

计算机控制砷化镓单晶的 数学模型及其最佳控制*

何梁昌 王德宁 缪仲熙 乐忠法 陈法萍 蒋大卫

(中国科学院上海冶金研究所)

摘 要

本文应用现代控制理论,建立了计算机控制的液封法直拉砷化镓单晶的数学模型,在此基础上设计了一个由电视机对直径的采样值以及加热功率构成的三阶闭环控制系统。

液封剂控制砷化镓单晶,由于测量单晶直径难度较高,且因液封剂氧化硼的覆盖,热场的热惰性甚大,一般常规仪表和经典控制方法很难实现等直径控制。我们曾试验过用程序降温来生长,方法虽然简单,但重复性极差,很难实际使用。鉴于现代控制理论成功地应用于计算机控制控制硅单晶和砷化镓单晶光环测量电视的试制成功,我们着手移植控制硅单晶的经验于砷化镓单晶,取得了较为满意的结果,下面就砷化镓直径模型的识别,三阶控制器的设计,量测噪声和系统噪声的在线估计等作一简单的介绍。

一、模型识别

参照计算机控制硅单晶的经验^[1],假定砷化镓直径模型亦是一个定常的三阶系统。 z 为输出, u 为输入,两者之间的关系可用离散差分方程表示如下:

$$z(k) + a_1 z(k-1) + a_2 z(k-2) + a_3 z(k-3) = b_1 u(k-1) + b_2 u(k-2) + b_3 u(k-3) \quad (1)$$

引入三维状态变量:

$$X(k) = \begin{pmatrix} x_1(k) \\ x_2(k) \\ x_3(k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z(k) \\ z(k+1) - d_1 u(k) \\ z(k+2) - d_1 u(k+1) - d_2 u(k) \end{pmatrix} \quad (2)$$

将状态方程写成矩阵形式:

$$X(k) = \Phi \cdot X(k-1) + \Gamma \cdot u(k-1) \quad z(k) = H \cdot X(k) \quad (3)$$

其中

$$\Phi = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -a_3 & -a_2 & -a_1 \end{pmatrix} \quad H = (1 \ 0 \ 0)$$

* 本文曾在中国自动化学会 1978 年年会上宣读。

$$\Gamma = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 - a_1 d_1 \\ b_3 - a_1 d_2 - a_2 d_1 \end{pmatrix}$$

本文采用阶跃响应方法, 根据系统输出 $z(k)$ 对输入 $u(k)$ 的响应数据进行回归分析, 解出状态方程中诸参数. 全部回归拟合计算在一台 NOVA 机上, 用 Fortran 语言所编写的程序进行模型识别和参数估计.

阶跃试验时先由计算机输出加热功率 $W(0)$, 当打字机打印出直径 $\phi(0)$ 到达稳态后, 由面板置入, 使计算机发送阶跃加热功率信号, 然后每隔一分钟记录 $\phi(k)$ 一次, 直至 $\phi(k)$ 达到新的稳态值, 这样就完成了一次阶跃试验.

按 $u(k) = W(k) - W(0)$ 和 $z(k) = \phi(k) - \phi(0)$, 得到了 $u(k) \sim z(k)$ 的阶跃曲线, 如图 1 所示. 由图 1 可知砷化镓直径系统约有一分多钟的死滞时间, 持续时间约为半小时. 用回归拟合的曲线也列于图 1, 二者的吻合还是可以的. 取时间间隔 Δt 为一分钟, 用最小二乘法求得的归一化(即 $P = 1$) 结果如下:

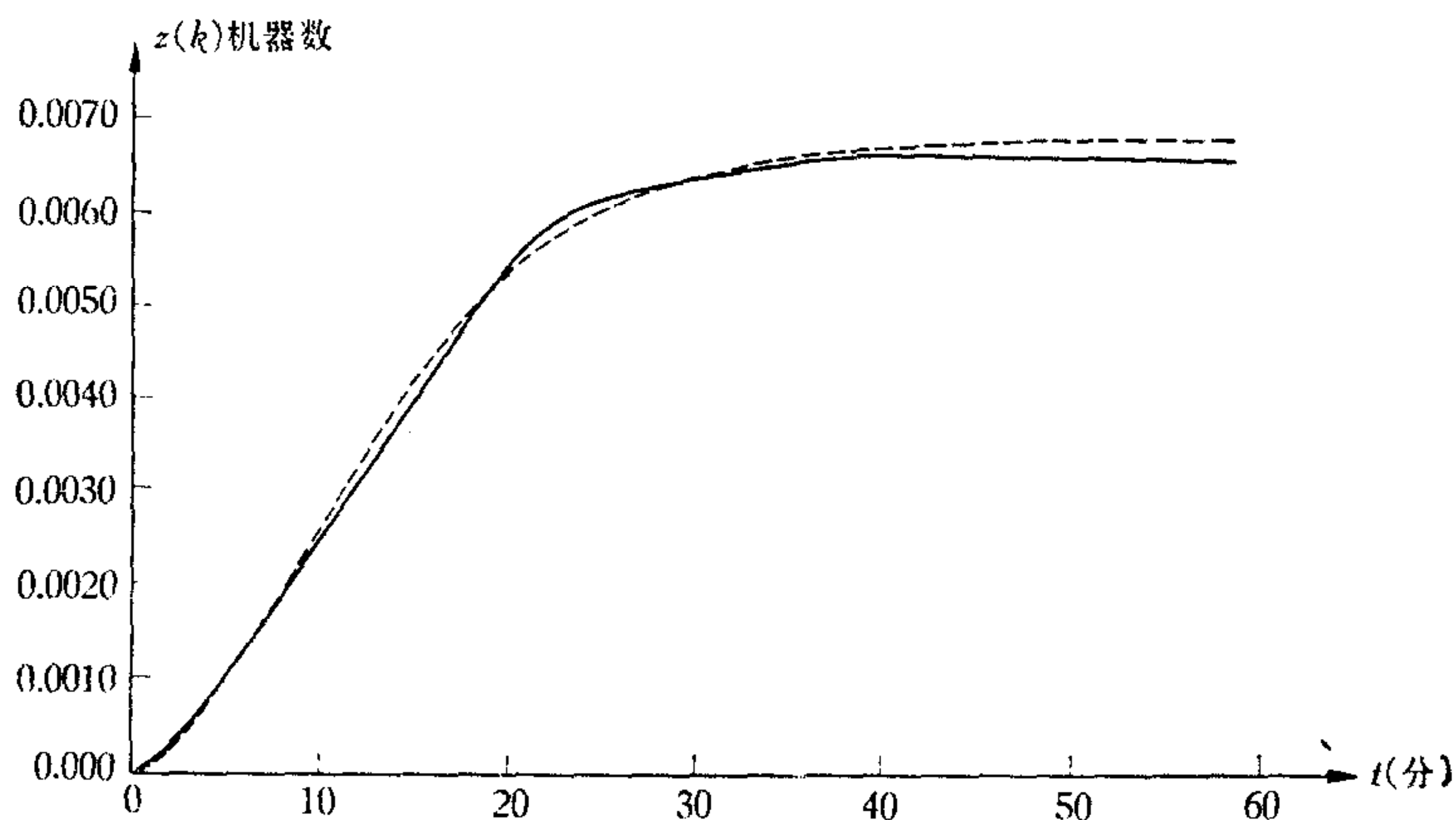


图 1 功率阶跃下的直径响应曲线
----- 拟合结果 —— 试验结果

$$\Phi = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0.2656 & -1.3956 & 2.0861 \end{pmatrix}, \quad \Gamma = \begin{pmatrix} 0.00000 \\ 0.00441 \\ 0.02265 \end{pmatrix}, \quad H = (1, 0, 0)$$

将这些值代入状态方程 (3) 就可以得到砷化镓单晶直径系统的三阶数学模型. 由式 (1) 可知转移矩阵 Φ 中的 a_1, a_2, a_3 与 P 值无关, Γ 阵中的 d_1, d_2, d_3 与 P 有关, 故实际使用时应乘上一个 P .

二、三阶控制系统

在得到了数学模型的基础上, 设计一个三阶控制器, 其内容包括四个方面:

1. 最优反馈

所谓等径控制就是要使直径变化 $z \rightarrow 0$, 为此引入一个二次型目标函数:

$$J = \sum_{k=1}^N [V \cdot z^2(k) + W \cdot u^2(k)] \quad (4)$$

式中 V 和 W 为权重因子, 它们体现了具体要求和系统物理条件的限制, 如加热功率变化不能过大. 在闭环控制时 $u(k)$ 与 $X(k)$ 有如下线性关系:

$$\hat{U}(k) = \Pi(k)\hat{X}(k) \quad (5)$$

其中 $\Pi(k)$ 为反馈矩阵, 对三阶系统 $\Pi(k) = (\Pi_1(k)\Pi_2(k)\Pi_3(k))$, 故式 (5) 即可化为:

$$u(k) = \Pi_1(k)x_1(k) + \Pi_2(k)x_2(k) + \Pi_3(k)x_3(k) \quad (6)$$

所谓最佳控制, 就可归结为选择最优反馈矩阵, 使目标函数 J 为最小值. 文献 [3] 介绍了最佳反馈可用动态规划法予以计算.

$$\text{线性二次型可写成: } \Pi = -\Lambda \cdot \Phi \quad (7)$$

其中 Λ 为增益矩阵, 当控制时间足够大时, Λ 依逆时序收敛于常数, 故在本文中定其为常数, 当 Φ 为已知时, Π 的计算就变成为 Λ 的计算, Λ 的计算可用下列递推方法予以解决:

$$\Lambda(k) = [\Gamma^T \Pi'(k) \Gamma + w]^{-1} \Gamma \Pi'(k) \quad (8)$$

$$\Pi'(k) = \Phi^T \cdot \Pi(k-1) \Phi + V \quad (9)$$

$$\Pi(k) = \Pi'(k) - \Pi'(k) \Gamma \cdot \Lambda(k) \quad (10)$$

$\Pi(k)$ 为损失矩阵, 其初始值可取 $\Pi(0) = 0$, 代入式 (9) 算得 $\Pi'(k)$, 将 $\Pi'(k)$ 代入式 (8), 算得 $\Lambda(k)$, 再将 $\Lambda(k)$ 代入式 (10) 得 $\Pi(k)$, 如此循环递推, 直至 $\Lambda(k)$ 收敛为常数.

式 (8) 和 (9) 中 v, w 为权矩阵:

$$V = \begin{pmatrix} v & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad W = w$$

根据上述方法, 使用 NOVA 机作离线计算得如表 1 的结果, 供实时控制时使用, 在使用

表 1

v/ω	Π_1	Π_2	Π_3
2^0	-0.31836	1.33623	-1.21766
2^1	-0.52461	2.21564	-2.03466
2^2	-0.80368	3.41333	-3.17871
2^3	-1.15065	4.92278	-4.66976
2^4	-1.55382	6.70802	-6.00949
2^5	-1.99884	8.72265	-8.70038
2^6	-2.47001	10.91439	-11.24494
2^7	-2.950115	13.222694	-14.145346
2^8	-3.420518	15.576753	-17.399214
2^9	-3.861529	17.894715	-20.993661
2^{10}	-4.253648	20.086190	-24.899762
2^{11}	-6.674214	38.14261	-43.72461
2^{12}	-9.652126	47.45158	-66.831445

时 $\Pi(k)_{*} = \frac{\Pi(k)}{P}$. 表 1 中设 $\omega = 1, v = 2^n, n = 0, 1, 2, \dots, 12$

2. 最优估计

最优反馈控制时,由(5)式可知还涉及状态 $X(k)$ 的最优估计,似乎可由状态方程(3)从 $X(k-1)$ 来推算,但由于系统噪声和量测噪声的存在,实际状态量 $X(k)$ 和最优估计 $\hat{X}(k)$ 是不一致的,因而必需将状态方程(3)作如下的修正:

$$\begin{aligned} X(k) &= \Phi X(k-1) + \Gamma u(k) + \Gamma w(k) \\ z(k) &= H \cdot X(k) + V(k) \end{aligned} \quad (11)$$

这里 $w(k)$ 表示系统噪声, $v(k)$ 表示量测噪声. 单输入单输出系统的第一分量. 由于噪声的存在,使其预报量 $x_1(k/k-1)$ 和测量值 $z(k)$ 间有一偏差量 $\Delta(k)$:

$$\Delta(k) = z(k) - x_1(k/k-1) \quad (12)$$

则最优估计: $\hat{X}(k/k) = X(k/k-1) + K^*(k)\Delta(k)$ 这里

$$K^*(k) = \begin{pmatrix} k_1^*(k) \\ k_2^*(k) \\ k_3^*(k) \end{pmatrix}$$

为卡尔曼过滤系数. $K^*(k)$ 的选择是根据 $X^*(k)$ 与 $X(k/k)$ 的最小方差作为准则,当其极小时 $K^*(k) = K(k)$, 上式即可变为:

$$\hat{X}(k/k) = X(k/k-1) + K(k)\Delta(k) \quad (13)$$

$K(k)$ 可根据卡尔曼-布西^[4]的一整套线性估计的递推公式来求得在工业控制中,时间是足够长的, $K(k)$ 矩阵可视为常数矩阵.

表 2 砷化镓直径系统 k 值离线计算结果

Q/R	k_1	k_2	k_3
2^0	0.04308	0.04309	0.04255
2^1	0.07113	0.07260	0.07194
2^2	0.10952	0.11385	0.11443
2^3	0.15785	0.16804	0.17195
2^4	0.21496	0.23563	0.24629
2^5	0.37941	0.31709	0.33951
2^6	0.34963	0.41299	0.45407
2^7	0.42396	0.52398	0.59277
2^8	0.50030	0.65059	0.75842
2^9	0.57673	0.79293	0.95352
2^{10}	0.65096	0.95052	1.17962
2^{11}	0.72077	1.12185	1.43653
2^{12}	0.78416	1.30412	1.72156
2^{13}	0.83952	1.49281	2.02829

类同 A 矩阵的计算一样,通过 NOVA 机计算可得砷化镓的直径模型 k 值的离线计算结果列于表 2,因 $K(k)$ 与 P 无关,可直接选用. 表 2 中 Q, R 分别表示系统噪声和量测噪声的方差,当 $R = 1$ 时, $Q = 2^n, n = 0, 1, 2, \dots, 13$

3. 平衡点飘移的校正

由于系统噪声和量测噪声出现直流分量 \tilde{u} , 就可能使 (5) 式中平衡点 $(X, u) = (0, 0)$, 即平衡点发生飘移。

因在稳态时

$$X(k) = X(k+1) = X$$

则状态方程由于噪声存在, 故

$$X = \Phi X + \Gamma \cdot u + \Gamma \cdot \tilde{u}$$

将 (5) 式代入上式

$$X = \Phi X + \Gamma \Pi k + \Gamma \tilde{u}$$

此方程有一非零解: $X = [I - \Phi - \Gamma \Pi]^{-1} \Gamma \tilde{u}$ (I 为单位矩阵) 因此状态 X 便不会回到零点, 系统出现稳态误差, 为了克服这种直流飘移, 必须对平衡点予以校正。文献 [1] 介绍了 $\tilde{u}(k)$ 的计算:

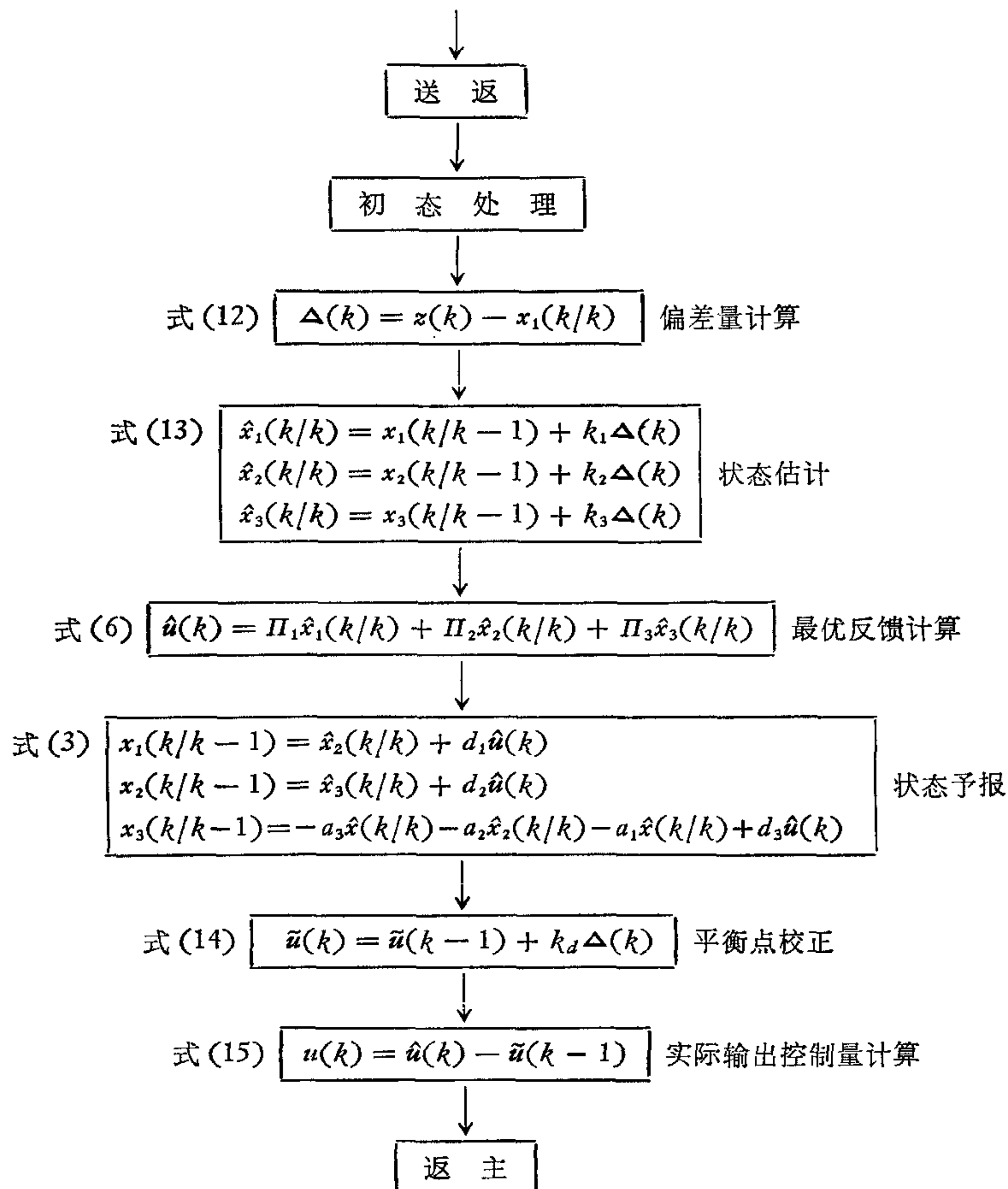
$$\tilde{u}(k) = \tilde{u}(k-1) + k_d \Delta k \quad (14)$$

$$k_d = \alpha \frac{k_1}{d_1} = \alpha \frac{k_2}{d_2}$$

这里 k_1, k_2 为卡尔曼过滤系数, d_1, d_2 为模型参数, α 为经验常数, 需由实验决定, 这样计算机对系统输入端的实际输出为 $u(k)$, 则

$$u(k) = \hat{u}(k) - \tilde{u}(k-1) \quad (15)$$

综上所述, 一个三阶控制器实际上由式 (3), 式 (6), 式 (12), 式 (13), 式 (14), 式 (15) 等确定, 如图 2 所示。将这样的—个控制过程设计成一个子程序块, 应用时就十分方便了。



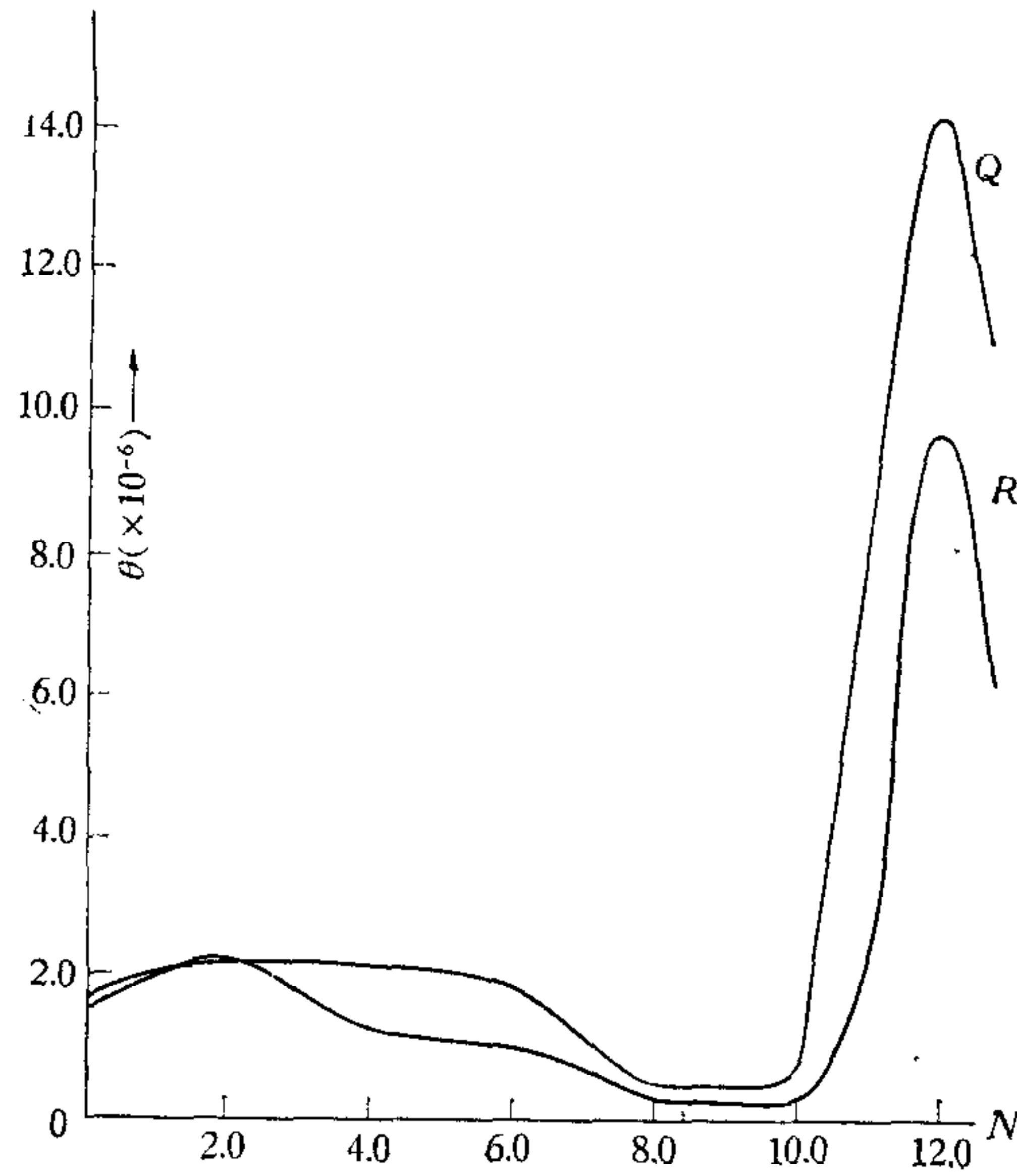


图2 N-Q, R 关系图

三、Q、R 在线估计的必要性

由于系统中存在难以测量的噪声,它们又是随机的,不免影响控制的精度.文献[6]介绍了一种在线估计 Q, R 的方法,对提高模型的精度是有益的.

文中提及: 最优估计

$$\hat{X}(k/k) = \Phi \cdot X(k-1) + \Gamma \cdot u(k) + \xi(k) \tag{16}$$

这里: $\xi(k) = \Gamma \cdot w(k) + \Phi \cdot V(k)$ 是系统噪声 $w(k)$ 和量测噪声 $V(k)$ 之和. 若(16)式可改写为 $\xi(k) = X - \hat{X}(k/k)$ 与式(12)中偏差量相较,可见 $\xi(k)$ 与 $\Delta(k)$ 是密切有关的,文献[6]就利用 $\Delta(k)$ 值找出了 R, Q 与 $\xi(k)$ 间关系,得出如下关系式:

$$\begin{pmatrix} \delta_0^N \\ \delta_1^N \\ \delta_2^N \\ \delta_3^N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_0 \beta_0 \\ \alpha_1 \beta_1 \\ \alpha_2 \beta_2 \\ \alpha_3 \beta_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R \\ Q \end{pmatrix}$$

这里:

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= 1 + a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 & \beta_0 &= b_1^2 + b_2^2 + b_3^2 \\ \alpha_1 &= a_2 + a_1 a_2 + a_2 a_3 & \beta_1 &= b_1 b_2 + b_1 b_3 + b_2 b_3 \\ \alpha_2 &= a_2 + a_1 a_3 & \beta_2 &= b_1 b_3 \\ \alpha_3 &= a_3 & \beta_3 &= 0 \end{aligned}$$

式中 a, b 即为状态方程(1)中系数
记:

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_0 \beta_0 \\ \alpha_1 \beta_1 \\ \alpha_2 \beta_2 \\ \alpha_3 \beta_3 \end{pmatrix} \quad D_n = \begin{pmatrix} \delta_0^N \\ \delta_1^N \\ \delta_2^N \\ \delta_3^N \end{pmatrix}$$

则

$$\begin{pmatrix} R \\ Q \end{pmatrix} = (A, A^T)^{-1} \cdot A^T \cdot D_n$$

A^T 为 A 的转置矩阵, 括号上 -1 , 表示 (AA^T) 的逆矩阵, 这样 $(AA^T)^{-1} \cdot A^T$ 是仅与状态方程系数有关的 $2 \times n$ 阶常数矩阵, 一般均可预先算好. 则 Q, R 仅由 D_n 决定, 它是一个列向量, 应用上式就可对 Q, R 进行在线计算了. 因

$$\delta_l^N = (1 - r)\delta_l^{N-1} + r\delta_{N+n}\Delta_{N+n-l} \quad (r \text{ 一般取 } 0.1, n = 3, l = 0, 1, 2, 3)$$

这是一种渐消记忆递推法, 应用计算机很方便可获得任何 N 时刻的 D_n , 也就算得了 Q, R 值.

本文利用编号 PA-262 等径控制时记录下的全部 $\Delta(k)$ 值, 且采用本数字模型的参数 a, b 值算得:

$$(AA^T)^{-1}A^T = +3.35 \begin{pmatrix} 0.004 & 0.0001 & 0 & 0 \\ 7.369 & -5.369 & 1.950 & -0.266 \end{pmatrix}$$

代入 (17) 式

$$R = +3.35(0.004\delta_0^N - 0.0001\delta_1^N)$$

$$Q = +3.35(7.369\delta_0^N - 5.369\delta_1^N + 1.95\delta_2^N - 0.266\delta_3^N)$$

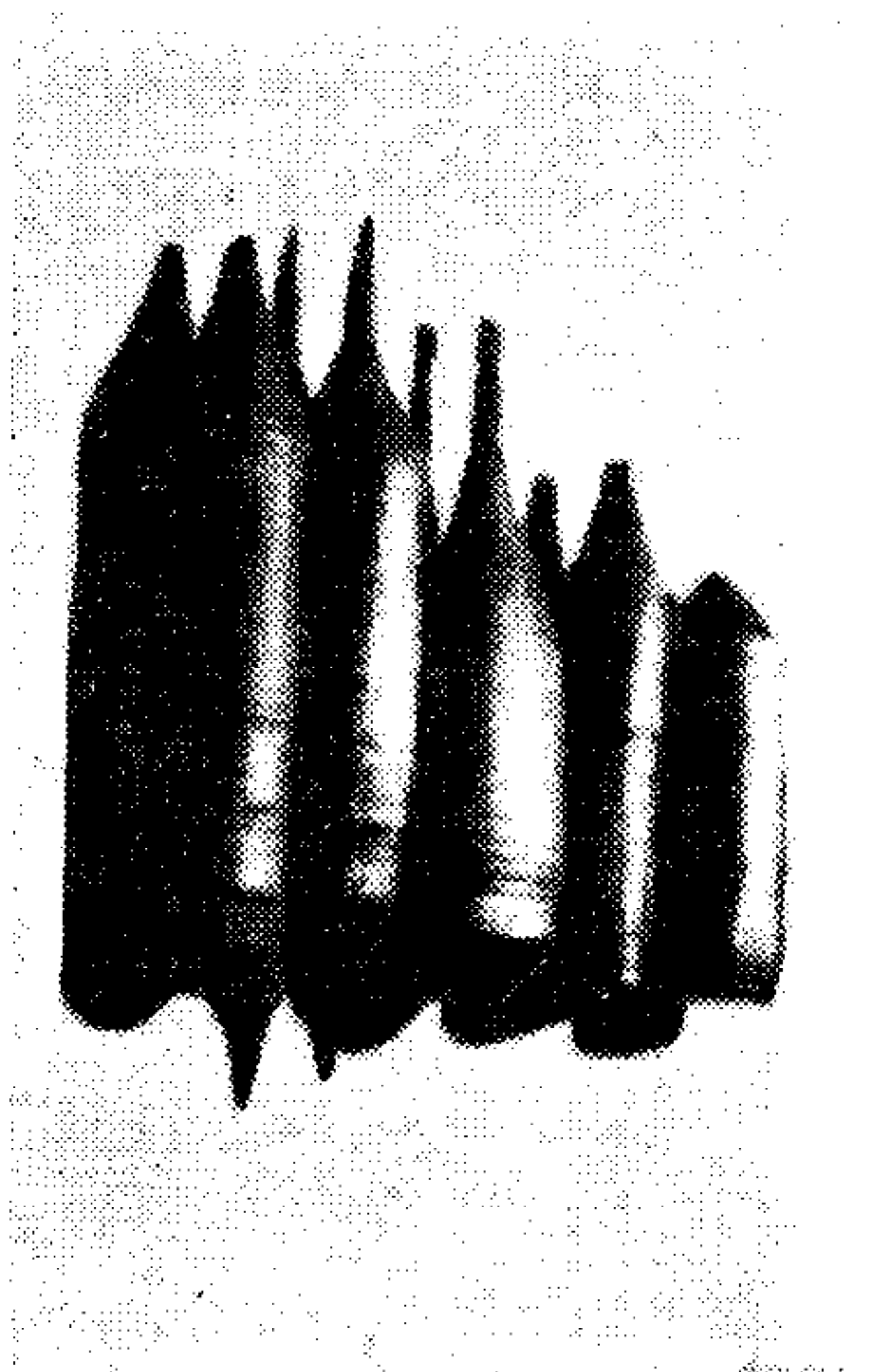
每隔 20 次, 不同 $\Delta(k)$ 代入渐消记忆递推法算出 D_n , 代入上式就可算得一组 Q, R . Q, R 对 N 作图示于图 2, 可见 R, Q 的变化会引起降低控制效果, 说明了对 Q, R 作不断的自适应校正的必要性, 是值得我们今后工作中改进的.

四、砷化镓单晶的数学模型的应用结果

对上述所得的三阶数学模型直接应用于砷化镓液封直拉法. 拉晶的前阶段: 引晶, 放肩阶段采用开环程序控制, 一旦当单晶直径长至所需直径时, 采用了一个严格的初态处理, 以防转入闭环时产生严重振荡而导致系统失控. 当单晶转入等直径阶段, 应用图 2 所示的三阶控制器进行闭环控制, 直至单晶长至所需长度时, 转入收尾阶段, 控制方式也由闭环转入开环, 从而实现了砷化镓单晶从放肩、收肩、等径、收尾等阶段计算机自动控制, 拉制出了 $\phi 20$ 或 $25 \text{ mm} \pm 1 \text{ mm}$ 等直径单晶 (见照片 1), 可见上述数学模型对砷化镓单晶控制还是行之有效的.

五、讨 论

砷化镓直径模型与硅单晶模型相比较^[1], 由于液封剂氧化硼存在, 从阶跃实验可知, 硅单晶是以单晶斜率 ϕ' 达稳态为准则的, 而砷化镓单晶直径 ϕ 直接可达稳态. 表明砷化镓单晶的直径模型更近似于硅单晶炉的温度模型^[6], 但前者热滞后现象远大于后者, 因此可以说砷化镓直径模型无论是初态处理, 或是控制要求均低于硅单晶直径模型, 而高于硅单晶炉的温度模型, 亦由于热滞后效应存在, 用常规仪表 (PID 控



照片 1

制器)很难予以控制。

硅单晶据国内外许多经验表明用变换拉速 PID 方法很容易达到控径目的,但由于氧化硼覆盖剂存在,砷化镓单晶拉速-直径亦是一个三阶系统,且有同样的热滞后效应,一般 PID 控制方法是难以控制的。虽然用数学模型方法可以予以解决,但变换拉速方法不可避免对晶体质量有影响,而变换加热功率方法更近于人工控制的情况,因此放弃了变换拉速方法。

本文采用三阶控制器完全类同于硅单晶的三阶控制器,说明了三阶控制器运用范围的普遍性,现已单独构成了一种程序块,将来可方便地应用于其他炉子,如外延炉,扩散炉等,如能将其原理直接用硬件制成一个自动控制仪,这将使我国仪表自动化水平向前推进一步,从我们实验中已证明其性能优越于一般 PID 控制器,又能适应于热滞后系统,是值得今后很好研究的。

由于时间局促,本文仅证明 Q, R 自适应校正的必要性,还未具体应用,是今后我们工作改进方向之一。

致谢:本工作是在师大郑毓蕃同志指导下,并得到上海电子器材厂程兆年同志大力协助,叶荣,张国正,薛忠发同志共同参加下完成的,在此一并感谢。

参 考 文 献

- [1] 何梁昌等:电子与自动化,第4期(1978),36.
- [2] 郑毓蕃、毛羽辉、谢雷鸣:计算机控制单晶生长的数学模型之离线计算方法和程序,上海师大数学系,现代控制论及其应用研究报告,第5部分(77),p. 1.
- [3] Noton, M. Modern Control, Eng, Perg. Press Inc, N. Y. (72), Chapter. 4.
- [4] Kalman, R. E. and R. C. Bucy, New Results in Linear Filtering and Prediction Theory. *Trans ASME, J. Basic. Eng.* Vol. 83D(61), 95—108.
- [5] 中科院数学研究所概率组:离散时间系统滤波的数学方法,第二章,国防出版社(75).
- [6] 郑毓蕃:估计卡尔曼滤波器中 R, Q 的二个方法,师大数学系,现代控制论及其应用研究报告,第3部分(77), p. 12.

THE MATHEMATICAL MODEL AND OPTIMUM CONTROL OF COMPUTER-CONTROLLED GALLIUM ARSENIDE SINGLE CRYSTAL GROWTH

HO LIANG-CHANG WANG TE-NING MIU CHUNG-HSI
LE CHUNG-FA CHEN FA-PING CHIANG TA-WEI

(Shanghai Institute of Metallurgy, Academia Sinica)

ABSTRACT

This paper discusses the establishment of the mathematical model of a computer-controlled liquid encapsulated Gallium Arsenide crystal growth. On this basis, a third-order close-loop control system of heating power by the television-measured diameter value is designed.