

基于混合集成建模的硅单晶直径自适应非线性预测控制

任俊超^{1,2} 刘丁^{1,2} 万银^{1,2}

摘要 大尺寸、电子级直拉硅单晶生长过程中物理变化复杂、多场多相耦合、模型不确定且存在大滞后和非线性等特性,因此如何实现硅单晶直径控制是一个具有理论意义和实际价值的问题. 本文结合工程实际提出一种基于混合集成建模的晶体直径自适应非线性预测控制方法. 首先,为了准确辨识晶体直径模型,提出基于互相关函数的时滞优化估计方法和基于 Lipschitz 商准则与模型拟合优度的模型阶次辨识方法;其次,基于“分而治之”原理构建晶体直径混合集成模型. 其中,采用小波包分解 (Wavelet packet decomposition, WPD) 方法将原始数据分解成若干个子序列,以减少其非平稳性和随机噪声. 极限学习机 (Extreme learning machine, ELM) 和长短时记忆网络 (Long-short-term memory networks, LSTM) 分别建立近似 (低频) 子序列和细节 (高频) 子序列的预测模型,最终晶体直径预测输出由各子序列的预测结果汇总而成;然后,针对晶体直径混合集成模型失配问题以及目标函数难以求解问题,提出一种基于蚁狮优化 (Ant lion optimizer, ALO) 的自适应非线性预测控制策略. 最后,基于工程实验数据仿真分析,验证了所提建模及控制方法的有效性.

关键词 直拉硅单晶生长, 直径控制, 混合集成建模, 模型辨识, 自适应非线性预测控制

引用格式 任俊超, 刘丁, 万银. 基于混合集成建模的硅单晶直径自适应非线性预测控制. 自动化学报, 2020, 46(5): 1004-1016

DOI 10.16383/j.aas.c190798

Hybrid Integrated Modeling Based Adaptive Nonlinear Predictive Control of Silicon Single Crystal Diameter

REN Jun-Chao^{1,2} LIU Ding^{1,2} WAN Yin^{1,2}

Abstract Large-scale, electronic-grade Czochralski silicon single crystal growth process has complex physical changes, multi-field and multi-phase coupling, model uncertainty, and large lag and nonlinear characteristics. Therefore, how to control the silicon single crystal diameter is a problem of theoretical significance and practical value. Based on the engineering reality, this paper proposes a crystal diameter adaptive nonlinear predictive control method based on hybrid integrated modeling. Firstly, in order to accurately identify the crystal diameter model, a time-delay optimization estimation method based on cross-correlation function and a model order identification method based on Lipschitz quotient criterion and goodness-of-fit of the models are proposed; Secondly, based on the principle of "divide and conquer", a hybrid integrated model of crystal diameter is constructed. Here, wavelet packet decomposition (WPD) is used to decompose the raw data into several subsequences to reduce its non-stationarity and random noise. Extreme learning machines (ELM) and long-short-term memory networks (LSTM) establish prediction models of approximate (low-frequency) subsequences and detail (high-frequency) subsequences, respectively. The final crystal diameter prediction output is summarized by the prediction results of each subsequence; Then, in view of the mismatch of the crystal diameter hybrid integrated model and the difficulty of solving the objective function, a adaptive nonlinear predictive control strategy based on ant lion optimizer (ALO) is proposed. Finally, the effectiveness of the proposed modeling and control method is verified by the simulation analysis of engineering experimental data.

Key words Czochralski silicon single crystal growth, diameter control, hybrid integration modeling, model identification, adaptive nonlinear predictive control

Citation Ren Jun-Chao, Liu Ding, Wan Yin. Hybrid integrated modeling based adaptive nonlinear predictive control of silicon single crystal diameter. *Acta Automatica Sinica*, 2020, 46(5): 1004-1016

收稿日期 2019-11-20 录用日期 2020-03-16
Manuscript received November 20, 2019; accepted March 16, 2020
国家自然科学基金重点项目 (61533014) 资助
Supported by the Key Program of National Natural Science Foundation of China (61533014)
本文责任编辑 诸兵
Recommended by Associate Editor ZHU Bing

1. 西安理工大学晶体生长设备及系统集成国家地方联合工程研究中心 西安 710048 2. 陕西省复杂系统控制与智能信息处理重点实验室 西安 710048
1. National & Local Joint Engineering Research Center of Crystal Growth Equipment and System Integration, Xi'an University of Technology, Xi'an 710048 2. Shaanxi Key Laboratory of Complex System Control and Intelligent Information Processing, Xi'an 710048

硅是最重要的半导体材料. 据统计, 全球 95% 以上的半导体器件和 99% 以上的集成电路采用硅单晶作为衬底材料, 因此稳定、高效、高品质的硅单晶生产对信息产业安全可靠发展以及持续技术创新起到至关重要的支撑作用. 直拉法 (Czochralski 法, Cz 法) 晶体生长工艺是目前生产大尺寸、电子级硅单晶的主要方法^[1-3]. 其原理是将石英坩埚中的多晶硅原料熔化, 并经过引晶、放肩、等径和收尾等一系列步骤, 最终从硅熔体中提拉出圆柱形的硅单晶, 生长工艺流程如图 1 所示.

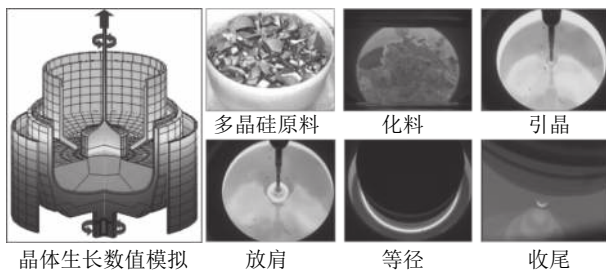


图 1 Cz 法硅单晶生长工艺流程

Fig.1 Cz silicon single crystal growth process

Cz 法硅单晶生长的主要目的是提拉出的硅单晶具有等直径、杂质少、低缺陷等优点^[4-5]. 晶体直径是硅单晶生长过程中一个重要的控制目标, 精准的直径控制不但可以避免晶体内部位错缺陷生成的可能性, 而且能够提高后续加工的晶体利用率. 为此, 研究人员提出了多种晶体直径控制方法并应用于实际生产^[6-8]. Zheng 等根据 Cz 法硅单晶生长过程中能量、质量平衡、流体力学和几何方程建立了晶体半径和晶体生长速率的集总参数模型, 并利用工业运行数据验证了模型的有效性^[9]. Abdollahi 和 Dubljevic 针对晶体半径和温度提出了分布式参数模型, 该模型能够准确地描述系统动力学行为和晶体内部温度分布状态^[10]. Winkler 等基于弯月面处晶体半径变化与晶体倾斜角之间的关系, 建立了晶体生长过程的流体力学和几何模型, 避免了热动力学建模的复杂性. 同时, 设计了晶体半径和生长速率的双 PID 控制系统, 并获得了比较接近实际过程的控制效果^[11-12]. Rahmanpour 等针对 Cz 法硅单晶生长过程的非线性和大滞后特性, 设计了基于模型的提拉速度和加热器功率两个协同工作的模型预测控制器 (Model predictive control, MPC), 用于控制晶体半径和熔体温度, 并获得了良好的控制性能^[13]. 然而, 传统基于模型的控制策略很难应用于实际硅单晶生长过程控制, 且晶体提拉速度的不断变化容易导致硅单晶品质降低. 通常, 影响晶体直径变化的主要操纵变量是加热器功率和晶体

提拉速度^[14]. 其中, 晶体提拉速度优化调节范围窄, 而且频繁的变化会导致生长界面波动剧烈, 容易产生断晶和缺陷生成的可能性, 而加热器功率对晶体直径的调节是一个缓慢的时延过程, 具有调节范围大、不易导致生长界面波动的优点^[3, 15]. 因此, 如何建立加热器功率与晶体直径之间的硅单晶生长过程模型和设计良好的直径控制器是实现硅单晶高品质生长的关键性问题.

机理模型和数据驱动模型是晶体直径控制的两种常用模型. Cz 法硅单晶生长过程处于高温、高压、多场耦合的环境中, 机理不明, 且是一个具有大滞后的非线性慢时变动态过程^[1], 所以机理模型难以建立且很难实际应用于硅单晶生产过程控制. 然而, 数据驱动控制可以直接利用数据实现复杂工业过程建模和控制, 且已受到学术界的广泛关注^[16-17]. 因此, 针对 Cz 法硅单晶生长过程中复杂的动态特性, 基于数据驱动的晶体直径建模与控制是一种可行途径. 近年来, 随着人工智能技术的迅速发展和普及, 许多机器学习方法和深度学习模型被广泛应用于工业过程建模. 然而, 单一的模型往往难以达到预期的预测效果, 所以研究人员基于“分而治之”原理提出了混合集成建模方法. 相比单一模型, 混合集成建模方法综合了不同模型的优点, 具有令人满意的预测效果^[18-20]. 实际硅单晶生长过程中的数据 (加热器功率、晶体直径等) 包含了大量反映硅单晶生产运行和产品质量等关键参数的潜在信息, 所以采用混合集成建模方法建立硅单晶生长过程的预测模型, 具有无需显式建模晶体生长系统内部状态以及减少建模成本和提高建模精度的优点. 预测控制是工业实践中先进控制的主导技术, 具有处理大滞后、非线性、不确定性的良好能力^[21-22]. 因此, 针对具有大滞后、非线性、慢时变动态特性的 Cz 法硅单晶生长过程, 预测控制方法可以作为晶体直径控制的首选方法. 然而, 复杂的硅单晶生长过程使得优化晶体直径目标函数的求解变得十分困难, 常用的非线性优化方法, 如最速下降法、牛顿法等很难方便实施应用, 且这些方法要求解空间具有凸性, 有的算法还要求目标函数具有二阶或高阶导数. 相比之下, 启发式优化算法对所求解问题的数学模型要求不高, 常被用于复杂目标函数的优化求解^[23-24], 如遗传算法 (GA) 和蚁狮优化 (ALO) 等. ALO 算法是一种无梯度的优化算法^[25], 具有可调参数少、求解灵活且易于实现等优点, 非常适合求解目标函数复杂的硅单晶直径预测控制问题.

本文在不依赖 Cz 法硅单晶生长过程的任何数学模型信息的情况下, 根据“分而治之”原理和工业运行数据提出了一种基于混合集成建模的晶体直

径自适应非线性预测控制方法 (自适应 Nonlinear model predictive control, 自适应 NMPC), 该方法由晶体直径混合集成建模和晶体直径预测控制组成. 其中, 晶体直径混合集成预测模型包括三个模块: 数据分解模块, 预测模型模块, 数据集成模块. 数据分解模块采用 WPD 将原始的硅单晶生长实验数据分解为若干子序列, 目的在于减少数据中的非平稳性和随机噪声; 预测模型模块通过 ELM 和 LSTM 网络分别对近似 (低频) 子序列和细节 (高频) 子序列进行晶体直径离线建模; 数据集成模块则利用 WPD 重构各个子序列晶体直径预测模型的预测结果, 以得到晶体直径的整体预测输出. 另外, 在基于混合集成预测模型的晶体直径自适应 NMPC 中, 考虑到晶体直径混合集成模型可能存在模型失配问题以及目标函数求解难的问题, 采用了 ALO 算法在线更新预测模型参数并获取满足约束的最优加热器功率控制量. 最后, 通过工程实验数据仿真验证了所提方法在硅单晶直径预测建模和控制方面的可行性和先进性.

1 数据驱动晶体直径预测建模

Cz 法硅单晶生长过程是一个非线性、大滞后的慢时变动态过程, 单晶炉内的高温、多相、多场耦合环境使得内部反应状态难以检测, 因此晶体生长机理不清, 基于机理模型的硅单晶直径控制难以实施. 为此, 本文以单晶炉制备硅单晶的历史实验数据为基础, 采用如下非线性自回归滑动平均 (Nonlinear autoregressive moving average with exogenous inputs, NARMAX) 模型来描述加热器功率与晶体直径之间的关系:

$$y(k) = f_{NARMAX}(u(k-d), \dots, u(k-d-n_u), y(k-1), \dots, y(k-n_y)) \quad (1)$$

其中, $f_{NARMAX}(\cdot)$ 为未知的非线性映射函数; d 为加热器功率与晶体直径之间的时滞阶次, n_u 和 n_y 分别是模型输入输出阶次, $y(k)$ 和 $u(k)$ 分别表示 k 时刻系统的晶体直径输出和加热器功率控制输入.

对于式 (1) 所表述的 Cz 法硅单晶生长系统, 本文采用混合集成建模方法建立其模型. 考虑到混合集成建模方法是基于“分而治之”原理, 同时为了综合不同模型的优点, 基于历史加热器功率输入数据和晶体直径输出数据, 我们采用机器学习方法 ELM 和深度学习 LSTM 建立晶体直径预测模型. 其中, ELM 方法具有快速的训练和预测速度^[26-27], 能够节省晶体直径建模成本, 而 LSTM 方法可以学习长期依赖的信息, 能够抓取数据序列中的时间特征, 非常适合处理具有非线性特征的数据序列回归

问题^[28-29]. 具体的晶体直径混合集成建模流程将在第 1.2 节给出.

1.1 晶体直径预测模型结构辨识

在硅单晶生长过程控制中, 建立准确的晶体直径预测模型是实现其控制的基础^[3]. 为了准确辨识式 (1) 中的时滞 d , 本文提出了一种基于互相关函数的时滞优化估计方法, 其中互相关系数的估计如下式:

$$\hat{\phi}_{uy}(d) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{(u_{i-d} - \mu_u)(y_i - \mu_y)}{s_u s_y} \right| \quad (2)$$

其中, u 和 y 可以分别表示历史的加热器功率数据序列和晶体直径数据序列, μ_u 、 μ_y 和 s_u 、 s_y 分别是加热器功率和晶体直径数据的均值和标准差.

根据互相关系数式 (2), 可以将时滞估计问题转化为如下的优化问题:

$$\begin{cases} \max_d g(y, u) = f(y, u(i-d)) \\ \text{s.t. } d_{\min} \leq d \leq d_{\max} \end{cases} \quad (3)$$

其中, $f(\cdot)$ 表示互相关系数 $\hat{\phi}_{uy}(d)$. d_{\min} 为时滞阶次的下界, d_{\max} 为时滞阶次的上界.

基于上述时滞优化问题式 (3), 本文采用 ALO 算法进行时滞阶次寻优, 并将式 (3) 作为待优化的适应度函数, 从而确定式 (1) 中的时滞阶次 d .

在辨识获得时滞阶次 d 的前提下, 本文提出了一种基于 Lipschitz 商准则^[30] 和模型拟合优度^[31] 的晶体直径模型阶次辨识方法. 所提辨识方法不仅可以保证模型估计精度, 而且无需模型阶次的先验知识, 不需要经历复杂优化过程且容易实现. 针对式 (1), 将其写成更一般的形式, 如下

$$y = f_{NARMAX}(x_1, x_2, \dots, x_m) \quad (4)$$

其中, m 是变量个数且 $m = n_u + n_y + 1$. $X = [x_1, x_2, \dots, x_m]^T$ 表示 $f_{NARMAX}(\cdot)$ 的输入向量, 即历史的加热器功率与晶体直径数据.

定义 Lipschitz 商如下

$$q_{i,j} = \frac{|y(i) - y(j)|}{|x(i) - x(j)|}, i \neq j \quad (5)$$

其中, $|x(i) - x(j)|$ 表示两个输入向量之间的距离, 而 $|y(i) - y(j)|$ 则表示晶体直径输出 $f_{NARMAX}(x(i))$ 与 $f_{NARMAX}(x(j))$ 之间的距离. 将 Lipschitz 商式 (5) 展开可得

$$q_{i,j}^{(m)} = \frac{|y(i) - y(j)|}{\sqrt{(x_1(i) - x_1(j))^2 + \dots + (x_m(i) - x_m(j))^2}} \quad (6)$$

其中, $q_{i,j}^{(m)}$ 的上标 m 表示式 (3) 中的变量个数. 根据参考文献 [32] 可知, $q_{i,j}^{(m)}$ 可以被用来表示非线性系统的输入是否遗漏了必要变量或者加入了多余变量. 当一个必要的输入变量 x_m 被遗漏时, Lipschitz 商 $q_{i,j}^{(m-1)}$ 将会远远大于 $q_{i,j}^{(m)}$, 甚至表现为无穷大. 相反地, 当一个多余变量 x_{m+1} 被加入时, Lipschitz 商 $q_{i,j}^{(m+1)}$ 将会略小于或者大于 $q_{i,j}^{(m)}$, 差别不会很明显. 为了减小噪声对辨识结果的影响, 本文采用指标式 (7) 来选择晶体直径模型 $f_{NARMAX}(\cdot)$ 中的变量个数, 即

$$q^{(m)} = \left(\prod_{i=1}^p \sqrt{m} q^m(i) \right)^{\frac{1}{p}} \quad (7)$$

其中, $q^m(i)$ 是所有的 Lipschitz 商 $q_{i,j}^{(m)}$ 中第 i -th 的最大值, 而 p 是一个正数, 通常满足 $p \in [0.01N, 0.02N]$. 然后, 定义停止准则评价指标 $\Gamma(m+1, m)$ 如下:

$$\Gamma(m+1, m) = \frac{|q^{(m+1)} - q^{(m)}|}{\max(1, |q^{(m)}|)} < \varepsilon \quad (8)$$

其中, 本文将阈值 ε 取为 0.01. 通过 Lipschitz 商准则, 可以很准确地得到最佳变量个数 m , 再结合晶体直径模型拟合优度式 (9), 将拟合优度最高值确定为最优晶体直径模型阶次组合, 从而实现晶体直径系统式 (1) 的输入输出阶次辨识.

$$\text{Fit} = 100\% \times \left(1 - \frac{\|y - \hat{y}\|}{\|y\|} \right) \quad (9)$$

其中, y 是晶体直径实际值, \hat{y} 是 ELM 网络的晶体直径预测值.

1.2 基于 WPD-ELM-LSTM 的混合集成预测模型

针对硅单晶生长过程机理建模难问题, 采用数据驱动建模方法可以直接使用传感器获取的测量数据, 而无需显式建模晶体生长系统内部的状态, 减

少了晶体直径建模成本和时间. 混合集成建模方法是基于“分而治之”原理, 利用多个子模型进行预测建模, 从而在预测中产生协同效应, 克服了单一模型预测性能不佳的缺点. 因此, 本文提出了一种新颖的 WPD-ELM-LSTM 混合集成建模方法, 并将其应用于硅单晶直径建模, 整体的建模框架, 如图 2 所示.

晶体直径混合集成建模过程主要包括两个阶段. 在第一阶段, 由于单晶炉内复杂的生长环境, 各种不确定性因素导致采集的晶体直径数据呈现出非平稳、非线性的特征, 所以本文选用应用广泛且可靠的 WPD 信号分解方法, 将原始晶体直径数据序列分解成不同的低频和高频平稳信号, 目的在于减少非平稳性、非线性特征以及满足基于“分而治之”原理对不同频率信号进行预测建模的需求. 通常, 低频子序列和高频子序列分别被称为近似子序列和细节子序列. 与低频分量相比, 高频分量具有较大的随机性, 包含了不确定性的随机噪声, 因此本文去除了最高频子序列, 从而减少了随机噪声对预测性能的影响. 在第二阶段, 首先将获得的子序列划分为训练集和测试集; 其次, 由于近似子序列包含了原始晶体直径数据固有的本征信息, 所以我们采用建模速度快和泛化能力强的 ELM 进行预测建模; 细节子序列是一个高频的非线性信号序列, 为了更准确地捕获晶体直径数据序列中的时间特征信息, 我们使用了具有时间记忆功能的 LSTM 网络进行预测建模. 然而, ELM 和 LSTM 网络的隐含节点个数对预测性能有较大的影响, 为了得到最佳的晶体直径预测效果, 采用 ALO 算法进行隐含节点个数寻优, 并将晶体直径预测值与实际值之间的均方根误差作为待优化的适应度函数, 从而获取最优节点个数. 最后, 通过 WPD 重构所有子序列预测模型的预测结果, 以得到晶体直径的整体预测输出. 与传统单一预测建模方法相比, 混合集成建模方法能

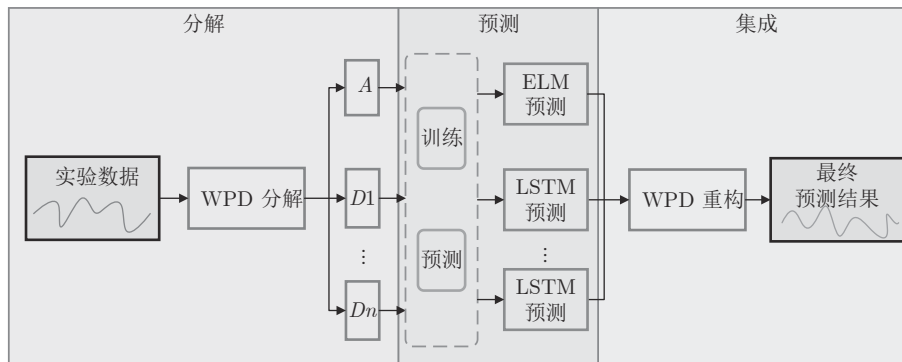


图 2 基于 WPD-ELM-LSTM 的混合集成建模框架

Fig.2 Hybrid integrated modeling framework based on WPD-ELM-LSTM

够捕捉原始数据的内在特征, 学习历史数据之间的相互依赖关系, 从而有效地提高整体预测能力.

2 晶体直径自适应非线性预测控制

等径阶段的晶体直径控制是 Cz 法硅单晶生长过程的核心, 精准的直径控制, 一方面有利于减小生长界面的热应力波动, 避免位错缺陷生成的可能性, 另一方面可以提高后续晶体加工利用率^[33]. 目前, 在 Cz 法硅单晶实际生产线上, 普遍采用的是 PID 控制. 然而, 非线性、时变性和大滞后特性的存在, 不但使得传统的 PID 控制难以实现精确的直径跟踪控制和约束处理, 而且容易降低晶体生长系统的可靠性. 因此, 为了提高硅单晶直径控制性能, 所提自适应非线性预测控制方法能够很好地解决这些潜在的问题.

2.1 晶体直径预测控制结构

晶体直径预测控制的控制性能依赖于所建混合集成预测模型的预测性能, 当被控晶体生长系统参数发生变化时, 会存在模型失配问题, 此时如果仍采用原始晶体直径预测模型的非线性预测控制器, 会导致晶体直径控制性能变差甚至不稳定, 甚至引发晶体生长失败. 因此, 为了使晶体直径预测控制系统仍能达到控制目标要求, 本文提出了一种基于 ALO 算法优化求解的自适应 NMPC 方法, 并通过 ALO 算法调整晶体直径混合集成预测模型的参数, 使其与晶体生长过程保持一致. 基于 WPD-ELM-LSTM 的晶体直径自适应 NMPC 结构, 如图 3 所示, 主要包括: 期望晶体直径参考轨迹、晶体直径 WPD-ELM-LSTM 预测模型、模型参数自适应更新、基于 ALO 算法的滚动优化、反馈校正等几个部分.

晶体直径 WPD-ELM-LSTM 预测模型: 根据

式 (1) 所描述的晶体直径非线性系统, 建立其相应的 WPD-ELM-LSTM 混合集成预测模型. 预测模型的训练输入数据集由历史加热器功率和晶体直径数据组成, 即 $X = \{u(k-d), \dots, u(k-d-n_u), y(k), \dots, y(k-n_y)\}$, 输出数据集为历史晶体直径 $Y = \{y(k)\}$, 晶体直径系统的时滞阶次 d 、模型阶次 n_u 和 n_y 可由第 1.1 节所提模型辨识方法确定. 晶体直径 WPD-ELM-LSTM 预测模型可由第 1.2 节所提的建模方法建立. 所建立的晶体直径混合集成预测模型的目的是为求解晶体直径预测控制优化问题提供可靠的基础.

根据建立的晶体直径混合集成预测模型, 从 k 时刻起利用系统的当前信息和未来的加热器功率控制输入, 可以预测出未来的晶体直径预测值 y_m , 然后经过在线反馈校正为滚动优化问题提供所需的未来晶体直径控制预测输出 y_p .

基于 ALO 算法的滚动优化: 本文所设计的晶体直径非线性预测控制是一种有限时域内的滚动优化过程. 定义 k 时刻的加热器功率控制输入信号为 $U = [u(k), u(k+1), \dots, u(k+N-1)]^T$. 在采样时刻 k , 优化式 (10) 所示的性能指标.

$$\begin{cases} \min J(u) = \sum_{j=1}^{N_p} [y_r(k+j) - y_p(k+j)]^2 + \\ \sum_{j=1}^{N_c} r[\Delta u(k+j-1)]^2 \\ \text{s.t. } \Delta u_{\min} \leq \Delta u \leq \Delta u_{\max}, \\ u_{\min} \leq u \leq u_{\max} \end{cases} \quad (10)$$

其中, N_p 为预测时域, N_c 为控制时域, $N_p \geq N_c$, r 为控制权系数. $\Delta u(k) = u(k) - u(k-1)$; $y_p(k+j)$ 是第 j 步晶体直径混合集成预测模型的预测输出; $y_r(k+j)$ 是第 j 步晶体直径参考输出, 其由式 (11)

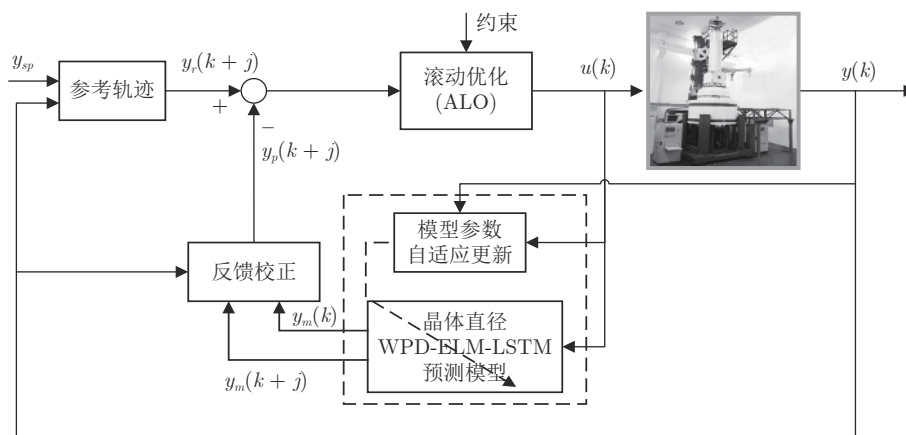


图 3 基于 WPD-ELM-LSTM 的晶体直径自适应 NMPC 结构

Fig. 3 Crystal diameter adaptive NMPC structure based on WPD-ELM-LSTM

所示的参考轨迹给出。

晶体直径自适应 NMPC 的核心是式 (10) 所示非线性约束优化问题, 由于建立的 WPD-ELM-LSTM 混合集成预测模型相对复杂, 难以采用传统优化算法进行求解. 而 ALO 算法是一种模拟蚁狮与蚂蚁之间狩猎行为及相互作用机制的全局优化搜索方法, 具有潜在的并行性和鲁棒性. 此外, ALO 算法是一种无梯度的算法, 它把优化问题看作一个黑盒, 很容易应用于实际复杂工业优化问题的求解, 算法的具体实现过程, 可以参考文献 [25]. 本文正是基于 ALO 算法的优点, 通过求解晶体直径预测控制性能指标函数式 (10), 获得一组最优的加热器功率控制序列 U , 但仅对硅单晶生长系统施加第一个控制量 $u^*(k)$.

参考轨迹: 针对上述晶体直径自适应非线性预测控制过程, 为了把当前晶体生长系统输出的晶体直径 $y(k)$ 平滑地过渡到真实设定值 y_{sp} , 定义 $y_r(k+j)$ 为第 j 步的晶体直径参考输出, 即

$$\begin{cases} y_r(k) = y(k) \\ y_r(k+j) = \eta y_r(k+j-1) + (1-\eta)y_{sp} \end{cases} \quad (11)$$

其中, η ($0 < \eta < 1$) 为柔化系数, 用以调整系统的鲁棒性和收敛性.

反馈校正: 为了克服所建立的晶体直径混合集成预测模型与晶体生长被控系统之间的模型失配和外部干扰对控制系统的影响, 通过反馈校正对晶体直径预测输出补偿, 即

$$\begin{cases} e(k) = y(k) - y_m(k) \\ y_p(k+j) = y_m(k+j) + h \times e(k) \end{cases} \quad (12)$$

其中, h 为补偿系数, y_m 是晶体直径混合集成预测模型 WPD-ELM-LSTM 的预测输出, y_p 是经过反馈校正的晶体直径预测输出.

2.2 模型参数自适应更新

Cz 法硅单晶生长过程存在各种不确定性因素 (熔体对流、氩气流动等), 使得所建立的晶体直径混合集成预测模型难免与实际系统存在偏差. 另外, 当实际晶体生长过程的结构参数发生变化造成模型失配时, 会导致晶体直径预测模型的输出和实际输出之间的误差增大, 因而难以获得满意的晶体直径预测控制性能. 为此, 进一步引入模型参数自适应估计方法^[34], 通过最小化晶体直径混合预测模型输出和实际输出之间的误差, 在线调整预测模型 WPD-ELM-LSTM 的参数集. 考虑到近似子序列的 ELM 预测模型包含着晶体直径固有的本征信息, 且方便在线实施模型参数估计, 所以本文主要调整

ELM 网络的输入权值 W 和偏置 b , 以保证晶体直径混合集成预测模型的准确性. WPD-ELM-LSTM 模型参数估计的性能指标, 如式 (13) 所示:

$$\begin{cases} \min_{\theta} J_{\theta} = [y(k) - \hat{y}_{\theta}(k)]^2 + \psi \sum_{m=1}^{n_{\theta}} (\Delta\theta_m(k))^2 \\ \text{s.t. } \hat{y}_{\theta}(k) = \hat{y}_{\theta_{ELM}}(k) + \hat{y}_{LSTM}(k) \\ \Delta\theta_m(k) = \theta_m(k) - \theta_m(k-1) \end{cases} \quad (13)$$

其中, θ 为 ELM 网络中的参数 $\{W, b\}$, $y(k)$ 和 $\hat{y}_{\theta}(k)$ 分别表示 k 时刻晶体直径系统的实际输出值和晶体直径预测模型 WPD-ELM-LSTM 的预测值; ψ ($\psi > 0$) 为参数变量权系数, n_{θ} 表示模型参数个数; $\hat{y}_{\theta_{ELM}}(k)$ 和 $\hat{y}_{LSTM}(k)$ 分别表示晶体直径近似子序列和细节子序列的预测值.

针对上述混合集成预测模型参数估计问题, 本文将模型参数估计性能指标函数式 (13) 作为 ALO 算法优化的适应度函数, 当满足迭代终止条件时, 即可求得当前 k 时刻自适应调整后的 WPD-ELM-LSTM 预测模型参数值.

2.3 实现步骤

基于 WPD-ELM-LSTM 混合集成预测模型的晶体直径自适应 NMPC 算法的实现步骤如下:

- 1) 设定合适的控制参数包括预测时域 N_p 、控制时域 N_c 、柔化系数 η 、补偿系数 h 、控制加权系数 r 、参数变量权系数 ψ 以及 ALO 算法的种群个数 Num , 最大迭代次数 Max_{iter} ;
- 2) 离线训练晶体直径混合集成预测模型 WPD-ELM-LSTM;
- 3) 设定晶体直径的期望值 y_{sp} , 并按式 (11) 得到晶体直径参考轨迹 y_r ;
- 4) 计算晶体直径混合集成预测模型的预测输出值 $y_m(k)$ 以及实际系统直径输出值 $y(k)$;
- 5) 根据 ALO 算法求解式 (13) 非线性优化问题, 以得到最优参数集 $\hat{\theta}$, 从而更新晶体直径预测模型 WPD-ELM-LSTM;
- 6) 利用当前时刻晶体直径预测误差 $e(k)$ 和未来时刻晶体直径预测值 $y_m(k+j)$, 经在线反馈校正式 (12) 得到晶体直径预测输出 $y_p(k+j)$;
- 7) 基于 ALO 算法滚动优化求解晶体直径预测控制性能指标式 (10), 并获得一组最优的加热器功率控制量序列 $U(k)$;
- 8) 将最优加热器功率控制序列的第 1 个控制量 $u^*(k)$ 作用于当前硅单晶生长系统;
- 9) 返回步骤 4), 不断进行迭代求解.

3 工业数据实验与分析

为了验证本文所提方法在实际 Cz 法硅单晶生长控制过程中的有效性, 本文以晶体生长设备及系统集成国家地方联合工程研究中心的 TDR-150 型号的单晶炉为实验平台, 图 4 是 Cz 法单晶炉生长设备及直径测量系统^[35]. 从图 4 可知, 硅单晶是由多晶硅原料在高温、磁场等作用下经过一系列晶体生长工艺步骤所获得. 晶体直径的动态变化是通过 CCD 相机进行实时监测. 实验数据采集过程来源于 8 英寸硅单晶生长实验, 实验条件分别为: 多晶硅原料为 180 kg, 炉压为 20 Torr, 磁场强度为 2 000 高斯, 晶体旋转速度为 10 r/min, 坩埚旋转速度为 10 r/min, 氩气流速为 100 L/min.

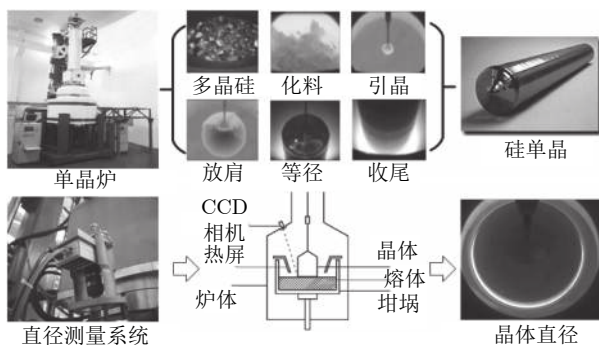


图 4 Cz 法硅单晶生长过程和晶体直径测量系统

Fig.4 Cz silicon single crystal growth process and crystal diameter measurement system

3.1 模型建立

基于上述 TDR-150 单晶炉控制 8 英寸硅单晶现场数据库收集到的 2017 年 2 月 26 日至 2017 年 3 月 2 日的历史实验数据进行预测建模和直径控制. 由于硅单晶等径阶段的晶体生长控制不仅影响后期晶体加工的利用率, 还决定了硅单晶品质的好坏, 所以本文主要利用硅单晶等径阶段的晶体直径和加热器功率的历史测量数据, 整个硅单晶等径阶段总共历时 27 小时左右, 采样时间为 2 s. 考虑到后续晶体直径建模的计算量, 我们从等径阶段某个时刻起间隔 5 个数据点连续选取 5 000 组实验数据, 该数据集的数据记录时间间隔为 10 s, 原始实验数据如图 5 所示. 选取前 3 800 组作为训练数据集, 后 1 200 组作为测试数据集, 用于验证模型拟合效果. 表 1 是实验数据集的统计描述, 包括总样本数, 平均值 (Mean), 最大值 (Max), 最小值 (Min) 和标准差 (Std).

基于上述等径阶段的历史实验数据, 并考虑到

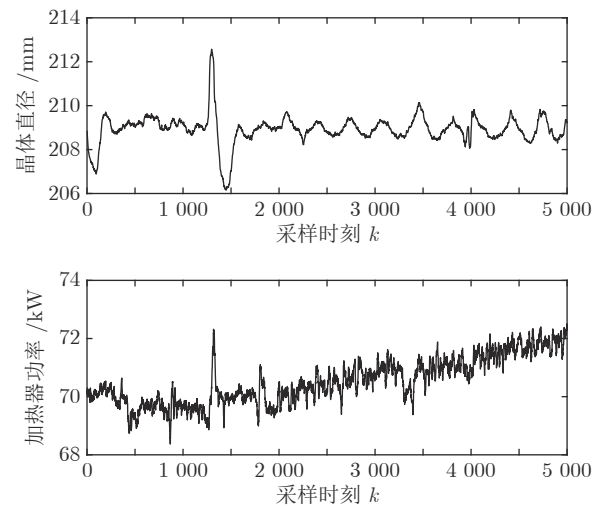


图 5 原始晶体直径与加热器功率实验数据

Fig.5 Experimental data of raw crystal diameter and heater power

表 1 原始实验数据集的统计特性

Table 1 Statistical characteristics of the raw experimental data set

数据集	数量	Mean	Max	Min	Std
晶体直径 (mm)					
总样本	5 000	208.92	212.57	206.16	0.66
训练集	3 800	208.92	212.57	206.16	0.72
测试集	1 200	208.92	209.83	208.06	0.41
加热器功率 (kW)					
总样本	5 000	70.52	72.51	68.37	0.80
训练集	3 800	70.20	72.32	68.37	0.59
测试集	1 200	71.56	72.51	70.44	0.40

所提混合集成模型的复杂度和计算量, 采用 WPD 信号分解方法对晶体直径原始数据进行 2 层分解, 图 6 是分解之后的不同子序列结果.

从图 6 中可以明显看出, 近似子序列具有晶体直径原始数据的固有所征信息特征, 代表了晶体直径数据序列的整体趋势, 而细节子序列具有高频的非线性特征反映了晶体直径数据局部波动趋势. 由于高频分量具有较大的随机性, 通常包含了不确定性的测量噪声, 所以为了保证晶体直径预测模型的准确性, 本文将具有最高频的细节子序列 3 移除, 利用剩余的子序列进行预测建模.

根据晶体生长过程的先验知识, 滞后时间 t 一般在 5 min ~ 25 min. 采用本文所提出的模型结构辨识方法, 首先对晶体直径模型式 (1) 中的时滞阶次进行辨识. ALO 算法的参数设置为: 种群数 $Num = 30$, 最大迭代次数 $Max_{iter} = 500$, 时滞阶次 d 范围为 30 ~ 150.

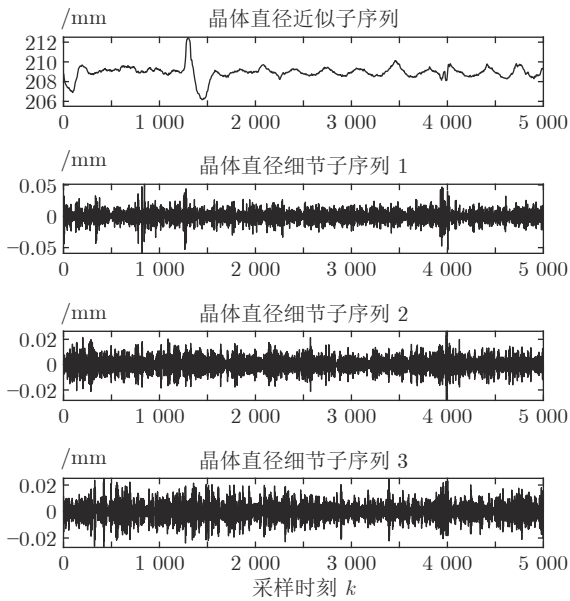


图 6 晶体直径原始数据分解结果

Fig. 6 Crystal diameter raw data decomposition results

由于 ALO 算法的初始种群位置是随机生成的, 为了说明所提时滞辨识方法的准确性和可靠性, 图 7 是 30 次独立运行后的时滞阶次寻优结果. 可知, 30 次独立寻优的时滞阶次未发生明显变化, 说明了所辨识的时滞是准确且可靠的, 同时也说明了

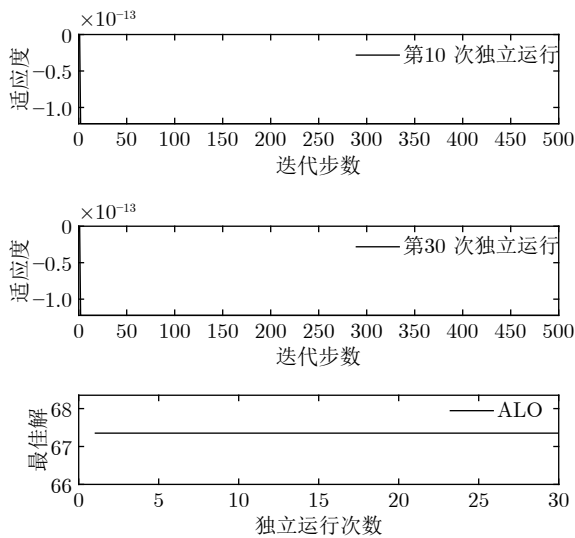
图 7 时滞阶次 d 辨识结果Fig. 7 Time delay order d identification results

表 2 基于 Lipschitz 商准则的输入变量个数辨识结果

Table 2 Identification results of the number of input variables based on Lipschitz quotient criterion

$\Gamma(m+1, m)$	$\Gamma(4, 3)$	$\Gamma(5, 4)$	$\Gamma(6, 5)$	$\Gamma(7, 6)$	$\Gamma(8, 7)$	$\Gamma(9, 8)$	$\Gamma(10, 9)$	$\Gamma(11, 10)$
指标值	0.0145	0.0105	0.0088	0.0071	0.0141	0.0071	0.0033	0.0003

ALO 算法具有很强的全局搜索能力. 通过四舍五入原则确定时滞 $d = 67$, 即滞后时间 $t = 670$ s, 约为 11.17 min.

然后, 针对式 (1) 中的模型输入输出阶次, 假设最高阶次为 5, 采用所提模型阶次辨识方法, 初步得到表 2 中基于 Lipschitz 商准则的不同输入变量个数的评价指标值 Γ . 根据停止准则评价指标 $\Gamma(m+1, m)$, 可以确定最佳的输入变量个数为 $m = n_u + n_y + 1 = 5$, 即 $n_u + n_y = 4$. 最后, 根据模型拟合优度方法可以得到不同阶次组合下的拟合优度值, 如表 3 所示. 依据最优拟合优度值可以确定输入阶次 $n_u = 1$, 输出阶次 $n_y = 3$.

3.2 预测性能

为了验证本文所提的晶体直径混合集成预测模型 WPD-ELM-LSTM 的有效性, 采用三种常用的统计标准来评估直径预测性能, 如表 4 所示.

表 5 是不同晶体直径预测方法的参数设置. 图 8 是所提建模方法与 ELM、LSTM、WPD-ELM 和 WPD-LSTM 方法的晶体直径预测效果以及相应的预测性能评价指标对比. 为了准确评价所提预测建模方法的有效性, 表 6 中比较了不同预测模型的预测性能指标. 本文所有的仿真环境配置如下: 系统 Windows 10, 内存 16 GB, 处理器 Intel(R) Core(TM) i5-4590, 仿真软件 MATLAB 2018b.

根据图 8 所示, 所提的混合集成预测模型 WPD-ELM-LSTM 的晶体直径预测准确性优于其他预测模型 (ELM、LSTM、WPD-ELM 和 WPD-LSTM). 在表 6 中, 与其他预测模型相比, 所提晶体直径预测模型的 MAE 指标分别降低了 51.27%, 89.07%, 44.19% 和 77.73%; MAPE 指标下降了 51.06%, 89.05%, 43.90% 和 77.67%; RMSE 指标减少了 51.55%, 88.95%, 45.18% 和 80.06%. 此外, 所提混合集成预测模型 WPD-ELM-LSTM 的晶体直径预测值与实际值有更多的相似性, 这是因为混合集成预测模型在预测过程中产生了协同效应, 提高了整体预测结果的准确性. 总之, 所提晶体直径混合集成预测模型 WPD-ELM-LSTM 提高了单一 ELM 或 LSTM 模型的晶体直径预测性能, 从而显示了强大的“分解-集成”框架的学习预测能力.

为了描述上述不同晶体直径预测模型在模型训

表 3 不同阶次组合的模型拟合优度结果

Table 3 Goodness-of-fit of the models with different order combinations

不同阶次组合 (n_u, n_y)	(1,3)	(2,2)	(3,1)
模型拟合优度值Fit	99.9132	99.9085	99.9090

表 4 模型性能评价指标

Table 4 Model performance evaluation index

指标	定义	公式
MAE	平均绝对值误差	$MAE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(i) - \hat{f}(i) $
MAPE	平均绝对百分比误差	$MAPE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left \frac{f(i) - \hat{f}(i)}{f(i)} \right \times 100\%$
RMSE	均方根误差	$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (f(i) - \hat{f}(i))^2}$

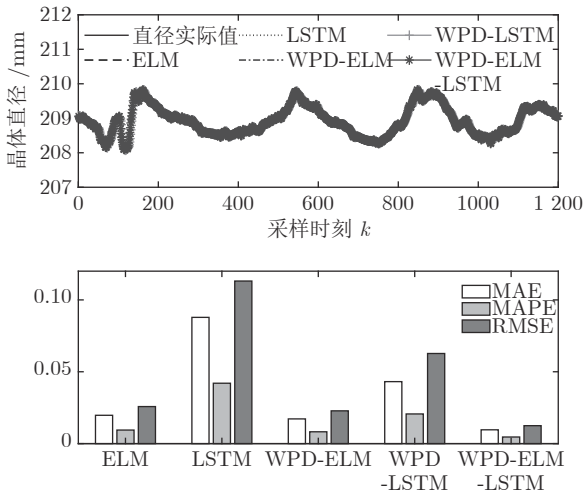


图 8 不同建模方法的晶体直径预测效果及评价指标对比
Fig.8 Comparison of prediction effect and evaluation index of crystal diameter by different modeling methods

练阶段的计算量, 表 7 是不同晶体直径预测模型的训练计算时间, 即离线建模时间. 可以看出集成模型 WPD-ELM 和 WPD-LSTM 的训练计算时间分别高于各自单一模型 ELM 和 LSTM, 而在单一模

型中 ELM 的训练计算时间小于 LSTM, 从而说明了 ELM 具有快速训练模型的优点. 正是基于 ELM 的建模优点, 所以所提 WPD-ELM-LSTM 的训练计算时间有所减少. 总之, 由于集成模型是由多个子模型进行建模, 必然会牺牲一定的建模时间. 然而在实际应用中晶体直径离线建模的计算量很少被优先考虑. 另一方面, 随着硬件计算能力的提高以及并行计算技术的应用, 所提混合集成建模方法的计算量将会有所减少.

3.3 控制测试

为了验证本文所提晶体直径混合集成预测模型 WPD-ELM-LSTM 和 ALO 优化求解方法在晶体直径自适应 NMPC 过程中的有效性. 选取预测时域 N_p 为 5, 控制时域 N_c 为 3, 柔化系数 η 为 0.2, 控制加权系数 r 为 0.3, 补偿系数 h 为 0.5, 控制量约束 $\Delta u_{\min} = -2, \Delta u_{\max} = 2, u_{\min} = 69, u_{\max} = 73$, 控制量 u 的单位是 kW. WPD-ELM-LSTM 模型参数估计器的优化参数变量权系数 $\psi = 0.03$. ALO 的参数设置为种群个数 $Num = 30$, 最大迭代次数 $Max_{iter} = 300$. 根据晶体生长工艺要求, 晶体生长控制目标为: 晶体直径 y 变化范围 207 mm ~ 210 mm 加热器功率 u 变化范围 69 kW ~ 73 kW. 由于实际硅单晶生长过程中会存在很多不确定性干扰因素, 为了模拟检测系统在测量过程中所产生的随机误差, 同时为了验证所提控制方法的鲁棒性, 所以本文在单晶炉系统的输出中加入均值为 0, 方差 0.01 的高斯随机噪声, 用以模拟传感器数据采集混入的高斯噪声.

首先, 测试所提混合集成建模方法下晶体直径自适应 NMPC 的跟踪性能, 选取晶体直径的初始设定值 y_{sp} 为 208.5 mm, 在采样时刻 150 时改变晶体直径设定值 y_{sp} 为 209 mm, 得到晶体直径的设定值跟踪曲线, 如图 9 所示. 在外部干扰的情况下, 所提自适应 NMPC 方法和常规 NMPC 方法的晶体直径控制输出均在直径设定点附近轻微波动、超调较小, 且各自的加热器功率控制变量也在约束的范围之内. 然而, 在直径跟踪精度和快速性方面, 所提

表 5 不同预测方法的参数设置

Table 5 Parameter setting of different prediction methods

预测方法	参数设置
ELM	20 个隐含节点数, 激活函数 sigmoid
LSTM	200 个隐含节点数, 学习率 0.005, 训练轮次 200
WPD-ELM	20 个隐含节点数, 激活函数 sigmoid
WPD-LSTM	200 个隐含节点数, 学习率 0.005, 训练轮次 200
WPD-ELM-LSTM	ELM: 27 个隐含节点数, 激活函数 sigmoid; LSTM: 185 个隐含节点数, 学习率 0.005, 训练轮次 200

表 6 不同预测模型的晶体直径预测指标

Table 6 Prediction index of crystal diameter based on different prediction models

模型	MAE (mm)	MAPE (%)	RMSE (mm)
ELM	0.0197	0.0094	0.0258
LSTM	0.0878	0.0420	0.1131
WPD-ELM	0.0172	0.0082	0.0228
WPD-LSTM	0.0431	0.0206	0.0627
WPD-ELM-LSTM	0.0096	0.0046	0.0125

表 7 不同晶体直径预测模型的训练计算时间

Table 7 Training calculation time of different crystal diameter prediction models

预测模型	训练计算时间 (s)
ELM	0.0828
LSTM	304.4786
WPD-ELM	0.2752
WPD-LSTM	972.6920
WPD-ELM-LSTM	601.1670

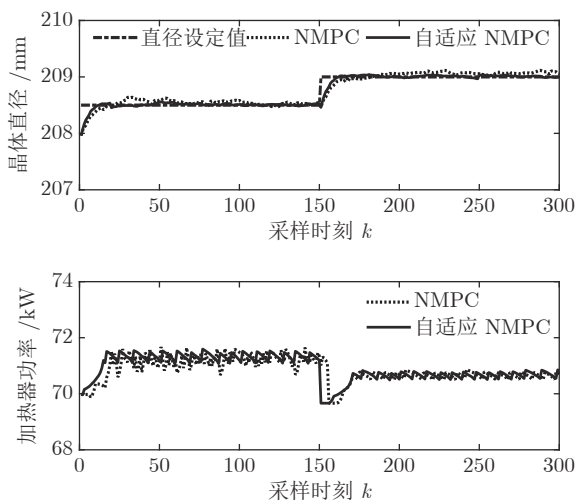


图 9 自适应 NMPC 和常规 NMPC 的晶体直径设定值跟踪效果

Fig.9 Crystal diameter setpoint tracking effect of adaptive NMPC and conventional NMPC

基于混合集成预测模型 WPD-ELM-LSTM 的晶体直径自适应 NMPC 控制性能优于常规 NMPC, 而且加热器功率控制变量的抖动幅度相对较小. 因此, 自适应 NMPC 方法更适合硅单晶生长过程中的晶体直径控制.

然后, 验证所提晶体直径自适应 NMPC 在 ALO 优化求解下的晶体直径控制性能指标 J 收敛性、WPD-ELM-LSTM 预测模型参数估计性能指标 J_{θ} 收敛性以及晶体直径预测控制的实时性. 根据上述图 9 晶体直径设定值跟踪仿真结果, 可以得到晶

体直径自适应 NMPC 在单步计算过程中的控制性能指标 J 和模型参数估计的性能指标 J_{θ} 收敛曲线, 如图 10 所示. 从中可以看出, 晶体直径控制性能指标 J 基本在 160 次迭代以后, 进入稳定收敛状态, 而晶体直径预测模型参数估计的性能指标 J_{θ} 在第 150 次迭代以后, 也能够满足稳定收敛. 因此, 采用 ALO 算法求解自适应 NMPC 可以实现晶体直径的有效控制. 此外, 为了比较晶体直径自适应 NMPC 在直径设定值跟踪控制中的实时性, 表 8 是不同预测模型下晶体直径预测控制计算时间, 即平均控制量更新时间. 从表 8 中可以看出, 所提混合集成预测模型 WPD-ELM-LSTM 的自适应 NMPC 计算时间高于单一模型的计算时间, 这主要是由所建混合集成模型的复杂性导致. 另外, 基于混合集成预测模型 WPD-ELM-LSTM 的自适应 NMPC 计算时间高于常规 NMPC, 这主要是因为模型参数自适应更新过程比较耗时. 然而, 硅单晶生长是一个缓慢的时变动态过程, 通过加热器功率调节晶体直径存在较大的滞后时间 (5 min ~ 25 min), 且实际应用中对控制系统的实时性要求不高, 所以

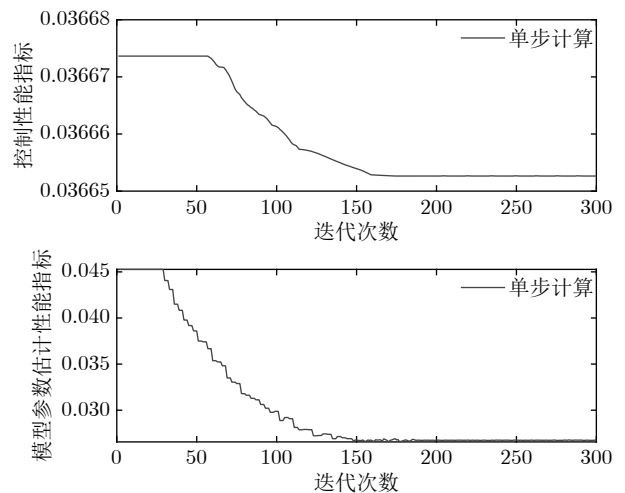


图 10 晶体直径控制性能指标和模型参数估计性能指标收敛曲线

Fig.10 Convergence curve of crystal diameter control performance index and model parameter estimation performance index

表 8 基于不同预测模型的晶体直径预测控制计算时间
Table 8 Calculation time of crystal diameter predictive control based on different prediction models

预测模型	平均控制量更新时间 (s)
ELM (常规NMPC)	0.4512
LSTM (常规NMPC)	0.4899
WPD-ELM-LSTM (常规NMPC)	0.6841
WPD-ELM-LSTM (自适应NMPC)	7.3113

7.3113 s 的平均控制量更新时间是可以接受的. 另外, 随着硬件计算能力的提高, 所提控制方法的计算时间将会有所减少.

最后, 由于硅单晶生长系统是一个慢时变动态过程, 且具有大滞后特点, 因此为了进一步验证所提控制方法的应用性能以及在时滞变化情况下的稳定性, 本文将晶体生长工业中常规 PID 控制方法与本文方法进行对比. 设置晶体直径的期望指标 y_{sp} 为 209 mm, 补偿系数 h 为 0.3, WPD-ELM-LSTM 模型参数估计器的优化参数变量的权系数 $\psi = 0.01$, 其他晶体直径控制参数与上述设置相同; PID 控制参数设置为 $k_p = 0.26$, $k_i = 0.01$, $k_d = 0.1$. 图 11 是原始时滞阶次下的所提控制方法与常规 PID 晶体直径控制结果对比. 图 12 是时滞阶次 d 增大 20% 和时滞阶次减少 20% 的晶体直径控制结果.

从图 11 可知, 所提控制方法和 PID 控制均能获得有效的晶体直径控制效果. 然而, 与常规 PID 方法相比, 所提控制方法的直径设定值跟踪和干扰抑制性能更好, 并且具有更好的动态跟踪和稳态性能. 另外, 在图 12 中, 当时滞阶次 d 发生变化时, 所提控制方法均能达到满意的晶体直径控制性能, 更好地显示了其具有更强的鲁棒性. 然而, 对于常规 PID 控制方法而言, 当时滞阶次 d 增大 20% 时, 晶体直径控制难以较好地跟踪直径设定值, 始终存在较大的控制误差, 出现晶体直径控制效果抖振现象; 当时滞阶次 d 减小 20% 时, 晶体直径跟踪控制能够逐渐收敛到直径设定值附近, 且受时滞阶次变化影响较小. 因此, 对于此类具有大滞

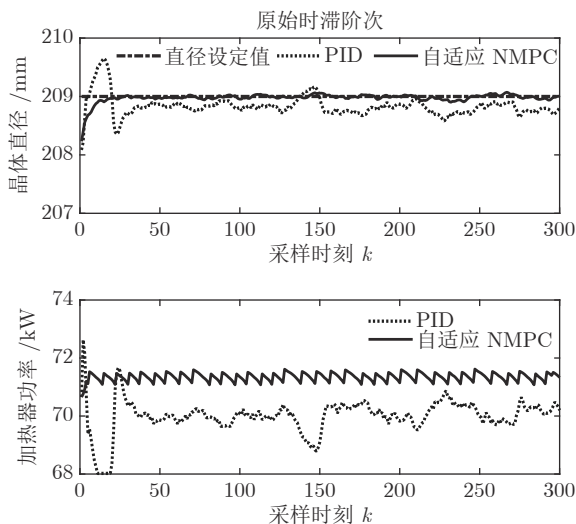


图 11 所提自适应 NMPC 与常规 PID 的晶体直径控制结果

Fig. 11 The crystal diameter control results of the proposed adaptive NMPC and conventional PID

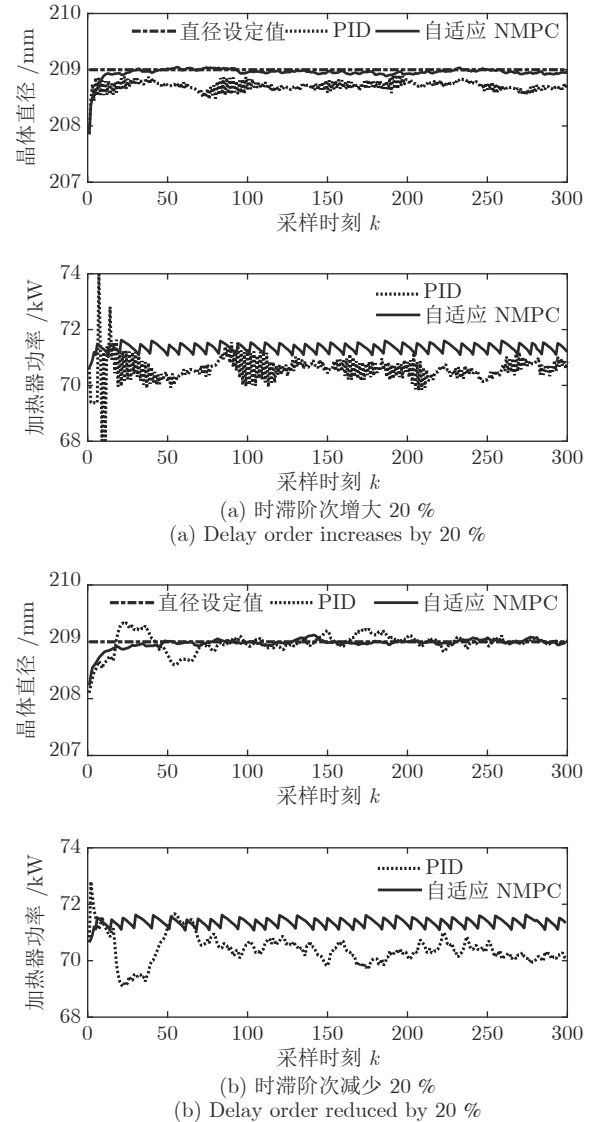


图 12 时滞阶次变化时所提自适应 NMPC 与常规 PID 的晶体直径控制结果

Fig. 12 Crystal diameter control results of adaptive NMPC and conventional PID for delay order variation

后、慢时变动态特性的 Cz 法硅单晶生长过程, 常规 PID 控制难免有其局限性, 而所提控制方法具有明显的晶体直径控制优点, 即准确、稳定的在线控制性能.

4 结论

Cz 法硅单晶生长过程的晶体直径控制一直是晶体生长领域研究的热点和难点. 针对这一问题, 本文提出了一种基于混合集成预测模型 WPD-ELM-LSTM 的晶体直径自适应 NMPC 方法. 通过基于互相关函数的时滞优化估计方法和基于 Lipschitz 商准则与模型拟合优度的模型阶次辨识

方法, 准确的辨识了晶体直径模型结构, 并在“分而治之”原理下构建了数据驱动的晶体直径混合集成模型, 为晶体直径预测控制提供了精确的预测模型. 同时, 为了解决晶体直径混合集成模型失配问题以及目标函数难以求解问题, 采用 ALO 算法设计了晶体直径自适应 NMPC 求解策略. 基于实际硅单晶生长实验数据的晶体直径建模与控制仿真实验表明, 所提混合集成预测模型 WPD-ELM-LSTM 比常规 ELM、LSTM、WPD-ELM 和 WPD-LSTM 模型表现出更好的晶体直径预测性能和泛化能力. 另外, 基于混合集成模型的硅单晶直径自适应 NMPC 算法不仅可以实现晶体直径的精准控制, 而且能够有效抑制外部扰动和时滞变化的影响, 具有良好的控制性能以及工程应用前景.

References

- Liu Ding. *Modeling and control of Czochralski silicon single crystal growth*. Beijing: Science Press, 2015, 1–252 (刘丁. 直拉硅单晶生长建模与控制. 北京: 科学出版社, 2015, 1–252)
- Duffar T. *Crystal Growth Processes Based on Capillarity: Czochralski, Floating Zone, Shaping and Crucible Techniques*. New York, NY, USA: Wiley, 2010, 115–199
- Liu Ding, Zhao Xiao-Guo, Zhao Yue. A review of growth process modeling and control of Czochralski silicon single crystal. *Control Theory & Applications*, 2017, **34**(1): 1–12 (刘丁, 赵小国, 赵跃. 直拉硅单晶生长过程建模与控制研究综述. 控制理论与应用, 2017, **34**(1): 1–12)
- Voronkov V V. Grown-in defects in silicon produced by agglomeration of vacancies and self-interstitials. *Journal of Crystal Growth*, 2008, **310**(7–9): 1307–1314
- Neubert M, Winkler J. Nonlinear model-based control of the Czochralski process IV: Feedforward control and its interpretation from the crystal grower's view. *Journal of Crystal Growth*, 2014, **404**(404): 210–222
- Satunkin G A. Mathematical modelling and control system design of Czochralski and liquid encapsulated Czochralski processes: the basic low order mathematical model. *Journal of Crystal Growth*, 1995, **154**(1–2): 172–188
- Michael A. Gevelber, George Stephanopoulos, Michael J, et al. Dynamics and control of the Czochralski process II. Objectives and control structure design. *Journal of Crystal Growth*, 1988, **91**(1–2): 199–217
- Zinnes A E, Nevis B E, Brandle C D. Automatic diameter control of Czochralski grown crystals. *Journal of Crystal Growth*, 1973, **19**(3): 187–192
- Zhongchao Zheng, Tatsuru Seto, Sanghong Kim, et al. A first-principle model of 300 mm Czochralski single-crystal Si production process for predicting crystal radius and crystal growth rate. *Journal of Crystal Growth*, 2018, **492**(15): 105–113
- Abdollahi J, Dubljevic S. Crystal radius and temperature regulation in Czochralski crystallization process. In: Proceedings of the 2013 American Control Conference. Washington, USA: IEEE, 2013.1626–1632
- Winkler J, Neubert M, Rudolph J. Nonlinear model-based control of the Czochralski process I: Motivation, modeling and feedback controller design. *Journal of Crystal Growth*, 2010, **312**(7): 1005–1018
- Winkler J, Neubert M, Rudolph J. Nonlinear model-based control of the Czochralski process II: Reconstruction of crystal radius and growth rate from the weighing signal. *Journal of Crystal Growth*, 2010, **312**(7): 1019–1028
- Rahmanpour P, Saelid S, Hovd M, et al. Nonlinear model predictive control of the czochralski process. *IFAC Papersonline*, 2016, **49**(20): 120–125
- Neubert M, Winkler J. Nonlinear model-based control of the Czochralski process III: Proper choice of manipulated variables and controller parameter scheduling. *Journal of Crystal Growth*, 2012, **360**(1): 3–11
- Liu D, Zhang N, Jiang L, et al. Nonlinear generalized predictive control of the crystal diameter in CZ-Si crystal growth process based on stacked sparse autoencoder. *IEEE Transactions on Control Systems Technology*, 2020, **28**(3): 1132–1139
- Hou Z, Chi R, Gao H. An overview of dynamic linearization based data-driven control and applications. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 2017, **64**(5): 4076–4090
- Zhou P, Song H D, Wang H, Chai T Y. Data-driven nonlinear subspace modeling for prediction and control of molten iron quality indices in blast furnace ironmaking. *IEEE Transactions on Control Systems Technology*, 2017, **25**(5): 1761–1774
- Ren Y, Zhang L, Suganthan P N. Ensemble classification and regression-recent developments, applications and future directions. *IEEE Computational Intelligence Magazine*, 2016, **11**(1): 41–53
- Zhang Y H, Wang H, Hu Z J, et al. A hybrid short-term wind speed forecasting model based on ensemble empirical mode decomposition and improved extreme learning machine. *Power System Protection and Control*, 2014, **42**(10): 29–34
- Wang S, Zhang N, Wu L, et al. Wind speed forecasting based on the hybrid ensemble empirical mode decomposition and GA-BP neural network method. *Renewable Energy*, 2016, **94**: 629–636
- Mayne, David Q. Model predictive control: Recent developments and future promise. *Automatica*, 2014, **50**(12): 2967–2986
- Xi Yu-Geng, Li De-Wei, Lin Shu. Model predictive control — status and challenges. *Acta Automatica Sinica*, 2013, **39**(3): 222–236 (席裕庚, 李德伟, 林姝. 模型预测控制—现状与挑战. 自动化学报, 2013, **39**(3): 222–236)
- Feng K, Lu J, Chen J. Nonlinear model predictive control based on support vector machine and genetic algorithm. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 2015, **23**(12): 2048–2052
- Nery J G A, Martins M A F, Ricardo K. A PSO-based optimal tuning strategy for constrained multivariable predictive controllers with model uncertainty. *ISA Transactions*, 2014, **53**(2): 560–567
- Mirjalili S. The ant lion optimizer. *Advances in Engineering Software*, 2015, **83**(C): 80–98
- Huang G B, Zhu Q Y, Siew C K. Extreme learning machine: theory and applications. *Neurocomputing*, 2006, **70**(1): 489–501

- 27 Huang G B, Zhou H, Ding X, et al. Extreme learning machine for regression and multiclass classification. *IEEE Transactions on Systems Man & Cybernetics Part B*, 2012, **42**(2): 513–529
- 28 Jesus G, Wen Y. Non-linear system modeling using LSTM neural network. *IFAC Papersonline*, 2018, **51**(13): 485–489
- 29 Wang Y. A new concept using LSTM neural networks for dynamic system identification. In: Proceedings of the 2017 American Control Conference. Seattle, WA, USA: IEEE, 2017. 5324–5329
- 30 Tang Y, Li Z, Guan X. Identification of nonlinear system using extreme learning machine based Hammerstein model. *Communications in Nonlinear Science & Numerical Simulation*, 2014, **19**(9): 3171–3183
- 31 Zhou Ping, Liu Ji-Ping. Data-driven multi-output ARMAX modeling for online estimation of central temperatures for cross temperature measuring in blast furnace ironmaking. *Acta Automatica Sinica*, 2018, **44**(3): 552–561
(周平, 刘记平. 基于数据驱动多输出 ARMAX 建模的高炉十字测温中心温度在线估计. 自动化学报, 2018, **44**(3): 552–561)
- 32 He X, Asada H. A new method for identifying orders of input-output models for nonlinear dynamic systems. American Control Conference. San Francisco, CA, USA: IEEE, 1993.
- 33 Liang Yan-Ming. Data-driven Based Growth Control for Silicon Single Crystal [Ph. D. dissertation], Xi'an University of Technology, China, 2014
(梁炎明. 基于数据驱动的硅单晶生长过程控制研究 [博士学位论文], 西安理工大学, 中国, 2014)
- 34 Dai Peng, Zhou Ping, Liang Yan-Zhuo, et al. Multi-output least squares support vector regression modeling based adaptive nonlinear predictive control and its application. *Control Theory & Applications*, 2019, **36**(1): 45–54
(戴鹏, 周平, 梁延灼, 等. 基于多输出最小二乘支持向量回归建模的自适应非线性预测控制及应用. 控制理论与应用, 2019, **36**(1): 45–54)
- 35 Liu Ding, Zhang Xin-Yu, Chen Ya-Jun. Monocrystalline silicon diameter detection image threshold segmentation method using multi-objective artificial fish swarm algorithm. *Acta Automatica Sinica*, 2016, **42**(3): 113–124
(刘丁, 张新雨, 陈亚军. 基于多目标人工鱼群算法的硅单晶直径检测图像阈值分割方法. 自动化学报, 2016, **42**(3): 113–124)



任俊超 西安理工大学博士研究生。分别于 2014 年、2017 年获西安理工大学学士和硕士学位。主要研究方向为数据驱动建模、优化与控制。

E-mail: renjc425x@163.com

(REN Jun-Chao Ph. D. candidate at the Xi'an University of Techno-

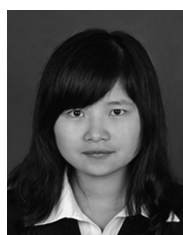
logy. He received his bachelor and master degrees all from Xi'an University of Technology in 2014 and 2017, respectively. His research interest covers data-driven modeling, optimization and control.)



刘 丁 西安理工大学教授, 博士生导师。1982 年获陕西机械学院学士学位, 1997 年获西安交通大学工学博士学位。主要研究方向为信号处理, 智能控制, 复系统建模与控制。本文通信作者。

E-mail: liud@xaut.edu.cn

(LIU Ding Professor at the Xi'an University of Technology. He received bachelor degree from Shaanxi Mechanical Institute in 1982, Ph. D. degree from Xi'an Jiaotong University in 1997. His research interest covers signal processing, intelligent control, and complex system identification and control. Corresponding author of this paper.)



万 银 西安理工大学博士研究生。分别于 2016 年、2019 年获西安理工大学学士和硕士学位。主要研究方向为复杂系统建模、仿真与分析。

E-mail: yinwan690212@163.com

(WAN Yin Ph. D. candidate at the Xi'an University of Technology.

She received her bachelor and master degrees both from Xi'an University of Technology in 2016 and 2019, respectively. Her research interest covers complex systems modeling, simulation and analysis.)