевой номер — начальная случайная генерация всех популяций), по оси ординат — соответствующие значения функции пригодности для лучшего решения из числа накопленных на управляющем узле (красная линия — значения пригодности лучшего из найденных на данном поколении решений, синяя — среднее значение пригодности решений, накопленных на управляющем узле, зеленая — худшее из лучших решений на рабочих узлах). Видно, что решение найдено приблизительно на 20-м поколении, дальше происходит постепенное уточнение модельного профиля дифрактограммы образца.

В таблице представлены результаты определения фазового состава образцов тестовых сме-

сей [17], полученные методом КРФА и взвешиванием (усредненные значения по десяти запускам параллельного СГА).

Видно, что СКП (среднеквадратическая погрешность относительно взвешенных значений фаз) составляет довольно малую для метода КРФА величину — всего около 0,4 % масс. При этом наблюдается небольшое разнонаправленное систематическое отклонение концентраций для фаз ZnO и Al₂O₃. Отметим, что аналогичная, хотя и вдвое меньшая, систематическая погрешность наблюдается и в данных рентгенофлуоресцентного анализа Al₂O₃ [17]. Время КРФА одного образца по СГА составляло около 5 мин.

Таким образом, использование самоконфигурируемого мультипопуляционного параллельного генетического алгоритма позволяет автоматизировать полнопрофильный КРФА многофазных материалов по методу Ритвельда. Метод

СГА не требует эмпирического выбора эффективных настроек генетического алгоритма и демонстрирует на использованных для его оценки тестовых смесях достаточно высокую эффективность и точность автоматического полнопрофильного КРФА.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Young R. A.** The Rietveld Method. — Oxford University Press, 1995. — 298 p.
2. **Bish D. L., Howard S. A.** Quantitative phase analysis using the Rietveld method / *J. Appl. Cryst.* 1988. Vol. 21. P. 86 – 91.
3. **Якимов И. С., Залого А. Н., Соловьев Л. А., Якимов Я. И.** Метод эволюционного структурно-чувствительного количественного рентгенофазового анализа многофазных поликристаллических материалов / *Заводская лаборатория. Диагностика материалов.* 2011. Т. 77. № 1. С. 29 – 34.
4. **Гуменикова А. В., Емельянова М. Н., Семенкин Е. С., Сопов Е. А.** Об эволюционных алгоритмах решения сложных задач оптимизации / *Вестник сибирского государственного аэрокосмического университета имени академика М. Ф. Решетнева.* 2003. № 4. С. 14.
5. **Harris K. D., Johnston R. L., Kariuki B. M.** The genetic algorithm: Foundations and applications in structure solution from powder diffraction data / *Acta Crystallogr.* 1998. Sect. A: Found. Crystallogr. Vol. 54. P. 632 – 645.
6. **Feng Z., Dong C.** A program for structure determination from powder diffraction data using α genetic algorithm / *J. Appl. Crystallogr.* 2007. Vol. 40. P. 583 – 588.
7. **Lutterotti L., Bortolotti M.** Object oriented programming and fast computation techniques in Maud, α program for powder diffraction analysis written in java / *IUCr: Compcomm Newsletter.* 2003. Vol. 1. P. 43 – 50.
8. **Burakov S. V., Zaloga A. N., Semenkin E. S., Yakimov I. S.** Research on convergence of multipopulation binary- and real-coded genetic algorithms for solution of crystal structure from X-Ray powder diffraction data / *Crystal Research and Technology.* 2015. Vol. 50. Issue 9 – 10. P. 724 – 728.
9. **Zaloga A., Akhmedova S., Yakimov I., Burakov S., Semenkin E., Dubinin P., Piksina O., Andryushchenko E.** Genetic Algorithm for Automated X-Ray Diffraction Full-Profile Analysis of Electrolyte Composition on Aluminium Smelters / *Lecture Notes in Electrical Engineering.* 2016. Vol. 383. P. 79 – 93.
10. **Gomez J.** Self Adaptation of Operator Rates Evolutionary Algorithms / *Genetic and Evolutionary Computation — GECCO. Lecture Notes in Computer Science.* 2004. Vol. 3102. P. 1162 – 1173.
11. **Toussaint M., Igel C.** Neutrality: a necessity for self-adaptation / *Proceedings of the IEEE Congress on evolutionary computation.* 2002. P. 1354 – 1359.
12. **Семенкина М. Е.** Самоадаптивные эволюционные алгоритмы проектирования информационных технологий интеллектуального анализа данных / *Искусственный интеллект и принятие решений.* 2013. № 1. С. 13 – 23.
13. **Sopov E.** A Self-configuring Metaheuristic for Control of Multi-Strategy Evolutionary Search / *Advances in Swarm and Computational Intelligence.* 2015. P. 29 – 37.
14. **Semenkin E., Semenkina M.** The Choice of Spacecrafts' Control Systems Effective Variants with Self-Configuring Genetic Algorithm / In: Ferrier J. L. et al (Eds.): *Informatics in Control, Automation and Robotics. Proceedings of the 9th International Conference ICINCO'2012.* 2012. Vol. 1. P. 84 – 93.
15. **Semenkin E., Semenkina M.** Self-configuring Genetic Algorithm with Modified Uniform Crossover Operator / *Advances in Swarm Intelligence. Lecture Notes in Computer Science.* 2012. P. 414 – 421.
16. **Le Bail A.** The Profile of a Bragg Reflection for Extracting Intensities. Ch. 5. *Powder Diffraction Theory and Practice.* — Cambridge. Royal Society of Chemistry, 2008. — 571 p.
17. **Nicola V. Y. Scarlett, Ian C. Madsen, Lachlan M. D. Cran- swick et al.** / Round Robin on Quantitative phase analysis: samples 2 / *J. Appl. Cryst.* 2002. N 35. P. 383 – 400.
18. **Международный банк данных по кристаллоструктурным данным (ICSD).** On-line: www2.fiz-karlsruhe.de/icsd_publications.html.

REFERENCES

1. **Young R. A.** The Rietveld Method. — Oxford University Press, 1995. — 298 p.
2. **Bish D. L., Howard S. A.** Quantitative phase analysis using the Rietveld method / *J. Appl. Cryst.* 1988. Vol. 21. P. 86 – 91.
3. **Yakimov I. S., Zaloga A. N., Solov'ev L. A., Yakimov Ya. I.** Method of evolutionary structure-sensitive quantitative x-ray phase analysis of multiphase polycrystalline materials / *Zavod. Lab. Diagn. Mater.* 2011. Vol. 77. N 11. P. 29 – 34 [in Russian].
4. **Gumennikova A. V., Emel'yanova M. N., Semenkin E. S., Sopov E. A.** On evolutionary algorithms for solving complex optimization problems / *Vestn. Sib. Gos. Aërokosm. Univ. im. Akad. M. F. Reshetneva.* 2003. N 4. P. 14 [in Russian].
5. **Harris K. D., Johnston R. L., Kariuki B. M.** The genetic algorithm: Foundations and applications in structure solution from powder diffraction data / *Acta Crystallogr.* 1998. Sect. A: Found. Crystallogr. Vol. 54. P. 632 – 645.
6. **Feng Z., Dong C.** A program for structure determination from powder diffraction data using α genetic algorithm / *J. Appl. Crystallogr.* 2007. Vol. 40. P. 583 – 588.
7. **Lutterotti L., Bortolotti M.** Object oriented programming and fast computation techniques in Maud, α program for powder diffraction analysis written in java / *IUCr: Compcomm Newsletter.* 2003. Vol. 1. P. 43 – 50.
8. **Burakov S. V., Zaloga A. N., Semenkin E. S., Yakimov I. S.** Research on convergence of multipopulation binary- and real-coded genetic algorithms for solution of crystal structure from X-Ray powder diffraction data / *Crystal Research and Technology.* 2015. Vol. 50. Issue 9 – 10. P. 724 – 728.
9. **Zaloga A., Akhmedova S., Yakimov I., Burakov S., Semenkin E., Dubinin P., Piksina O., Andryushchenko E.** Genetic Algorithm for Automated X-Ray Diffraction Full-Profile Analysis of Electrolyte Composition on Aluminium Smelters / *Lecture Notes in Electrical Engineering.* 2016. Vol. 383. P. 79 – 93.
10. **Gomez J.** Self Adaptation of Operator Rates Evolutionary Algorithms / *Genetic and Evolutionary Computation — GECCO. Lecture Notes in Computer Science.* 2004. Vol. 3102. P. 1162 – 1173.
11. **Toussaint M., Igel C.** Neutrality: a necessity for self-adaptation / *Proceedings of the IEEE Congress on evolutionary computation.* 2002. P. 1354 – 1359.
12. **Semenkina M. E.** Self-adaptive evolutionary algorithms for designing information technologies for data mining / *Iskusst. Intell. Prin. Resh.* 2013. N 1. P. 13 – 23 [in Russian].
13. **Sopov E.** A Self-configuring Metaheuristic for Control of Multi-Strategy Evolutionary Search / *Advances in Swarm and Computational Intelligence.* 2015. P. 29 – 37.
14. **Semenkin E., Semenkina M.** The Choice of Spacecrafts' Control Systems Effective Variants with Self-Configuring Genetic Algorithm / In: Ferrier J. L. et al (Eds.): *Informatics in Control, Automation and Robotics. Proceedings of the 9th International Conference ICINCO'2012.* 2012. Vol. 1. P. 84 – 93.
15. **Semenkin E., Semenkina M.** Self-configuring Genetic Algorithm with Modified Uniform Crossover Operator / *Advances in Swarm Intelligence. Lecture Notes in Computer Science.* 2012. P. 414 – 421.
16. **Le Bail A.** The Profile of a Bragg Reflection for Extracting Intensities. Ch. 5. *Powder Diffraction Theory and Practice.* — Cambridge. Royal Society of Chemistry, 2008. — 571 p.
17. **Nicola V. Y. Scarlett, Ian C. Madsen, Lachlan M. D. Cran- swick et al.** / Round Robin on Quantitative phase analysis: samples 2 / *J. Appl. Cryst.* 2002. N 35. P. 383 – 400.
18. **Inorganic Crystal Structure Database (ICSD).** On-line: www2.fiz-karlsruhe.de/icsd_publications.html.