

Министерство образования и науки Украины
Харьковский национальный университет радиоэлектроники

На правах рукописи

Шевченко Игорь Васильевич

УДК 004.896:658.562.3

**МЕТОДЫ, МОДЕЛИ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ
ТЕХНОЛОГИИ МОНИТОРИНГА И ОПТИМИЗАЦИИ
ПРОЦЕССА ВЫРАЩИВАНИЯ
МОНОКРИСТАЛЛОВ ПОЛУПРОВОДНИКОВ**

Специальность 05.13.06 – информационные технологии

Диссертация на соискание ученой степени
доктора технических наук

Научный консультант
Левыкин Виктор Макарович
доктор технических наук, профессор

Харьков - 2015

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	6
РАЗДЕЛ 1. Анализ проблем разработки информационно-аналитических систем мониторинга и оптимизации процессов выращивания монокристаллов.....	21
1.1. Анализ существующих систем мониторинга и управления качеством сложных технико-экономических процессов.....	21
1.2. Анализ концепций и проблем мониторинга сложных производственных систем и процессов.....	24
1.3. Анализ существующих моделей и инструментальных средств мониторинга и управления качеством процесса выращивания монокристаллов.....	30
1.4. Анализ информационных технологий мониторинга и распознавания ситуаций в информационно-аналитических системах.....	40
1.5. Анализ информационных технологий поддержки принятия решений на основе ситуационного подхода.....	49
1.6. Анализ подходов к реализации функций мониторинга и оптимизации процесса выращивания монокристаллов.....	58
Выводы и постановка задач исследований.....	64
РАЗДЕЛ 2. Разработка концептуальных основ построения информационно-аналитической системы управления качеством процесса выращивания.....	68
2.1. Концепция управления качеством производственного процесса.....	68
2.2. Постановка задачи управления качеством сложного производственного процесса.....	72
2.3. Разработка модели информационно-аналитической системы управления качеством процесса выращивания.....	75

2.4. Концепция мониторинга температурных полей в процессе выращивания монокристаллов.....	82
2.5. Обобщенная структура взаимосвязей моделей решения задач мониторинга процесса выращивания монокристаллов.....	84
2.6. Разработка модели подсистемы поддержки принятия оперативных решений в процессе выращивания.....	86
2.7. Разработка модели подсистемы оптимизации условий остывания слитка в ростовой установке.....	94
2.8. Разработка метода построения информационной технологии поддержки принятия решений по диагностике и коррекции сложного производственного процесса.....	95
Выводы по разделу.....	100
РАЗДЕЛ 3. Разработка моделей, метода и информационной технологии мониторинга температурных полей в процессе выращивания монокристаллов.....	103
3.1. Разработка нейросетевой модели для косвенного мониторинга температурного поля в расплаве.....	104
3.2. Численно-аналитическая модель расчета температурного поля в слитке как элемент информационной технологии мониторинга температурных полей.....	114
3.3. Разработка метода моделирования процесса кристаллизации на базе нечеткого клеточного автомата.....	117
3.4. Разработка модели расчета температуры фонового нагревателя как виртуального датчика в составе подсистемы мониторинга.....	131
3.5. Разработка информационной технологии мониторинга температурных полей в процессе выращивания монокристаллов	136
Выводы по разделу.....	145
РАЗДЕЛ 4. Разработка метода, моделей и информационной технологии поддержки задачи оптимизации условий остывания слитков.....	147
4.1. Анализ связи тепловых условий и термических напряжений в слитке.....	148

4.2. Разработка математической модели связи между геометрическими параметрами элементов теплового узла и тепловыми потоками излучения.....	150
4.3. Разработка модели расчета температурных полей расплава и слитка.....	160
4.4. Разработка метода и модели оптимизации конфигурации и положения теплового экрана ростовой установки.....	167
4.5. Разработка информационной технологии оптимизации тепловых условий остывания слитка.....	174
Выводы по разделу.....	177
РАЗДЕЛ 5. Разработка моделей, алгоритмов и информационных технологий поддержки принятия оперативных решений и управления качеством процесса выращивания.....	
5.1. Анализ факторов и условий, непосредственно влияющих на качество процесса выращивания.....	181
5.2. Разработка моделей распознавания ситуаций и выдачи рекомендаций по коррекции режима процесса выращивания.....	185
5.3. Задачи коррекции базы знаний СППР.....	211
5.4. Разработка алгоритмов решения задачи диагностики и выдачи рекомендаций.....	213
5.5. Разработка алгоритма автоматизированной коррекции базы знаний.....	215
5.6. Разработка информационной технологии поддержки принятия оперативных решений по коррекции режима процесса выращивания.....	217
5.7. Разработка интегрированной информационной технологии управления качеством процесса выращивания.....	222
Выводы по разделу.....	225
РАЗДЕЛ 6. Практическая реализация информационных технологий мониторинга и оптимизации процесса выращивания монокристаллов...	
	227

6.1. Реализация информационной технологии мониторинга процесса выращивания монокристаллов. Подсистема «Мониторинг».....	227
6.2. Реализация информационной технологии поддержки принятия оперативных решений в процессе выращивания. Подсистема «Советчик».....	237
6.3. Реализация информационной технологии оптимизации условий остывания слитков в установке для выращивания монокристаллов. Подсистема «Экран».....	248
6.4. Исследование остаточных напряжений и уровня дислокаций в слитках GaAs при использовании ИАС УКПВ.....	261
6.5. Оценка экономического эффекта от внедрения ИАС УКПВ.....	263
Выводы по разделу.....	273
Выводы.....	275
Список использованных источников.....	282
Приложение А.....	307
Приложение Б.....	322

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность работы. Развитие интеллектуальных технологий извлечения и обработки информации достигло уровня, который позволяет значительно повысить информативность систем мониторинга и достоверность оценки параметров физических процессов, происходящих во время выращивания монокристаллов полупроводников. Процесс выращивания монокристаллов является представителем класса сложных производственных процессов (СПП), которые не являются статистически стабильными, и, кроме того, в которых невозможно прямыми методами измерять параметры, непосредственно влияющие на качество конечного продукта, себестоимость которого достаточно велика. Поэтому важным вопросом является создание информационных технологий сопровождения для процессов изготовления монокристаллов, а также других производственных процессов, в которых используются сложные физические явления и их сочетания.

Проблема управления качеством СПП связана, прежде всего, с недостаточным информационным обеспечением основных этапов производства, таких как технологическая подготовка производства и сложный процесс изготовления продукта. Решение этой проблемы возможно с помощью специализированных информационно-аналитических систем управления качеством производственных процессов. Необходимую информацию можно получить путем обработки оперативных и ретроспективных данных, используя знания о влиянии параметров процесса на качество продукта.

Общим проблемам управления качеством посвящены работы У. Шухарта, Д. Уиллера, А. Фейгенбаума, Дж. Джурана, Г. Тагути, К. Исикавы, Л.А. Кузнецова. Однако в этих работах в основном рассматриваются статистические методы квалиметрии и организационные методы управления качеством выпускаемой продукции, но не рассматривается влияние информационной поддержки и сопровождения подготовительных и технологических процессов на качество продукта.

Термин «управление качеством» интерпретируется стандартами как «установление, обеспечение и поддержание необходимого уровня качества продукции при ее разработке, производстве, эксплуатации или потреблении, осуществляемое путем систематического контроля качества и целенаправленного воздействия на влияющие на него условия и факторы». В соответствии с этим управление качеством должно обеспечивать:

- предварительное установление необходимого соотношения «цена-качество» (анализ и обоснование требуемой совокупности свойств продукции в соответствии с её особенностями и назначением);
- квалитетический аспект – разработку методов оценки первичных и комплексных показателей качества продукции на всех этапах её производства;
- метрологический аспект – обеспечение мониторинга процессов и факторов, непосредственно и косвенно влияющих на качество продукции путем достоверного измерения и наблюдения количественных и качественных показателей с помощью технических и программных средств и интерпретации результатов измерений;
- непосредственное воздействие на уровень качества с помощью «условий и факторов» (технический и технологический аспекты).

Сложные производственные процессы, и в том числе процесс выращивания монокристаллов, имеют определенную общую специфику, а именно:

1. Необходимость контроля множества физических параметров и их соотношений. С возрастанием сложности и размерности объекта управления, с увеличением объема осведомительной информации человек-оператор теряет способность самостоятельно перерабатывать информацию в оперативном режиме [1-2].

2. Проблема нестабильности и многосвязности. Во время технологического процесса изменяется влияние параметров и их соотношений на его течение. При этом указанные соотношения могут принимать нежелательные значения в заранее неизвестных точках процесса. Например, по мере роста монокристалла кардинально меняются тепловые поля внутри установки, кон-

векционные потоки внутри расплава и т.д. [3].

3. Отсутствие масштабной инвариантности. Условия получения продукта существенно зависят от незначительных изменений в конструкции оборудования. Например, при выращивании монокристаллов полупроводников изменение конфигурации любого элемента теплового узла может коренным образом изменить тепловую картину процесса. Это приводит к необходимости проведения серии дорогих экспериментов для оптимизации режимов выращивания [3].

4. Отсутствует адекватная информационная поддержка мониторинга качества технологического процесса как такового.

5. Отсутствуют методы и средства получения необходимой информации о текущем состоянии процесса выращивания, существенно определяющей качество конечного продукта;

6. Знания экспертов не используются для распознавания критических ситуаций и внесения необходимых корректив в режим процесса выращивания.

Кроме того, управление сложным процессом во многом опирается на личный опыт операторов и нередко осуществляется ими на интуитивном уровне. Как правило, с потерей опытных работников на технологической линии резко снижается качество и возрастает брак выпускаемой продукции.

С другой стороны, отсутствует единый системный подход в разработке систем мониторинга и диагностики сложных технико-экономических процессов как основы управления качеством. Это можно объяснить следующими причинами:

- принципиальная невозможность единого, формального описания всех возможных видов состояний и явлений из-за применения разного математического аппарата для анализа различных по своей природе процессов;
- отсутствие теоретического обоснования структуры и состава информационных технологий, способных обеспечить эффективное решение задач мони-

торинга и коррекции режимов СПП.

Важным вопросом развития современных технологий мониторинга производственных процессов являются пути перехода от классических систем прямого измерения и контроля значений технологических параметров к методам и средствам получения необходимой дополнительной информации о текущем состоянии и динамике процесса, которая используется для поддержки принятия решений. Эту информацию можно получить путём всесторонней обработки оперативных и ретроспективных данных, полученных уже существующими контрольно-измерительными средствами.

В настоящее время лаборатории и отделы технического контроля в производстве монокристаллов в основном инспектируют качество промежуточного и конечного продукта, то есть контрольная функция практически не оказывает влияния на ход процесса выращивания как такового.

Существующее положение объясняется, в первую очередь, слабостью прямого влияния накопленных количественных данных и теоретических знаний о кинетике и динамике процесса выращивания на методы коррекции технологических параметров в режиме реального времени.

С другой стороны, важно подчеркнуть, что по физико-технологическим вопросам производства монокристаллов имеется большой объём исследований, результаты которых необходимо использовать при создании информационно-аналитической системы управления качеством процесса выращивания (ИАС УКПВ). Большой вклад в решение проблем получения объемных монокристаллов арсенида галлия и кремния и создания теоретических основ обеспечения качества их выращивания внесли научные школы, основанные В.С. Лейбовичем В.А. Татарченко, Г.А. Сатункиным, А.П. Оксаничем и др.

Вопросам разработки методов моделирования, контроля и управления в сложных технических системах посвящены работы Н.П. Бусленко, Ю.И. Неймарка, А.А. Павлова, Р.М. Юсупова, Б.В. Соколова, А.В. Смирнова. Вопросам применения методов вычислительного интеллекта для контроля производст-

венных процессов посвящены работы Д.А. Пospelова, Т. Такаги, М. Сугено, Р.А. Алиева, Е.В. Бодянского, А.И. Михалёва, Л.С. Ямпольского и других ученых. Однако, в этих работах нет в явном виде прямой постановки и решения проблемы информационной поддержки управления качеством конечного продукта в процессе его изготовления.

К настоящему времени нет теоретически обоснованных подходов к созданию систем управления качеством нового поколения, которые бы осуществляли информационную поддержку решения задач технологической подготовки производства и действий операторов в реальном времени технологического процесса. В частности, на основе мониторинга наиболее значимых параметров процесса необходимо распознавание сложившейся ситуации и выдача рекомендаций оператору при необходимости устранения критической ситуации. Подобные задачи должны решать специализированные информационно-аналитические системы управления качеством производственных процессов (ИАС УКПП). Такие системы должны использовать технологии вычислительного интеллекта, математические модели наблюдаемых физических явлений и базироваться на формальных структурных описаниях многоплановых задач управления качеством сложного производственного процесса.

Таким образом, возникает противоречие сложности (большое количество параметров, сложная динамика и т.д.) производственных процессов и невозможности с помощью существующих моделей, методов и информационных технологий обеспечить необходимое качество продукции, что приводит к необходимости разработки средств информационной поддержки управления качеством процесса для обеспечения качества конечного продукта.

Следовательно, создание научных основ информационной поддержки процесса выращивания монокристаллов и процессов оптимизации параметров технологической оснастки с целью повышения качества продукции путем разработки и реализации соответствующих методов, моделей и информационных технологий является актуальной научно-прикладной проблемой.

Решение этой проблемы имеет важное хозяйственное значение для целого ряда областей (производство монокристаллов, медицина, экономика, метеорология, социальные процессы и др.). Отдельные наиболее сложные задачи этих областей могут быть отнесены к классу ресурсоемких научно-практических задач оперативной диагностики. Как правило, это уникальные задачи, решение которых часто носит эмпирический характер и требует научно-обоснованного синтеза ИАС УКПП. В процессе синтеза таких ИАС необходимо использовать междисциплинарный подход и анализировать большие объемы информации в заданной предметной области.

Связь работы с научными программами, планами, темами. Исследования, представленные в диссертационной работе, проводились автором на кафедре информационных управляющих систем Харьковского национального университета радиозлектроники (ХНУРЭ) в рамках госбюджетной НИР № 265 «Методы и модели самоорганизации инфраструктуры интеллектуальной информационной среды, базирующейся на использовании принципов облачных вычислений» (номер государственной регистрации 0112U000207), а также совместно с Кременчугским национальным университетом им. Михаила Остроградского, в соответствии с целевой научно-практической темой Министерства промышленной политики – «Исследование влияния процессов тепломассопереноса на электрофизические и структурные свойства монокристаллического кремния и арсенида галлия в процессе их выращивания» (номер государственной регистрации 0106U000056).

Цель и задачи исследования. Целью исследования является решение актуальной научно-прикладной проблемы создания теоретических и прикладных основ информационной поддержки процесса выращивания монокристаллов полупроводников и процессов оптимизации параметров технологической оснастки для обеспечения повышения качества продукции.

Основные задачи диссертационной работы, которые определены поставленной целью:

- провести анализ концепций и проблем управления качеством и мониторинга сложных производственных процессов и, в частности, процесса выращивания монокристаллов полупроводников;
- разработать модель информационно-аналитической системы управления качеством процесса выращивания монокристаллов и метод построения информационной технологии мониторинга и диагностики сложного технологического процесса;
- разработать методы, модели и информационную технологию мониторинга температурных полей в процессе выращивания монокристаллов;
- разработать методы, модели и информационную технологию поддержки задачи оптимизации тепловых условий охлаждения слитков в ростовой установке стадии технологической подготовки производства;
- разработать методы, модели и информационную технологию поддержки принятия оперативных решений в ходе процесса выращивания монокристаллов, а также интегрированную информационную технологию управления качеством процесса выращивания монокристаллов;
- разработать комплекс программных средств реализации информационной технологии управления качеством процесса выращивания монокристаллов в виде подсистем ИАС УКПВ;
- внедрить результаты исследований в процесс управления качеством производства монокристаллов полупроводников.

Объектом исследования являются процессы информационной поддержки производства монокристаллов полупроводников.

Предмет исследования – модели, методы и информационные технологии, обеспечивающие мониторинг и оптимизацию процесса выращивания монокристаллов полупроводников.

Методы исследований. Диссертационное исследование базируется на системном анализе результатов современных теоретических и прикладных

разработок отечественных и зарубежных ученых в области разработки автоматизированных систем обработки измерительной информации и технологических процессов производства монокристаллов. При решении поставленных задач использованы методы системного анализа и общей теории систем при построении концептуальной модели ИАС УКПВ; методы статистического анализа временных рядов – при выборе моделей диагностики процесса выращивания; методы теории нейронных сетей – при разработке моделей косвенных измерений параметров температурных полей; методы адаптивного случайного поиска и эволюционных алгоритмов – при оптимизации параметров тепловых узлов и моделей распознавания; методы теории нечетких множеств, теории принятия решений и методы кластерного анализа – при разработке моделей распознавания ситуаций; теоретико-множественный подход – при разработке архитектуры информационных систем.

Научная новизна полученных результатов. Основной научный результат диссертации заключается в создании теоретических и прикладных основ информационной поддержки процесса выращивания монокристаллов полупроводников и процессов оптимизации параметров технологической оснастки для обеспечения повышения качества продукции.

Научные результаты, полученные в диссертационной работе, заключаются в следующем:

1. Впервые предложены:

1.1. Теоретико-множественная модель информационно-аналитической системы управления качеством процесса выращивания монокристаллов, которая, в отличие от известных, содержит в своем составе модель качества продукта, модель качества производственного процесса, функциональную подсистему оптимизации параметров оснастки на стадии технологической подготовки производства, функциональную подсистему мониторинга процесса выращивания, функциональную подсистему поддержки принятия оперативных решений по коррекции режима выращивания, отображение множества пара-

метров качества процесса на множество параметров качества продукта и отображение влияния множества решений функциональных задач на качество технологического процесса, что позволяет реализовать комплексный подход к повышению качества технологического процесса и конечного продукта.

1.2. Метод настройки параметров нечеткого клеточного автомата, моделирующего процесс выращивания монокристалла, который основан на поиске оптимальных значений весовых коэффициентов во взвешенной t-конорме Лукасевича, что позволяет адекватно отразить динамику сложного процесса выращивания монокристаллов и реализовать необходимую обработку данных для мониторинга этого процесса.

2. Усовершенствованы:

2.1. Метод построения прикладной информационной технологии поддержки принятия решений по диагностике и коррекции сложного производственного процесса, путем формирования комплекса моделей мониторинга, основанных на раскрытии физического представления процесса, что позволяет осуществить контроль важных параметров процесса, которые недоступны для прямых измерений и тем самым повысить эффективность управления качеством конечного продукта.

2.2. Метод решения задачи оптимизации геометрических параметров теплового экрана на стадии технологической подготовки производства, путем создания модели оптимизации с составным критерием и использования эволюционной процедуры оптимизационных расчетов, что позволяет осуществить информационную поддержку процесса технологической подготовки производства и повысить качество конечного продукта.

2.3. Нейросетевая модель для косвенного мониторинга температурного поля, которая, в отличие от известных, учитывает конвективные тепловые потоки, скорость вытягивания, стадию процесса вытягивания, что позволяет повысить точность результатов косвенных измерений параметров температурного поля и является основой информационной технологии получения ключевых

данных для оценки качества изготавливаемых монокристаллов полупроводников.

2.4. Метод моделирования процесса кристаллизации путем применения нечеткого клеточного автомата на этапе воспроизведения формы монокристалла, что позволяет упростить вычислительный процесс моделирования по сравнению с известными методами, получать уточненные значения коэффициента теплопроводности в проблемной зоне фронта кристаллизации для использования в информационной технологии мониторинга процесса выращивания монокристаллов.

3. Получили дальнейшее развитие:

3.1. Модель подсистемы поддержки принятия оперативных решений для коррекции процесса выращивания монокристаллов путем введения базы математических моделей мониторинга и анализа температурных полей расплава и слитка, а также интерфейсов для связи с АСУ ТП выращивания монокристаллов и с подсистемой технико-экономического планирования АСУ предприятия, что позволяет принимать оперативные решения в ходе процесса выращивания с учетом как физических, так и экономических показателей.

3.2. Нечеткая модель распознавания ситуаций в процессе выращивания монокристаллов, путем оценки степени критичности ситуации, и в которой для настройки используются индивидуальные коэффициенты значимости элементарных посылок каждого правила, что позволяет упростить процесс обучения и дообучения модели при появлении новых проблемных ситуаций.

3.3. Модель поиска решений для оператора в виде рекомендаций, путем введения нечеткого представления ситуаций, которое учитывает тренды параметров процесса выращивания, что позволяет гибко реагировать на возникновение проблемных ситуаций и принимать адекватные решения по коррекции процесса выращивания монокристаллов.

Практическое значение полученных результатов. Разработанные методы, модели и информационные технологии положены в основу разработанной в Харьковском национальном университете радиоэлектроники

информационно-аналитической системы управления качеством процесса выращивания монокристаллов полупроводников, в состав которой в виде функциональных подсистем вошли: подсистема «Мониторинг», реализующая функции косвенного измерения и контроля температурных полей расплава и слитка в процессе выращивания и информационную поддержку действий оператора ростовой установки; подсистема «Советчик», реализующая диагностику неблагоприятных ситуаций в процессе выращивания монокристаллов и поддержку принятия оперативных решений по коррекции режима выращивания; подсистема «Экран», реализующая решение задачи оптимизации размеров и положения теплового экрана ростовой установки в процессе технологической подготовки производства арсенида галлия.

Внедрение этих подсистем на ЧП «Галар» (г. Светловодск) позволило получить годовой экономический эффект 85,4 тыс. грн. (акт внедрения от 10.12.2013 г.).

Источники экономической эффективности внедренных разработок:

- уменьшение расхода электроэнергии, материальных ресурсов, трудозатрат и потерь прибыли на единицу готовой продукции за счет снижения количества нештатных ситуаций и соответствующего снижения доли бракованной продукции в производстве слитков арсенида галлия благодаря использованию подсистем «Мониторинг», «Советчик» и «Экран».
- уменьшение затрат на технологическую подготовку производства слитков арсенида галлия за счет исключения экспериментальных работ на ростовых установках при подборе размеров и положения теплового экрана благодаря использованию подсистемы «Экран».

Модели и алгоритмы мониторинга и коррекции тепловых режимов печей нормализации реализованы в программном модуле, который внедрен на Кременчугском сталелитейном заводе (ПАО КСЗ), что позволило стабилизировать качество железнодорожного литья (акт внедрения от 01.08.2014 г.).

Научные и научно-методические разработки диссертационной работы используются в учебном процессе (акт внедрения от 03.04.2014 г.).

Личный вклад соискателя. Автор самостоятельно сформулировал цель и задачи исследования, выполнил теоретическую и практическую часть работы, принимал участие в промышленных испытаниях. Сформулированные в диссертации научные результаты, выводы и рекомендации принадлежат лично автору и являются его научным вкладом.

В работах, опубликованных вместе с соавторами, диссертанту принадлежат: [178] – теоретико-множественная модель информационно-аналитической системы управления качеством процесса выращивания монокристаллов; [179] – модель системы поддержки принятия оперативных решений и модель принятия решений; [180] – метод построения информационной технологии диагностики состояния сложного производственного процесса; [181] – математическая модель информационной технологии; [187] – нейросетевая модель расчета температурного поля расплава; [188] – структура нейросетевой модели расчета температурного поля слитка; [189] – численно-аналитическое решение задачи теплообмена с поверхности слитка; [190] – метод моделирования процесса кристаллизации и метод обучения нечеткого автомата; [203] – структура регрессионной модели для расчета температуры фонового нагревателя; [204] – информационная технология мониторинга температурных полей; [205] – математическая модель, связывающая геометрические параметры теплового узла и тепловые потоки излучения; [207] – численно-аналитический подход к моделированию тепловых явлений в процессе выращивания монокристаллов; [210] математическая модель оптимизация конфигурации теплового экрана ростовой установки; [216] – структура многоуровневых оценок качества производственных процессов; [219] – метод кластеризации, позволяющий получить кластеры произвольной формы; [220] – метод синтеза структуры нейронной сети для решения задач диагностики, основанный на использовании априорной экспертной информации и итеративном получении значений весовых коэффициентов в слое предварительной обработки данных; [221] – метод извле-

чения знаний при помощи нечеткого интерпретатора и процедуры верификации правил; [223] – структура базы нечетких знаний, которая обеспечивает возможность одновременной настройки базы правил и параметров функций принадлежности нечетких множеств, что сокращает время обучения; [224] – иерархическая база знаний системы диагностики и модель распознавания ситуаций; [231] – нейросетевая модель прогнозирования; [232] – сформирован комплекс методов анализа изображений; [234] – метод кластеризации, основанный на параллельном генетическом алгоритме; [235] – модель взаимодействия интеллектуального агента и среды; [236] – концептуальные основы информационно-аналитической системы управления качеством процесса выращивания монокристаллов, нейросетевая модель расчета температурного поля расплава, метод моделирования процесса кристаллизации с помощью нечеткого клеточного автомата, метод и модель оптимизации геометрических параметров тепловых экранов, а также усовершенствованная модель связи между геометрическими параметрами элементов теплового узла и тепловыми потоками излучения.

Апробация результатов диссертации. Основные научные положения и результаты работы докладывались и обсуждались на: III Международной научно-технической конференции “Информационные системы и технологии” ИСТ–2014, 15–21 сентября 2014 г., Харьков; Всеукраинской научно-практической конференции «IT-Перспектива», 2014 г., Кременчуг; III Международной научно-практической конференции «Полупроводниковые материалы, информационные технологии и фотовольтаика», Кременчуг, 2014 г.; X Международной научно-практической конференции «Актуальные вопросы и организационно-правовые основы международного сотрудничества в сфере высоких технологий», Киев, 25 июня 2014 г.; IX Международной научно-практической конференции «Развитие научных исследований 2013», 25–27 ноября 2013 г., Полтава; XII Международной научно-технической конференции «Физические процессы и поля технических и биологических объектов», Кременчуг, 2013 г.; II Международной научно-технической конферен-

ции “Информационные системы и технологии” ИСТ–2013, 16–22 сентября 2013 г., Харьков; II Международной научно-практической конференции «Полупроводниковые материалы, информационные технологии и фотовольтаика», Кременчуг, 2013 г.; IV Международной научно-практической конференции «Системный анализ. Информатика. Управление», Запорожье, 2013 г.; III Международной научно-практической конференции «Полупроводниковые материалы, информационные технологии и фотовольтаика», Кременчуг, 2013 г.; XI Международной научно-технической конференции «Физические процессы и поля технических и биологических объектов», Кременчуг, 2012 г.; “Информационные системы и технологии” – Международная научно-техническая конференция, посвященной 75-летию В.В. Свиридова – ИСТ–2012, г. Харьков; III Международной научно-практической конференции «Системный анализ. Информатика. Управление», Запорожье, 2012 г.; V Украинская научная конференция по физике полупроводников, Ужгород, 2011 г.; X Международной научно-технической конференции «Физические процессы и поля технических и биологических объектов», Кременчуг, 2011 г.; I Международной научно-практической конференции «Полупроводниковые материалы, информационные технологии и фотовольтаика», Кременчуг, 2011 г.; IV Международной научно-практической конференции «Материалы электронной техники и современные информационные технологии», Кременчуг, 2010 г.; III Всеукраинской научно-технической конференции «Информационные технологии в экономических и технических системах» (ИТЭТС-2009); IV Международной научно-технической конференции аспирантов и молодых ученых – Донецк, 2008 г.; I Международная конференция «Электронная компонентная база. Состояние и перспективы развития» в рамках 3-го Международного радиоэлектронного форума «Прикладная радиоэлектроника. Состояние и перспективы развития» – МРФ-2008, Харьков.

Публикации. Результаты диссертации опубликованы в 49 печатных работах, в том числе 1 монография, 25 статей в специальных научных изданиях, (12 статей опубликованы в изданиях, входящих в международные наукомет-

рические базы) и 23 работы – в сборниках трудов международных и национальных конференций и форумов.

Структура и содержание работы. Диссертация состоит из введения, шести разделов, выводов, списка использованных источников и двух приложений. Общий объем работы составляет 325 страниц. Работа содержит 44 таблицы, 65 рисунков (из них 14 таблиц и 15 рисунков на 29 отдельных страницах), 236 наименований списка литературы на 25 страницах и два приложения на 19 страницах.

РАЗДЕЛ 1.

АНАЛИЗ ПРОБЛЕМ РАЗРАБОТКИ ИНФОРМАЦИОННО- АНАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ МОНИТОРИНГА И ОПТИМИЗАЦИИ ПРОЦЕССОВ ВЫРАЩИВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ

1.1. Анализ существующих систем мониторинга и управления качеством сложных технико-экономических процессов

Ведущие специалисты в области менеджмента качества установили, что качество выпускаемой продукции на 95% зависит от качества бизнес-процессов, и только на 5% зависит от других причин [4]. Поэтому большинство ведущих компаний в мире концентрируют свои усилия на повышении качества продукции путем совершенствования организации бизнес-процессов, а системы управления таких компаний называют системами управления (менеджмента) качеством.

Стандарты менеджмента качества направлены на применение *«процессного подхода»* при разработке, внедрении и улучшении результативности и эффективности системы управления качеством. Модель системы управления качеством, основанной на процессном подходе изображена на рис. 1.1. Эта модель показывает, что потребители играют существенную роль при определении входных данных. Мониторинг удовлетворенности потребителей требует оценки информации о восприятии потребителями выполнения их требований. Приведенная на рис. 1.1 модель охватывает все основные требования стандартов, входящих в семейство ИСО 9000 версии 2001 года, не детализируя их. Однако указанный подход к управлению качеством не охватывает в полной мере важнейшую составляющую производства – технологический процесс изготовления продукта, оказывая на него лишь косвенное влияние. В работе [4] изложена методология управления качеством в сложных технологических процессах. Для оценки состояния технологии и качества продукции, характеризующихся измеренными значениями технологических факторов и показа-

телей качества, которые описываются случайными величинами, предложено использовать энтропию, а для выявления взаимосвязи между технологией и качеством – количество информации. Рассмотрены две технологии: локальная, связанная с единицей продукции, и глобальная, регламентирующая производство продукции одного вида. При управлении качеством должна оптимизироваться локальная технология, а глобальная ограничивает область ее определения.

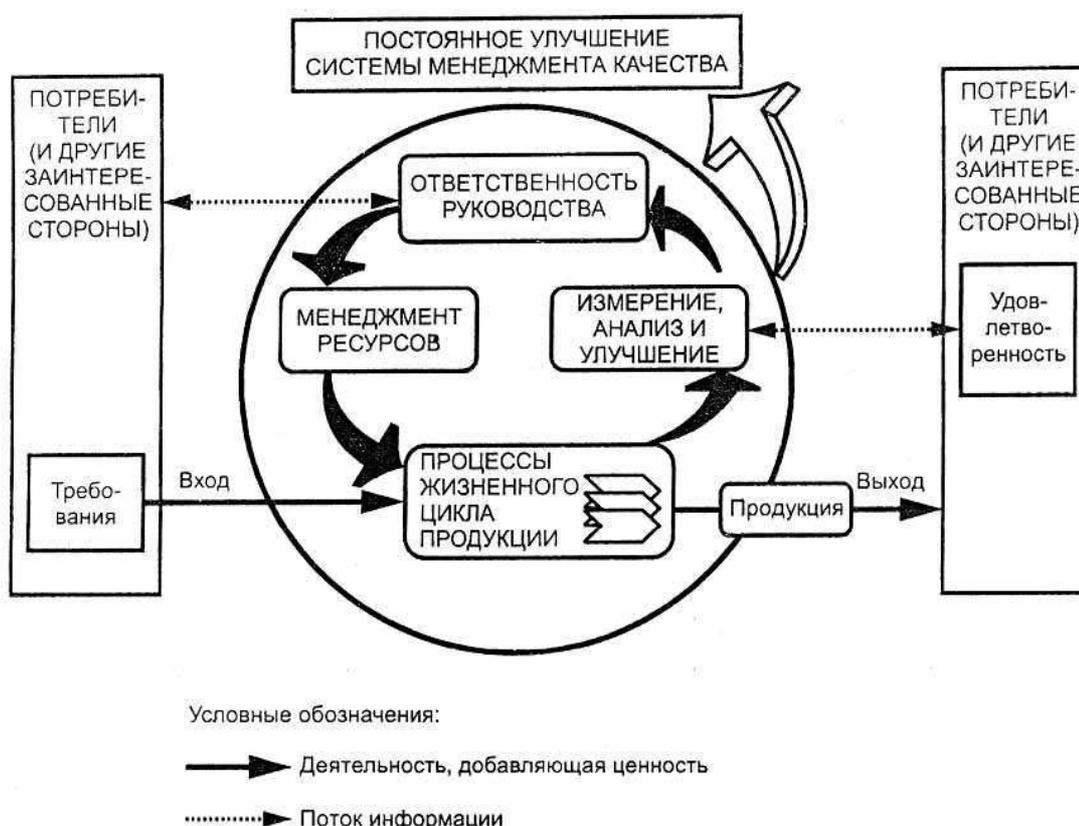


Рисунок 1.1 – Модель системы управления качеством, основанной на процессном подходе

В работе [5] описана система управления качеством непрерывнолитых заготовок, которая содержит практически все необходимые компоненты специализированной системы мониторинга и управления качеством сложного производственного процесса (рис. 1.2). Система включает три подсистемы: две технологических – динамическую систему вторичного охлаждения (ДСВО) и систему мягкого обжатия (СМО), которые на базе математического

моделирования процессов кристаллизации и мягкого обжатия обеспечивают рациональные технологические режимы непрерывного литья заготовок, направленные на повышение качества. В отличие от моделей других фирм, осуществлен подход к решению проблемы быстродействия при работе ДСВО, при котором определение температурного профиля слитка в реальном времени производится без решения дифференциального уравнения теплопроводности на каждом временном шаге мониторинга процесса.

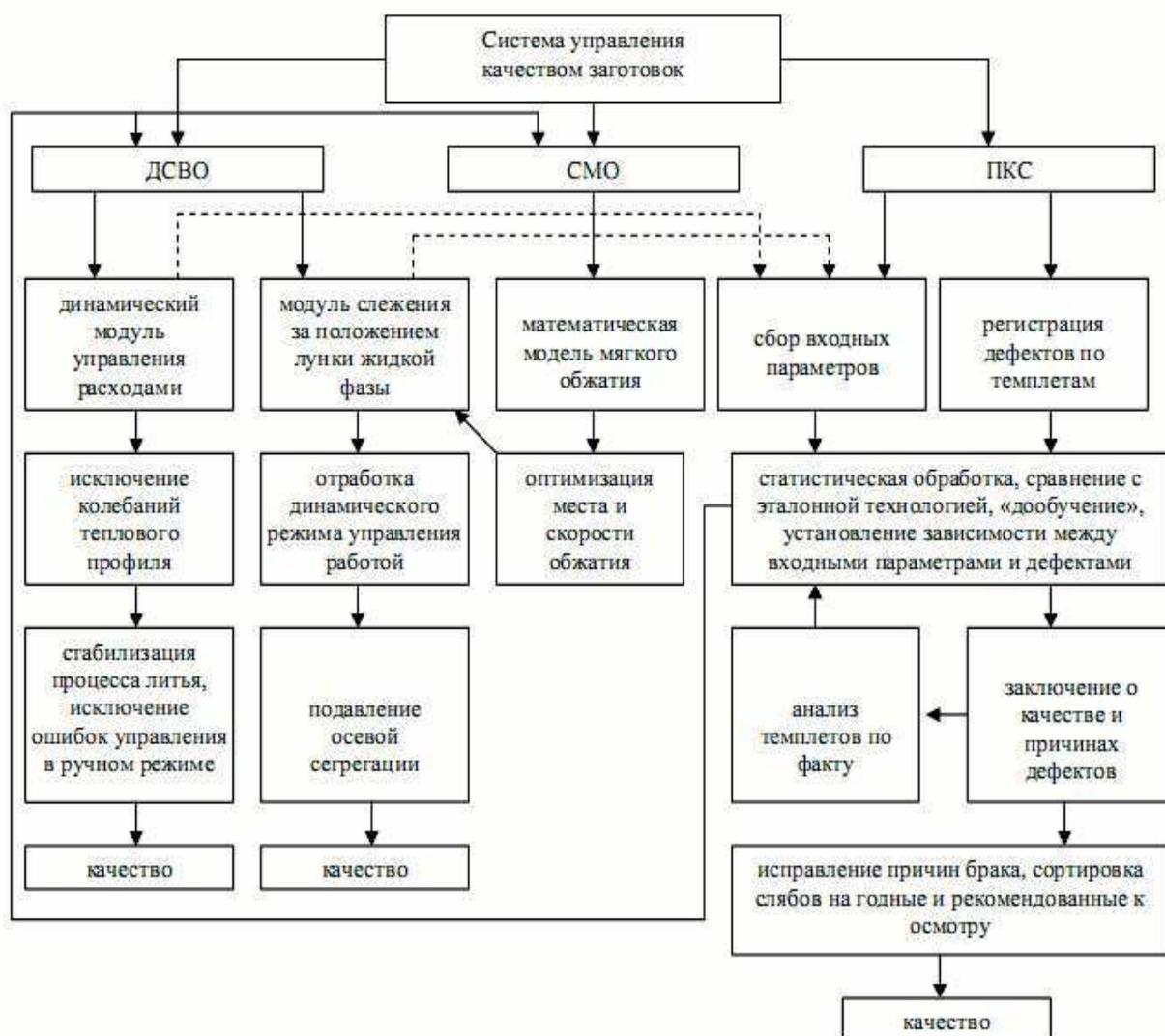


Рисунок 1.2 – Структура системы управления качеством процесса непрерывного литья заготовок

Третья подсистема – автоматизированная система прогнозирования качества слитков (ПКС) на основе автоматизированного непрерывного сбора данных с агрегатов и подсистем осуществляет расчетный прогноз качества за-

готовок. Принцип экспертной оценки и самообучения, лежащий в основе подсистемы прогнозирования, позволяет установить взаимосвязь между входными параметрами, характеризующими технологический процесс литья и эксплуатационное состояние оборудования, с характеристиками качества. Такой комплексный подход позволяет управлять качеством непрерывнолитых заготовок. Фактически речь идет об управлении качеством технологического процесса.

Таким образом, мы имеем наглядный пример системы мониторинга и управления качеством сложного технологического процесса, в которой реализованы такие составляющие:

- прямое измерение параметров процесса;
- моделирование физических явлений процесса;
- оптимизация режима;
- анализ качества продукта;
- прогноз качества изделия в процессе изготовления.

Как указывалось выше, вид и реализация применяемых в данной системе моделей, алгоритмов и информационных технологий полностью определяются спецификой технологического процесса. Ясно, что речь идет, прежде всего, о сложных технологических системах и процессах. Далее рассмотрим концепции и проблемы мониторинга сложных производственных систем и процессов.

1.2. Анализ концепций и проблем мониторинга сложных производственных систем и процессов

Создание методов и информационных технологий мониторинга и управления сложными производственными процессами, к которым относится процесс выращивания монокристаллов полупроводников, является актуальной проблемой. Многие существующие и проектируемые сложные технические объекты являются, как правило, дистанционно управляемыми с помощью

операторов (операторов-технологов). Информация для операторов о текущих состояниях и функционировании сложных технических систем и процессов (СТСП) передается в виде значений параметров процесса, характеризующих технологический режим. Количество таких параметров для многих систем и процессов достаточно велико, что существенно усложняет их восприятие и интерпретацию состояний СТСП в целом. Необходимость описания СТСП в различных сферах человеческой деятельности, усложнение технических решений для СТСП, требования к постоянному повышению квалификации экспертов предметной области и специалистов по эксплуатации СТСП, а также многие другие важные аспекты повышают значимость создания интеллектуальных информационных технологий (ИИТ) и реализующих их программных комплексов, позволяющих реализовать мониторинг состояния и управление СТСП.

СТСП характеризуются перечнем специфических особенностей, которые ставят для разработчиков ИИТ и соответствующих ПК ряд серьезных задач, таких, как:

- структуризация и формализация неполных, нечетких, разнотипных и даже противоречивых исходных данных и знаний об объекте на этапе сбора информации и формирования базы знаний (БЗ);
- обработка больших потоков информации, формируемых значительным количеством контролируемых параметров;
- повышение достоверности и уменьшение избыточности информации на этапе ее обработки;
- обеспечение функционирования системы мониторинга в режиме реального времени: обработка поступающей на ее вход информации (управление получением данных, прием-передача данных между функциональными элементами системы, синхронизация процесса анализа и управления), анализ значений параметров, формирование и выдача (при необходимости) управляющего воздействия на ОУ со скоростью не ниже скорости развития событий на объекте.

Отличительная черта СТСП состоит еще и в том, что в процессе функ-

ционирования возможны различные изменения поведения контролируемых объектов и систем, вызванные возмущающими факторами стохастического характера. Это обуславливает необходимость осуществлять оперативное формирование прогнозов, при которых обнаружение и ликвидация сбоев и отказов будут происходить значительно раньше, чем станут проявляться возможные последствия неисправностей. Указанные аспекты особенно важны для организационно-технических комплексов, критичных к управлению при возникновении нештатных ситуаций в условиях дефицита времени.

Таким образом, для обеспечения требуемой степени качества и оперативности управления СТСП необходимо, во-первых, обеспечить алгоритмизацию процессов смысловой интерпретации всех возможных штатных и нештатных состояний их функционирования и, во-вторых, обеспечить решение этой задачи в реальном времени с учетом свойств СТСП.

Основным способом выявления (диагностики) состояния объекта мониторинга служат сбор, обработка и анализ измерительной информации. Здесь под состоянием понимается вектор значений изменяющихся в процессе производства свойств (качеств) объекта мониторинга, характеризующих его качество с точки зрения конечного пользователя. Сбор измерительной информации есть процесс получения и распределения значений измеряемых параметров. Под обработкой измерительной информации понимается процесс получения оценок измеряемых параметров СТС на основе собранных данных, снабженных показателем степени доверия к этим оценкам [6].

Целью мониторинга состояния СТСП является получение обобщенных оценок совокупности параметров СТСП, значения которых в явном виде либо указывают степень работоспособности объекта или место и вид возникшей неисправности, либо являются оценками прогнозируемых явлений и процессов с заданной точностью и интервалом прогноза и т.п.

Необходимо отметить, что в настоящее время в подавляющем большинстве случаев процесс мониторинга СТСП автоматизирован лишь частично. Как правило, в современных автоматизированных системах операторам представ-

ляется смысловая информация только о состояниях отдельных элементов объекта управления. Интегральную оценку состояния объекта в таких системах выполняют операторы. Для этого им требуется уметь оперативно анализировать многочисленные контекстные условия процессов динамического взаимодействия элементов и подсистем объекта, что практически невозможно реализовать в полном объеме, особенно в режиме реального времени.

При наличии большой разнотипности СТСП в различных предметных областях и разнообразия обрабатываемой информации при проектировании систем мониторинга СТСП необходимо учитывать такие требования:

- малые сроки «постановки на информационное обслуживание» новых объектов автоматизации (ОА) и, соответственно, небольшая стоимость этого процесса;
- невысокие требования к программистской квалификации сопровождающего и обслуживающего персонала;
- унификация и модульность построения используемых программно-алгоритмических средств, что позволяет быстро комплектовать нужные версии в зависимости от конкретных условий и целей применения;
- устойчивая (надежная) работа систем мониторинга при возникновении различных критических и нештатных ситуаций;
- режим обработки данных «в реальном времени».

Для максимального удовлетворения всех перечисленных противоречивых требований, предъявляемых к автоматизированным системам мониторинга состояния СТСП, необходимо отойти от традиционно используемых при проектировании таких систем технологий и архитектур и учесть следующие современные тенденции и перспективы развития информационных технологий (ИТ) [2]:

1. Переход от классических способов вычислений к альтернативным (параллельным и квазипараллельным) способам организации вычислительного процесса.
2. Ориентация на разработку и применение методов и моделей вычислитель-

ного интеллекта.

3. Многоагентный подход к построению систем мониторинга и поддержки принятия решений.

Фундаментальный вклад в становление методологической основы разработки технологий автоматизированного анализа измерительной информации (ААИИ), прямо или косвенно предназначенных для решения задач мониторинга состояний ТС, внесли отечественные и зарубежные ученые [6–38], развившие базовые элементы таких научных направлений, как теория идентификации сложных объектов, теория моделирования, теория автоматов, теория искусственного интеллекта, теория нечетких множеств, теория нейронных сетей, теория распознавания образов, теория статистических выводов и решений и др.

Все перечисленные направления, хотя и проработаны достаточно глубоко, не в состоянии обеспечить единым методологическим аппаратом процессы проектирования, разработки, сопровождения систем мониторинга в оговоренных выше условиях. Такое положение имеет место обычно из-за того, что методы, теории и выводы некоторых из названных направлений затрагивают слишком широкую сферу приложений и не могут учесть специфику определенной предметной области, что в целом приводит к принятию неоптимальных решений при выборе методов и технологий мониторинга ТСП определённого класса. Так, например, известные подходы недостаточно эффективно или вообще не обеспечивают решение ряда основных проблем, стоящих перед теорией и практикой автоматизированного мониторинга ТСП. Такими проблемами являются:

- отсутствие единой концептуальной основы в построении информационных технологий и систем мониторинга, функционирующих в различных условиях применения и целевого назначения;
- принципиальная невозможность единого формального описания различных видов ТП и их состояний, физических явлений и процессов из-за применения различного математического аппарата для различных целей анализа и синтеза;

- наличие большого количества форм представления данных и, соответственно, типов моделей представления знаний об объекте мониторинга, обусловленное существованием специализированных подходов;
- отсутствие теоретического обоснования структуры и состава информационных технологий, способных обеспечить эффективное решение задач мониторинга СТСП.

Одна из главных причин существующих проблем имеет методологический характер и состоит в том, что при разработке специализированных систем мониторинга зачастую игнорируются требования системного подхода к проектированию подобного рода систем. Это, в частности, проявляется в осуществлении автоматизации лишь отдельных этапов процесса сбора и обработки информации или в решении на ЭВМ некоторых расчетных задач без рассмотрения проблемы в целом. Другими словами, не осуществляется комплексная разработка технологий мониторинга СТСП.

Таким образом, проблемы создания и развития автоматизированных систем мониторинга – это, прежде всего, системные, модельно-алгоритмические и информационные проблемы, требующие для своего решения системного подхода и междисциплинарных исследований. Это означает, что создание специализированного программного обеспечения для автоматизации процессов мониторинга и управления состояниями СТСП необходимо начинать с изучения всех особенностей соответствующей предметной области.

В частности, системный анализ процессов создания, внедрения и сопровождения АСУ процессов выращивания монокристаллов позволил сформулировать следующие основные проблемы, приводящие к снижению эффективности систем автоматизированного управления данным процессом:

- оценивание текущего состояния процесса и принятие решения по его коррекции проводятся практически вручную, без использования автоматизированных систем поддержки принятия оперативных решений, что приводит к низкой оперативности получения информации о состоянии процесса, особенно при возникновении критических и нештатных ситуаций (НС). Все это

может привести (и приводит) к принятию ошибочных или несвоевременных решений;

- отсутствуют единые базы данных и знаний обо всех этапах производственного процесса, что ограничивает оперативный доступ к информации о причинах НС, эффективности проведенных доработок, направленных на устранение этих причин;

Проведенный анализ показывает очевидную необходимость использования современных принципов, базирующихся на перспективных интеллектуальных информационных технологиях для автоматизированного сбора, интеграции и комплексного анализа всех видов информации, циркулирующей в контурах как отдельных АСУ ТП, так и АСУ предприятия в целом.

Далее рассмотрим, какими возможностями располагают существующие системы управления процессом выращивания монокристаллов полупроводников, а также необходимость мониторинга и коррекции этого процесса.

1.3. Анализ существующих моделей и инструментальных средств мониторинга и управления качеством процесса выращивания монокристаллов

Вначале кратко рассмотрим особенности производства монокристаллов арсенида галлия, как наиболее востребованного в настоящее время в электронной промышленности с одной стороны и наиболее трудоемкого в изготовлении монокристаллов – с другой стороны.

В промышленном производстве монокристаллов GaAs используются три метода выращивания [39 – 41]:

- метод Чохральского с жидкостной герметизацией расплава слоем борного ангидрида (Liquid Encapsulated Czochralski – LEC), используется, в основном для получения нелегированного полуизолирующего GaAs (LEC-ПИН-GaAs);
- метод горизонтальной направленной кристаллизации (ГНК) в вариантах «по Бриджмену» (Horizontal Bridgman – HB) или «кристаллизации в движущемся градиенте температуры» (Horizontal Gradient Freeze – HGF), использу-

ется для получения кристаллов n-типа проводимости, легированных Si;

- метод вертикальной направленной кристаллизации в тех же двух вариантах (Vertical Bridgman — VB Vertical и Gradient Freeze – VGF), используется для получения как легированных донорными примесями кристаллов, так и для получения нелегированного арсенида галлия.

Метод ЛЕС является одним из основных в производстве монокристаллов GaAs. При выращивании монокристаллов арсенида галлия методом Чохральского с жидкостной герметизацией расплава необходимо учитывать, что процесс осуществляется при достаточно больших осевых и радиальных градиентах температуры вблизи фронта кристаллизации, т.е. в области максимальной пластичности материала. Очевидным следствием роста кристалла при высоких градиентах температуры при таких условиях является высокая плотность дислокаций, типичные значения которой составляют от $1 \cdot 10^4$ до $2 \cdot 10^5$ см⁻² в зависимости от диаметра слитка [41].

Существующие информационные технологии мониторинга процесса выращивания реализуют традиционные функции, присущие автоматизированным системам управления технологическими процессами – измерение, контроль, стабилизацию и программное регулирование основных параметров процесса. Однако требования к воспроизводимости результатов технологических процессов при достаточно высоких значениях показателей качества выращенных кристаллов растут.

Вопросу создания методов и моделей для систем управления процессом выращивания уделялось достаточно большое внимание с самого начала промышленного производства монокристаллов полупроводников. Достаточно подробный анализ развития автоматизации управления процессом выращивания монокристаллов по методу Чохральского представлен в работе [42].

Первые системы динамических моделей, описывающих процесс выращивания монокристаллов, были получены на основе классического подхода к решению задачи идентификации объекта управления [43–46]. Модель процесса выращивания в пространстве состояний была предложена и развита Г.А. Сатункиным [47].

В работах [48–52] развит подход к моделированию передаточных функций, необходимых для регулирования диаметра растущего кристалла, на основе использования класса комбинированных моделей «передаточная функция – шум». Описание процедуры синтеза схемы регулирования с применением такой модели представлено в [52].

Общие и частные подходы к проектированию автоматизированных систем управления процессом выращивания слитков по методу Чохральского достаточно подробно изложены в работах [53–63], а принципы построения системы управления технологическим процессом выращивания с поддержанием заданных диаметра и температуры расплава изложены в [64–74]. Примером реализации этих подходов и принципов может служить автоматизированная система, описанная в работе [64]. В этой двухуровневой системе реализована настройка всех локальных контуров регулирования параметров процесса от центральной ЭВМ. При этом обеспечена возможность с помощью одной ЭВМ управлять работой нескольких установок; информационная база системы основана на использовании промышленных СУБД; обеспечена информационная связь с другими технологическими участками производства; заложена возможность идентификации управляемых процессов и адаптации параметров используемых моделей.

Непосредственно на одной ростовой установке для выращивания GaAs оператором производится мониторинг следующих параметров технологического процесса:

- текущее значение температуры основного нагревателя;
- текущее значение напряжения, тока, мощности основного нагревателя и сопротивления нагревателя;
- текущее значение тока, напряжения и мощности фонового нагревателя;
- текущее значение скорости перемещения штока затравки;
- текущее значение скорости перемещения штока тигля;
- текущее значение частоты вращения штока затравки;
- текущее значение частоты вращения штока тигля;
- положение тигля;

- длину слитка;
- текущее значение диаметра слитка;
- текущее значение температуры охлаждающей воды на входе и выходе установки и наличие ее на каждом контуре;
- текущее значение давления инертного газа в камере;
- токи нагрузки электродвигателей приводов тигля и затравки;
- длительность проведения процесса с момента подачи напряжения на нагреватель.

Указанные выше параметры лишь косвенно влияют на качество выращиваемого слитка. Факторами, прямо влияющими на возникновение структурных дефектов, являются, прежде всего, температурные напряжения в выращенном слитке, несимметричность теплового поля ростовой камеры, изменение формы фронта кристаллизации, происходящее из-за неконтролируемых колебаний температуры расплава. Поэтому с точки зрения технологов крайне желательно контролировать температурное поле в расплаве на всех стадиях выращивания. В частности, для обеспечения требуемого уровня структурного совершенства монокристалла необходим контроль осевых и радиальных температурных градиентов в слитке и в расплаве, особенно в зоне фронта кристаллизации. Существующие методы и системы контроля процесса выращивания не позволяют осуществить эти функции. Необходимо осуществлять косвенные измерения параметров процесса выращивания, таких как температурное поле расплава в зоне фронта кристаллизации, температурное поле слитка, осевые и радиальные температурные градиенты в слитке и интерпретировать эти показатели в контексте задачи диагностики ситуации и прогноза качества выращиваемого монокристалла. Это и есть основная задача мониторинга процесса выращивания. Для решения этой задачи необходимо использовать вычислительные методы и современные интеллектуальные информационные технологии.

Анализ возможностей SCADA-систем в контексте мониторинга процесса выращивания монокристаллов. SCADA-системы обеспечивают цеховой уровень автоматизации, связанный, прежде всего, с получением и визуализа-

цией информации от программируемых контроллеров и распределенных систем управления. В силу тех требований, которые предъявляются к системам SCADA, спектр их функциональных возможностей определен и реализован практически во всех известных программных пакетах. Основные возможности и средства, присущие всем системам таковы:

- автоматизированная разработка, дающая возможность создания программного обеспечения (ПО) системы автоматизации без реального программирования;
- средства сбора и обработки первичной информации от полевых устройств;
- средства управления и регистрации сигналов об аварийных ситуациях;
- средства хранения информации с возможностью ее пост-обработки (как правило, реализуется через интерфейсы к наиболее популярным базам данных);
- средства визуализации представления информации в виде графиков, гистограмм и т.п.

Основу большинства SCADA-пакетов составляют несколько программных компонентов (база данных реального времени, ввода-вывода, предыстории, аварийных ситуаций) и администраторов (доступа, управления, сообщений).

Большинство SCADA-систем имеют встроенные языки высокого уровня, VBasic-подобные языки, позволяющие сгенерировать адекватную реакцию на события, связанные с изменением значения переменной, с выполнением некоторого логического условия, с нажатием комбинации клавиш, а также с выполнением некоторого фрагмента с заданной частотой относительно всего приложения или отдельного окна.

Разработка собственных программных модулей. Перед фирмами-разработчиками систем автоматизации часто встает вопрос о создании собственных (не предусмотренных в рамках систем SCADA) программных модулей и включение их в создаваемую систему автоматизации. Поэтому вопрос об открытости системы является важной характеристикой SCADA-систем. Фактически открытость системы означает доступность спецификаций системных (в смысле SCADA) вызовов, реализующих тот или иной системный сервис.

Это может быть и доступ к графическим функциям, функциям работы с базами данных и т.д. Технология программирования близка к интуитивному восприятию автоматизируемого процесса. Объектно-ориентированное программирование, используемое в большинстве этих пакетов, делает эти продукты легкими в освоении и доступным для широкого круга пользователей. При необходимости использования специализированных (например, нейросетевых) моделей, предназначенных для косвенного многоточечного измерения параметров температурных полей, построения имитационных моделей процесса кристаллизации и т.п. такие модели и процедуры необходимо кодировать на языках высокого уровня и встраивать в SCADA-систему.

Драйверы ввода-вывода. Современные SCADA-системы не ограничивают выбора аппаратуры нижнего уровня, так как предоставляют большой набор драйверов или серверов ввода-вывода и имеют хорошо развитые средства создания собственных программных модулей или драйверов новых устройств нижнего уровня.

Построение прикладной системы на основе любой из рассмотренных SCADA-систем резко сокращает набор необходимых знаний в области классического программирования, позволяя концентрировать усилия по освоению знаний в самой прикладной области.

Следует отметить тенденции включения SCADA-систем в системы комплексной автоматизации предприятия. Это обеспечивает точную, своевременную информацию на каждом уровне производства.

Таким образом, если существующая АСУ ТП спроектирована на базе SCADA-системы, то добавление надстроек, предназначенных для мониторинга температурных полей и поддержки принятия оперативных решений по коррекции теплового режима потребует разработки программного кода на языках высокого уровня.

Проблема мониторинга диаметра слитка. Качество и выход годной продукции при производстве монокристаллов напрямую зависят от точности

регулирования диаметра слитка в процессе его выращивания и, как следствие, от точности контроля этого параметра. В промышленных условиях для контроля диаметра растущего монокристалла основное применение нашли методы взвешивания кристалла или тигля с расплавом [77], контроля уровня расплава [75], оптические и телевизионные, а также рентгеноскопический [77] методы контроля диаметра слитка.

Роль математического моделирования в мониторинге процесса выращивания. Очевидно, что косвенное измерение параметров температурного поля в расплаве и слитке в целях мониторинга возможно только путем расчетов. Численное моделирование тепловых полей и процессов тепломассопереноса в ростовых установках обычно проводится методами конечных разностей и конечных элементов [78–85]. В многочисленных работах, посвященных этому вопросу, предлагаются локальные и глобальные модели, основанные на уравнениях Навье-Стокса, уравнениях неразрывности и уравнениях Стефана [86 – 101]. В работах [97–116] приводятся результаты моделирования тепловых полей, явлений тепломассопереноса и образования дислокаций при выращивании GaAs по ЛЕС-технологии. Задача о распределении скоростей и температур во вращающемся расплаве чаще всего сводится к совместному решению системы уравнений Навье-Стокса и переноса энергии Фурье-Кирхгофа, записанной для цилиндрической системы координат. Рассчитываются двумерные течения для осесимметричной задачи, а также вращательная компонента вектора скорости [95, 96].

Трудности получения решения уравнений Навье-Стокса численными методами связаны и со сложностью физического явления, и с неудобными величинами теплофизических параметров, характеризующих расплавы полупроводниковых материалов. С математической точки зрения коэффициент кинематической вязкости является малым параметром в уравнениях Навье-Стокса, а это необходимое условие возникновения пограничных слоев на твердых стенках исследуемой области. Таким образом, сетка разбиения ис-

следуемой области должна быть достаточно мелкой, чтобы получить решение задачи вблизи твердых стенок. На практике измельчение сеток приводит к резкому возрастанию затрат машинного времени, поэтому исследуемая область разбивается неравномерной прямоугольной сеткой. Этот факт говорит о том, что использовать «классический» подход к моделированию температурных полей в целях мониторинга не представляется возможным – непрерывно изменяются геометрические размеры слитка и расплава, а значит, необходимо непрерывно реконфигурировать расчетную сетку, что в условиях дефицита времени нереально на имеющихся вычислительных ресурсах.

Указанные выше проблемы полностью относятся и к контролю температурного поля в слитке. На данный момент общепринято мнение, что плотность дислокаций зависит от формы термических полей в зоне кристаллизации, которые дают начало термическим напряжениям в остывающем кристалле. Высокое напряжение, которое соответствует высоким температурным градиентам, приводит к образованию ядра дислокаций, которые скользят и размножаются в более поздних стадиях выращивания кристалла. Таким образом, возникает необходимость контролировать тепловое поле окружения растущего кристалла для уменьшения скорости остывания и уменьшения термических напряжений с целью достижения наивысшего качества монокристаллического материала [117–131].

Мониторинг температурного поля слитка также может быть осуществлен исключительно расчетным путем. В локальных и глобальных тепловых моделях для расчета тепловых полей в слитке используют метод конечных разностей (МКР) или метод конечных элементов (МКЭ). Основой для расчетов температурного поля в цилиндрической системе координат является уравнение теплопроводности Фурье-Кирхгофа [95].

Альтернативные методы расчета параметров температурных полей. Как было показано выше, исследование процессов тепломассопереноса сводится к решению дифференциальных уравнений в частных производных. Не-

смотря на то, что принципы решения таких уравнений хорошо изучены, сам процесс решения представляет собой сложную вычислительную задачу, требующую большого количества вычислительных ресурсов даже в случае поиска приближенного решения. В большинстве случаев задача сводится к сверхбольшой системе линейных алгебраических уравнений, решение которой дает приближенное значение искомой функции в некотором наборе точек – узлов дискретизации. Распространенные численные методы решения таких систем являются итеративными и предполагают последовательную, а не параллельную обработку данных. Очевидно, что оптимальное использование вычислительных ресурсов возможно только при максимальном распараллеливании процессов вычислений, что во многих случаях легко достигается при использовании альтернативных вычислительных технологий и в частности, нейронных сетей.

На текущий момент существует три основных направления применения нейронных сетей при решении дифференциальных уравнений в частных производных [133–137].

Первое использует идеи метода конечных элементов, а именно – получение решения дифференциального уравнения с помощью некоторого набора простых базисных функций. Такая форма решения может быть непосредственно отображена на архитектуру нейронной сети прямого распространения, в которой активационные функции нейронов соответствуют используемым базисным функциям, а весовые коэффициенты – коэффициентам, используемым при аппроксимации решения. Недостатком этого метода является то, что количество базисных функций очень велико и быстро растет с увеличением количества узлов задачи; при увеличении размерности задачи увеличивается количество параметров, необходимых для задания базисных функций. Это приводит к тому, что метод крайне плохо масштабируется и начинает проигрывать классическим численным методам при решении задач большой размерности [133].

Второе направление – решение полученной при применении метода ко-

нечных разностей системы линейных алгебраических уравнений обращением матрицы с помощью обучаемой нейронной сети с архитектурой Хопфилда [133]. Как известно, обучение сети с такой архитектурой соответствует минимизации энергетической функции. Если полученную систему линейных алгебраических уравнений отобразить на нейронную сеть так, чтобы энергетическая функция соответствовала невязке решения системы линейных уравнений, в результате обучения нейронной сети будет получено приближенное решение системы. Недостатком этого метода является большое время обучения и то, что обученную нейронную сеть нельзя применить для решения другой системы уравнений.

Третье направление – получение решения с помощью нейронных сетей класса персептронов [138–147]. В отличие от предыдущих двух методов, этот метод дает приближенное аналитическое, а не численное решение поставленной задачи, представленное в виде суперпозиции двух функций $U(x) = A(x) - F(x, N(x, p))$, где функция $A(x)$ удовлетворяет краевым условиям, а $F(x, y)$ обращается на границе области в ноль и частично задается нейронной сетью – обычным трехслойным персептроном, обучаемом на наборе заранее известных точек решения. В работах [134–137] представлены методики решения дифференциальных уравнений, использующие нейронные сети. Обычно сетка дискретизации отображается на структуру сети с помощью простых правил. Сеть, построенная с помощью этих правил, удовлетворяет заданным граничным условиям и в то же время имеет единственное стабильное состояние. Это состояние эквивалентно конечно-разностному представлению уравнения в частных производных и соответствует приближенному дискретному решению задачи. Метод проиллюстрирован решением нескольких простых примеров с известным аналитическим решением [135]. Решение, полученное с помощью нейронной сети, соответствующей равномерной сетке дискретизации, состоящей из $100 = 10 \cdot 10$ узлов, отклоняется от аналитического на значения порядка 10^{-6} , сравнимые со значениями, по которым происходит оста-

нов цикла обучения сети.

В работе [142] предложен подход к построению устойчивых математических моделей сложных физических, технических и других систем на основе методологии нейросетевого моделирования. Реализация этого подхода позволяет преодолеть многие проблемы моделирования (сложность геометрии, разномасштабность процессов, ошибки данных, погрешности вычислений и др.) как на начальном его этапе, так и при построении комплекса моделей по уточняемой разнородной информации. Исходя из изложенного, применение нейронной сети для расчета параметров температурного поля в контексте проблемы мониторинга тепловых полей кажется нам вполне обоснованным.

Таким образом, при решении задачи мониторинга процесса выращивания монокристаллов необходимо в первую очередь реализовать мониторинг температурных полей расплава и слитка. Поскольку мониторинг параметров технологического процесса должен быть реализован в рамках информационно-аналитической системы управления качеством (ИАС), далее рассмотрим информационные технологии, мониторинга и анализа ситуаций, реализуемые в таких системах.

1.4. Анализ информационных технологий мониторинга и распознавания ситуаций в информационно-аналитических системах

Особенности ИАС как информационных систем. Для создания специализированной информационно-аналитической системы, реализующей функции мониторинга СПП, необходимо рассмотреть типовые функции существующих ИАС и их основные системные свойства, а также методы и модели, используемые для осуществления мониторинга процессов, имеющих сложную структуру.

Термином «ИАС» в настоящее время обозначаются информационные системы, обеспечивающие сбор и всестороннюю аналитическую обработку данных (то есть, мониторинг) в целях комплексной автоматизации всех биз-

нес-процессов предприятия. Данные в систему могут заноситься как вручную, так и автоматически. Сбор, обработка данных мониторинга, ее анализ и предоставление согласно поступающим запросам осуществляется специализированными подсистемами информационно-аналитической системы. Следует заметить, что ИАС часто играют объединяющую роль, консолидирует разрозненные информационные технологии в единую интегрированную информационную систему управления предприятием.

ИАС можно разделить на два класса – системы, обрабатывающие информацию по запросам пользователя и системы осуществляющие функции мониторинга и анализа ситуаций без непосредственных запросов, генерирующие сообщения и рекомендации по результатам мониторинга в случае необходимости.

ИАС, обрабатывающие запросы пользователя различаются по режиму и темпу анализа данных [2, 5, 149]:

- статические – имеют заранее разработанный сценарий обработки данных при весьма ограниченных возможностях вариаций запросов — так называемые информационные системы руководителя (Executive Information system EIS);
- динамические – обеспечивают обработку нерегламентированных запросов и гибкую систему подготовки отчетов.

Статические ИАС при всей кажущейся простоте и соответственно привлекательности для ЛПР имеют ограниченные возможности по информационной поддержке принятия решений.

Зачастую полученная в отчетах информация порождает вытекающие из ее содержания вопросы, на которые в допустимое время ответ не может быть получен.

Динамические ИАС предназначены для обработки незапланированных заранее, неожиданных (ad hoc) запросов. Пользователи системы работают с такой ИАС в интерактивном режиме. Обрабатывается серия непредусмотрен-

ных заранее запросов, которые возникают в ходе подготовки и принятия решения. Заранее может быть подготовлена некоторая цепочка действий или сценарий, который может корректироваться. Поддержка принятия управленческих решений осуществляется в следующих режимах или базовых сферах [149, 150]:

- сфера детализированных данных;
- сфера агрегированных показателей;
- сфера закономерностей.

В сфере детализированных данных подсистемы ИАС нацелены на поиск данных. Эту задачу обычно выполняют реляционные СУБД. В качестве языка манипулирования данными, ставшего стандартным, используется, как правило, SQL. Для поиска детализированной информации используются информационно-поисковые системы, которые могут работать с операционными, локальными или региональными базами и хранилищами данных, а также и совместно с центральным хранилищем данных.

Сфера агрегированных показателей отличается агрегацией данных, оперативной аналитической обработкой, многомерным представлением в виде гиперкубов, многомерным анализом. В этой сфере используются специальные многомерные СУБД. Допустимо использование реляционных представлений данных. Агрегированные массивы при реляционном подходе представлены в виде схемы «звезда». Агрегация может производиться также «на лету» при обработке запроса. Анализ детализированных данных и агрегированных показателей относится к оперативному или OLAP-анализу [151].

ИАС, осуществляющие функции мониторинга и анализа ситуаций функционируют в сфере закономерностей и основаны на интеллектуальной обработке данных. Главной задачей здесь выступает выявление закономерностей в исследуемых процессах, взаимосвязей и взаимовлияния различных факторов, поиск крупных «непривычных» отклонений, прогноз хода различных процессов. Эта сфера относится к интеллектуальному анализу (Data

mining) [151].

ИАС, функционирующие в сфере закономерностей, ориентированы на обработку информации, обладающей такими свойствами, как:

- разнородность информации: информация может иметь различный формат: числовые данные, лингвистические описания и т. д.;
- фрагментарность: информация чаще всего относится к какому либо фрагменту проблемы, причем разные фрагменты могут быть по-разному «покрыты» информацией;
- разноуровневость: информация может относиться ко всей проблеме в целом, к некоторой ее части, к конкретному элементу проблемы;
- различная степень надежности: информация может содержать конкретные данные различной степени надежности, косвенные данные, результаты выводов на основе надежной информации или косвенные выводы;
- возможная противоречивость: данные из различных источников могут совпадать, слегка различаться или вообще противоречить друг другу.
- изменяемость во времени: проблема/процесс развивается во времени, поэтому и информация в разные моменты времени об одном и том же элементе проблемы может и должна различаться.

Одной из функций ИАС, функционирующих в сфере закономерностей, является мониторинг и анализ слабоструктурированных временных рядов.

Мониторинг слабоструктурированных временных рядов. Основным объектом мониторинга в контексте настоящей работы является температурное поле в процессе выращивания монокристалла. Особенностью данного процесса является то, что его структура и законы поведения недостаточно стабильны во времени. По мере роста монокристалла кардинально меняются тепловые поля внутри установки, конвекционные потоки внутри расплава и т.д. Другими словами, процесс слабо структурирован и, соответственно, может быть представлен набором слабоструктурированных временных рядов (СВР). Применение интеллектуальных технологий в области анализа СВР объясняется ог-

раниченными возможностями использования традиционных подходов, основанных на методах регрессионного анализа, спектральных преобразований, экспоненциального сглаживания и других вычислительных технологий применительно к анализу СВР. Структура таких рядов априори неизвестна, а, следовательно, не представляется возможности априорного подбора подходящих структур регрессионных, корреляционных, спектральных или иных математических моделей, разрабатываемых в рамках классических теорий.

Интеллектуальные технологии анализа СВР включают четыре основные направления, которые могут быть использованы при разработке системы мониторинга процесса выращивания монокристаллов:

- нейросетевые модели;
- нечетко-логические модели;
- перцептивный анализ;
- гибридные системы.

Искусственные нейронные сети (ИНС) являются одним из наиболее успешных инструментов анализа ВР, который с успехом может применяться и для анализа СВР [154]. Теоретическим основанием для использования нейросетевых моделей в области анализа ВР служит фундаментальная теорема Такенса [154], которая, основываясь на принципе повторяемости наблюдений, позволяет дать утвердительный ответ о принципиальной возможности прогнозирования будущих значений ряда на основе конечного числа его предшествующих значений. Теорема Такенса предполагает использование в качестве прогнозирующей модели авторегрессионную схему общего вида:

$$X(t+d) = \psi(x(t), \dots, x(t-l), \mu_1, \mu_2, \dots, \mu_k), \quad (1.1)$$

где d – лаг прогнозирования; l – ширина окна погружения; k – количество независимых переменных.

Формула (1.1) позволяет задачу прогнозирования ВР свести к типовой задаче нейроанализа – аппроксимации функций нескольких переменных по

заданному набору примеров путем погружения модели ВР в многомерное пространство. Существенным развитием нейросетевого анализа ВР является использование искусственных нейронных сетей с временной задержкой (НСВЗ), отличающихся наличием петель обратной связи. Типичными представителями НСВЗ являются сети Джордана и Элмана (Jordan and Elman) [155]. Эти сети используют контекстные слои для отображения в них информации о предыдущих значениях ВР. Однако НСВЗ при их практическом использовании в задачах прогнозирования ВР имеют ряд существенных недостатков, связанных с обучением, а именно, требуют длительного времени обучения и имеют повышенную склонность к зависаниям [156]. Этому недостатка в значительной мере лишены рекуррентные ИНС специального вида, предложенные в [156], и получившие название мультиконтекстных рекуррентных ИНС (МКРНС). Такая ИНС состоит из четырех слоев: входного, скрытого, выходного, и мультиконтекстного. Мультиконтекстный слой связан напрямую с выходным слоем, что уменьшает зависимость выхода сети от скрытых слоев и ускоряет процесс обучения.

Обобщая опыт практического использования нейросетевых технологий в задачах анализа ВР [157], можно отметить, что ИНС превосходят по точности прогноза многие классические модели при работе с многомерными экспериментальными данными, что является чрезвычайно полезным для их практического использования в системе мониторинга температурного поля расплава.

Нечетко-логические модели (НЛМ) как средство моделирования ВР представляют собой, в определенной мере, альтернативу нейросетевым моделям. Являясь, как и ИНС, универсальными нелинейными аппроксиматорами данных, НЛМ используются в качестве инструмента реализации нелинейной авторегрессионной модели, описывающей динамику исследуемого процесса или как модель распознавания ситуации. Однако, в отличие от ИНС, функционирование которых осуществляется по принципу «черного ящика», НЛМ, опираясь на легко интерпретируемую лингвистическую информацию, пред-

ставленную в форме правил, обеспечивают возможность эффективной интеграции априорных знаний в модель исследуемого процесса. Последнее качество оказывается чрезвычайно важным при работе со слабо структурированными процессами, дефицит информации, о которых может быть частично восполнен априорными экспертными знаниями.

По аналогии с динамическими ИНС в основу построения динамических НЛМ положена идея трансформации динамики процесса в статику методом погружения, для чего нечетко-логическая модель дополняется входами обратной связи, на которые подаются задержанные во времени сигналы. Полученная таким образом нечеткая система реализует нелинейное отображение предшествующих значений ВР в последующее выражение: $X(t-1) \times X(t-2) \times \dots \times X(t-k) \rightarrow X(t+1)$. Реализация данного выражения в нечетко-логической модели опирается на известный формализм нечеткой логики, представляющий общий каркас для моделирования нечеткой информации, ядром которого являются нечеткие правила вида “ЕСЛИ <<УСЛОВИЕ>>, ТО <<Действие>>”.

Развитием динамических НЛМ является использование НЛМ с несинглетным выводом [158], обрабатывающими входные данные в виде нечетких множеств. Это делает возможным исключить этап дефаззификации данных, полученных на предшествующих итерациях, и использовать их непосредственно в качестве входных данных на последующих итерациях прогнозирования, что повышает устойчивость и надежности работы системы. Экспериментальные исследования с динамическими НЛМ, проведенные в [159] показали, что они обладают несомненными преимуществами перед соответствующими статическими нечеткими системами в задачах моделирования процессов неизвестного порядка и структуры.

Перцептивный анализ данных из временных рядов (ПАДВР) – есть комплекс моделей и методов, поддерживающих процедуры принятия решений на основе перцепций (восприятий) в задачах, связанных с анализом ВР [160],

включая задачи перцептивного прогнозирования, экстраполяции и интерполяции данных в БД ВР. В основе перцептивного анализа лежит предположение о том, что принятие решений человеком в трудно формализуемых ситуациях во многом основано на его перцептивных возможностях, т.е. восприятию зависимостей между параметрами наблюдаемых процессов с их последующим словесным описанием. Перцептивный анализ исходит из возможности описания характера поведения исследуемого процесса в виде перцептивных зависимостей, представленных в форме вербальных правил, с последующим выводом на основе правил решений. Для реализации процедур перцептивного вывода развивается предложенная Л.Заде методология вычисления со словами и перцепциями [161]. Базовой моделью является гранулярная модель, представляющая собой систему нечетких функций-перцепций, и позволяющая преобразовывать нечеткие множества, поданные на вход модели, в нечеткие множества на выходе. Каноническим представлением перцептивной временной функции является правило продукции типа: “*If X is T_k then Y is S_h* ”, где T_k – значение лингвистической временной переменной X , S_h – лингвистический терм, т.е. описание функции Y при значении X , равном T_k . Данные правила образуют БЗ модели ПАДВР.

Гибридные системы. Одной из ведущих тенденций, определяющих развитие современных информационных технологий, стало распространение интегрированных и гибридных систем, основанных на совместном использовании разнородных моделей временных рядов, каждая из которых способна учитывать индивидуальные особенности и свойства ВР, что позволяет при их совместном использовании добиваться наилучших результатов. Среди множества предлагаемых подходов к построению гибридных систем для анализа ВР можно выделить два самостоятельных направления: подходы на основе поверхностной гибридизации и подходы на основе глубинной гибридизации.

Подходы на основе поверхностной гибридизации реализуют идею простого комбинирования индивидуальных прогнозов, независимо полученных

на основе использования нескольких частных моделей. Простейшие модели, полученные на основе комбинирования прогнозов с использованием различного вида весовых коэффициентов, достаточно полно представлены в обзоре [162]. Там же дано обоснование эффективности комбинированных прогнозов, определяемой в терминах дисперсии ошибки прогноза. Форма распределения ошибки комбинированных прогнозов и ее соответствующее стохастическое поведение исследовались в [163]. Было также показано, что выбор метода комбинирования существенным образом влияет на закон распределения ошибки прогноза. Наиболее типичным методом комбинирования является линейная смесь индивидуальных прогнозов с весовыми коэффициентами, полученными в результате анализа прошлых наблюдений [164]. Существенным развитием линейных комбинированных моделей являются нелинейные модели, основанные на комбинировании частных прогнозов с использованием нечетких систем, позволяющие интегрировать в модель априорные экспертные знания об эффективности прогнозирования той или иной модели. Такой подход был реализован в [165] и содержал в качестве нелинейной компоненты зависимую от времени весовую схему, реализованную на основе нечеткой системы, объединяющей множества индивидуальных прогнозов. В работе [166] была реализована идея комбинирования частных прогнозов на основе нечеткой системы с последующим применением метода Байеса для объединения априорной информации с оценкой комбинирующих весовых коэффициентов.

Идеи использования глубинной гибридизации в области анализа ВР и процессов были высказаны многими авторами; в частности, они получили наиболее полное развитие в работах российских ученых Н.Г. Ярушкиной и Л.Г. Комарцовой [167, 168]. В работах этих ученых были предложены гибридные системы, основанные на комбинировании различных типов нейросетевых моделей, нечетких систем и вероятностных моделей с использованием генетических алгоритмов в качестве средства оптимизации параметров гибридных систем. Так в [167] рассматривается подход к анализу СВП, основан-

ный на лингвистической аппроксимации ВР путем сопоставления ему нечеткого ВР с последующим выявлением в нем нечетких тенденций. Для нахождения последних предлагаются синергетические средства, такие как нечеткие нейросети с генетической редукцией правил, позволяющие автоматически выявлять системы продукций для анализа тенденций на основе обучения.

Таким образом, ИАС, ориентированные на мониторинг сложного технологического процесса, должны содержать модели описанных выше типов для решения задач анализа и прогнозирования тенденций в слабо структурированных временных рядах. Результаты анализа служат основанием для распознавания ситуаций и поддержки принятия оперативных решений по коррекции режима технологического процесса.

1.5. Анализ информационных технологий поддержки принятия решений на основе ситуационного подхода

В состав ИАС управления качеством СПП необходимо входит специализированная СППР, предназначенная для выдачи рекомендаций в той или иной ситуации, возникающей на объекте управления.

Системы поддержки принятия решений. В той или иной степени СППР присутствуют в любой информационной системе. Рассмотрим широко используемые классы СППР, сгруппированные по различным характеристикам, и определим типы и наборы характеристик СППР.

СППР, в зависимости от используемых данных, можно разделить на оперативные (предназначенные для немедленного реагирования на текущую ситуацию) и стратегические (основанные на анализе большого количества информации из различных источников с привлечением сведений, содержащихся в системах, аккумулирующих опыт решения проблем) [150, 151].

В зависимости от функционального исполнения интерфейса системы выделяют два основных типа СППР: информационные системы руководства предприятия (англ. Execution Information System, EIS) и системы поддержки

принятия решений (англ. Decision Support System, DSS).

Информационные системы руководства предприятия (ИСРП) – это системы, построенные на основании данных транзакционных ИС предприятия или OLAP-систем, с упрощенным интерфейсом для неподготовленных пользователей, предназначенные для анализа текущего состояния производственного цикла предприятия с прогнозированием и фиксацией тенденций его развития. Навигаторы данных этих систем позволяют оперировать крупными объектами компании.

СППР в контексте функционального исполнения интерфейса представляют собой инструмент для подготовленного пользователя – эксперта, для агрегации и анализа поступающих данных.

ИСРП и СППР на предприятии могут функционировать параллельно и быть взаимосвязанными, разделяя общие источники данных и сервисы, что обычно наблюдается при использовании СППР на базе систем ERP.

В зависимости от территориальной распределенности предприятия СППР разделяют на локальные, функционирующие на одном компьютере, и распределенные, части которой могут быть расположены на разных компьютерах сети предприятия, а для организации обмена данными используется унифицированный протокол приема/передачи данных.

Распределенные СППР разделяются на территориально распределенные и на функционально распределенные [152].

Территориально распределенные СППР состоят из локальных СППР, решающих частные задачи и независимо формирующие решения тех или иных частей общей проблемы производственной ситуации. Общее решение проблемы в таком случае формируется сообща.

Функционально распределенные СППР – это распределенные системы, использующие инфраструктуру Всемирной паутины для объединения различных программных модулей, реализующих функционал СППР, и расположенных на различных компьютерах [152].

Частным случаем распределенных СППР являются иерархические

СППР, которые состоят из экспертных систем и локальных СППР, связанных между собой компьютерной сетью и ранжированных по специализациям и уровню менеджмента.

По способу взаимодействия с пользователем выделяют три вида СППР: пассивные, которые помогают в процессе принятия решений, но не могут выдвинуть конкретного предложения; активные, непосредственно участвующие в разработке рационального решения; кооперативные, предполагающие взаимодействие СППР с ЛПР, а именно, предложенное системой решение ЛПР может доработать, усовершенствовать, а затем отправить обратно в систему для проверки, причем этот процесс будет длиться до тех пор, пока окончательное решение не будет принято.

По способу поддержки принятия решений различают: модельно-ориентированные СППР, которые используют в работе доступ к статистическим, финансовым или иным моделям; СППР, основанные на коммуникациях, поддерживающие работу двух и более пользователей, занимающихся общей задачей; СППР, ориентированные на данные, имеют доступ к внешним и внутренним источникам данных предприятия; СППР, ориентированные на документы, манипулирующие неструктурированной информацией, заключенной в различных электронных форматах; СППР, ориентированные на знания, предоставляют специализированные решения проблем, основанные на фактах [151].

В зависимости от специфики решаемых задач R. Sprague выделяет три уровня СППР: специализированные или прикладные; генераторы, «инструментарий» [152].

Специализированные СППР – это системы, служащие для поддержки решения отдельных прикладных задач в конкретных ситуациях, с которыми работают конечные пользователи (отдельные или группы ЛПР).

СППР-генераторы представляют собой программные средства для поиска, выдачи, моделирования данных и прочего, которые используются конструкторами прикладных СППР для разработки специализированных систем.

СППР-инструментарий – вспомогательные компоненты, без которых функционирование СППР невозможно, а именно, операционные системы, средства отображения информации и т.п.

С учетом вышеприведенной классификации и анализа работ [149–177] для решения задачи мониторинга и поддержки принятия оперативных решений в процессе выращивания монокристаллов необходима разработка оперативной, специализированной СППР, ориентированной на прием данных от системы мониторинга технологического процесса.

Далее рассмотрим подходы к разработке СППР для коррекции хода СПП и наметим пути создания технологии разработки специализированной СППР.

Одной из отличительных характеристик СПП является наличие большого количества независимых входных и выходных параметров, характеризующих состояние системы неоднозначным образом. Построение адекватной модели при большом количестве входных переменных требует большого объема базы знаний, количество продукционных правил в которой экспоненциально возрастает с увеличением входов модели, что снижает качество нечеткого логического вывода.

В этом случае на этапе генерации базы знаний, состоящей из нечетких логических правил, целесообразно оперировать не конкретными параметрами системы, а классами её состояний. Это, в большинстве случаев приводит к уменьшению объема базы знаний, и соответственно к повышению точности управления.

Следовательно, управление СТСП должно осуществляться не по параметрам, а по состояниям [21, 22, 151, 154]. Таким образом, возникает задача идентификации состояния сложного объекта управления по его наблюдаемым (известным) параметрам. Ситуацией принято называть вербальную оценку состояния объекта, опирающуюся на анализе вектора признаков.

Нечеткие ситуации. Пусть $Y = \{y_1, y_2, \dots, y_p\}$ множество признаков, значениями которых описывается состояние объекта управления, окружающей

среды и системы управления. Каждый признак y_i ($i \in I = \{1, \dots, p\}$) описывается соответствующей лингвистической переменной $\langle y_i, T_i, D_i \rangle$, где $T_i = \{T_1^i, T_2^i, \dots, T_m^i\}$ – терм-множество ЛП (набор лингвистических значений признака y_i), m_i – число термов; D_i – базовое множество признака y_i . Для описания термов T_j^i ($i \in L = \{1, 2, \dots, m_i\}$) соответствующих значениям признака y_i , используются нечеткие переменные $\langle T_j^i, D_i, \tilde{C}_j^i \rangle$, т.е. значение T_j^i описывается нечетким множеством \tilde{C}_j^i в базовом множестве D_i [176]:

$$\tilde{C}_j^i = \{ \langle \mu_{C_j^i}(d) / d \rangle \mid d \in D_i \} . \quad (1.2)$$

Тогда нечеткой ситуацией \tilde{S} называется нечеткое множество второго уровня:

$$\tilde{S} = \{ \langle \mu_S(y_i) / y_i \rangle \mid y_i \in Y, \text{ где } \mu_S(y_i) = \{ \langle \mu_{\mu_S}(T_j^i) / T_j^i \rangle \mid T_j^i \in T_i \} \} , \quad (1.3)$$

Нечеткими ситуациями задаются состояния, в которых находятся объект управления, окружающая среда и информационная управляющая система, при создании баз нечетких знаний.

Классификация состояний. Распознавание состояний (а, следовательно, и ситуаций) возможно в том случае, если определены классы состояний. Состояние объекта можно охарактеризовать значениями некоторых признаков. Если множество состояний объекта характеризуется схожими значениями признаков состояний, то говорят о наличии класса состояний объекта.

Под процедурой формирования классов, классификацией, понимают упорядочение состояний объекта по их схожести [21].

Формирование классов состояний можно осуществить путем простого перечисления членов класса или путем кластеризации [21]:

Когда состояние объекта можно представить в виде вектора чисел, определяющее геометрическое расположение изображающей точки в простран-

стве признаков, используют методы кластеризации [173].

Группа состояний объекта, образующих в пространстве описаний компактную в некотором смысле область, называется кластером. Реализация метода кластеризации в интеллектуальной системе определяется взаимным пространственным расположением кластеров в пространстве. Если кластеры, соответствующие разным классам, разнесены достаточно далеко друг от друга, можно воспользоваться классификацией по какой-либо из метрик. Среди множества алгоритмов кластеризации наиболее известны алгоритм ISODATA и алгоритм k -средних [173]. При работе со сложными объектами кластеры могут перекрываться и/или иметь размытые границы, что происходит в результате неполной или нечеткой информации о состоянии объекта. В этом случае применяются методы разбиения пространства состояний, оперирующие понятиями теории нечетких множеств [22].

Ситуационный логический вывод. Для определения состояния объекта управления необходимо сравнить входную нечеткую ситуацию \tilde{S}_0 с каждой нечеткой ситуацией из некоторого набора типовых нечетких ситуаций $S = \{\tilde{S}_1, \tilde{S}_2, \dots, \tilde{S}_N\}$. В качестве меры для определения степени близости нечеткой ситуации \tilde{S}_0 к нечеткой ситуации $\tilde{S}_i \in S$ ($i \in K = \{1, 2, \dots, N\}$) могут использоваться степень нечеткого включения нечеткой ситуации \tilde{S}_0 в нечеткую ситуацию \tilde{S}_i ; степень нечеткого равенства \tilde{S}_0 и \tilde{S}_i ; степень нечеткой общности \tilde{S}_0 и \tilde{S}_i ; а также другие меры близости. Выбор меры близости определяется особенностями объекта управления и организацией блока принятия решений в СППР.

Пусть $\tilde{S}_i = \{\langle \mu_{Si}(y)/y \rangle\}$, $\tilde{S}_j = \{\langle \mu_{Sj}(y)/y \rangle\}$ ($y \in Y$) есть некоторые ситуации. Тогда степенью включения ситуации \tilde{S}_i в ситуацию \tilde{S}_j обозначается величина $v(\tilde{S}_i, \tilde{S}_j)$, определяемая выражением [24]:

$$v(\tilde{S}_i, \tilde{S}_j) = \&_{y \in Y} v(\mu_{S_i}(y), \mu_{S_j}(y)), \quad (1.4)$$

где $v(\mu_{S_i}(y), \mu_{S_j}(y))$ вычисляется следующим образом:

$$v(\mu_{S_i}(y), \mu_{S_j}(y)) = \&_{l \in L} (\mu_{\mu_{S_i}}(T_i^l) \rightarrow \mu_{\mu_{S_j}}(T_j^l)) \quad . \quad (1.5)$$

Здесь $v(\mu_{S_i}(y), \mu_{S_j}(y))$ является степенью включения нечеткого множества $\mu_{S_i}(y)$, в нечеткое множество $\mu_{S_j}(y)$.

Считается, что ситуация \tilde{S}_i нечетко включается в ситуацию \tilde{S}_j , $\tilde{S}_i \subseteq \tilde{S}_j$ если степень включения \tilde{S}_i в \tilde{S}_j , не меньше некоторого порога включения $t_{inc} \in [0,6; 1]$, определяемого условиями управления, т.е. $v(\tilde{S}_i, \tilde{S}_j) \geq t_{inc}$.

Существование двух взаимных включений ситуаций \tilde{S}_i и \tilde{S}_j , означает, что при пороге включения t_{inc} ситуации \tilde{S}_i и \tilde{S}_j примерно одинаковы. Такое сходство ситуаций называется нечетким равенством, и степень нечеткого равенства $\mu(\tilde{S}_i, \tilde{S}_j)$ ситуаций \tilde{S}_i и \tilde{S}_j определяется следующим образом [24]:

$$\mu(\tilde{S}_i, \tilde{S}_j) = v(\tilde{S}_i, \tilde{S}_j) \& v(\tilde{S}_j, \tilde{S}_i). \quad (1.6)$$

После преобразований (5) можно получить

$$\mu(\tilde{S}_i, \tilde{S}_j) = \&_{y \in Y} \mu(\mu_{S_i}(y), \mu_{S_j}(y)) \quad , \quad (1.7)$$

где $\mu(\mu_{S_i}(y), \mu_{S_j}(y))$ вычисляется следующим образом:

$$\mu(\mu_{S_i}(y), \mu_{S_j}(y)) = \&_{l \in L} ((\mu_{\mu_{S_i}}(T_i^l) \rightarrow \mu_{\mu_{S_j}}(T_j^l)) \& (\mu_{\mu_{S_j}}(T_i^l) \rightarrow \mu_{\mu_{S_i}}(T_j^l))). \quad (1.8)$$

Считается, что ситуации \tilde{S}_i и \tilde{S}_j , нечетко равны, $\tilde{S}_i \approx \tilde{S}_j$, если $\mu(\tilde{S}_i, \tilde{S}_j) \geq t$, $t \in [0,6; 1]$, где t - некоторый порог нечеткого равенства ситуаций.

Нечеткой $(p - q)$ -общностью ситуаций называется [24] такое сходство ситуаций, когда нечеткие значения всех признаков в ситуациях нечетко рав-

ны, кроме нечетких значений не более, чем q признаков. Если ситуации \tilde{S}_i и \tilde{S}_j , описываются p признаками, то для их $(p - q)$ -общности достаточно нечеткого равенства $p - q$ признаков из множества.

Если признаки, при помощи которых описывается объект управления, не зависят друг от друга, то из некоторой ситуации \tilde{S}_i можно перейти в любую ситуацию \tilde{S}_j имеющую $(p - q)$ -общность с ситуацией \tilde{S}_i , применением не более чем q локальных (действующих на значение только одного признака) управлений [25].

Пусть $\tilde{S}_i = \{\langle \mu_{S_i}(y)/y \rangle\}$, $\tilde{S}_j = \{\langle \mu_{S_j}(y)/y \rangle\}$ ($y \in Y$) есть нечеткие ситуации. Тогда степень $(p - q)$ -общности $k_{p-q}(\tilde{S}_i, \tilde{S}_j)$ ситуаций \tilde{S}_i и \tilde{S}_j , определяется выражением

$$k_{p-q}(\tilde{S}_i, \tilde{S}_j) = \&_{y \in Y \setminus Y_q} \mu(\mu_{S_i}(y), \mu_{S_j}(y)),$$

где $|Y_q| \leq q$, признак y_k принадлежит Y_q , если $\mu(\mu_{S_i}(y_k), \mu_{S_j}(y_k)) < t$.

При $Y_q = \emptyset$ ситуации \tilde{S}_i и \tilde{S}_j , нечетко равны.

Аналогично определению нечеткого равенства считается, что ситуации \tilde{S}_i и \tilde{S}_j , имеют $(p - q)$ -общность, если $k_{p-q}(\tilde{S}_i, \tilde{S}_j) > t$.

Пусть множество возможных состояний объекта управления задается набором S эталонных нечетких ситуаций. Предполагается, что множество эталонных ситуаций S полно. Каждой нечеткой ситуации $\tilde{S}_i \in S$ на основе экспертной информации ставится в соответствие управляющее решение $r_i \in R$, где R - множество управляющих решений, используемых для управления объектом. Нечеткий ситуационный логический вывод сводится к распознаванию входной нечеткой ситуации \tilde{S}_0 , описывающей текущее состояние объекта управления, и выдаче соответствующего ей управляющего решения из множества R . Для распознавания нечеткой ситуации можно предложить два спо-

соба [25]:

- метод "ближайшего соседа" в пространстве эталонных нечетких ситуаций;
- выдача управляющих решений с учетом всех эталонных ситуаций.

Для этого должна использоваться некоторая мера сходства нечеткой ситуации \tilde{S}_0 эталонами из множества \tilde{S} .

В качестве меры сходства нечетких ситуаций наиболее предпочтительны степень нечеткого включения нечетких ситуаций и степень нечеткого равенства. Обе эти меры состоят в вычислении степени сходства в интервале $[0; 1]$. Наибольшая степень сходства равна 1, наименьшая – 0. Степень сходства 0,5 означает полную неопределенность.

Для оценки равенства или неравенства нечетких ситуаций, включения или не включения вводятся пороги нечеткого равенства и нечеткого включения t из интервала $[0,6; 1]$. Считается, что нечеткая ситуация \tilde{S}_0 нечетко включается или нечетко равна нечеткой ситуации \tilde{S} , если $\nu(\tilde{S}_0, \tilde{S}) > t$; $\nu(\tilde{S}_0, \tilde{S}) \& \nu(\tilde{S}, \tilde{S}_0) > t$ соответственно.

По методу "ближайшего соседа" считается, что объект управления находится в эталонной ситуации $\tilde{S}_i \in S$, имеющей наибольшую степень сходства с нечеткой ситуацией \tilde{S}_0 , а на объекте управления должно отрабатываться управляющее решение $r_i \in R$.

По методу учета всех эталонных ситуаций результирующее управляющее воздействие r^* определяется объединением (аккумуляцией) всех управляющих решений $r_i \in r$, учтенных в соответствии со их степенью сходства соответствующих эталонных ситуаций $\tilde{S}_i \in s$ с текущей ситуацией \tilde{S}_0 . Это возможно только в том случае, если принимаемое решение можно выразить в количественной форме.

Таким образом, специализированная СППР, предназначенная для обработки результатов мониторинга процесса выращивания монокристаллов, должна быть основана на идентификации входной нечеткой ситуации, описы-

вающей текущее состояние процесса. Поскольку результатом функционирования СППР должны быть рекомендации для оператора, для распознавания нечеткой ситуации следует использовать метод "ближайшего соседа" в пространстве эталонных нечетких ситуаций.

1.6. Анализ подходов к реализации функций мониторинга и оптимизации процесса выращивания монокристаллов

Виртуальный мониторинг температурных полей. Стремление повысить качество выпускаемой продукции приводит к ужесточению требований к точности воспроизведения оптимальных условий выращивания монокристаллов. Это, в свою очередь, требует непрерывного контроля температурного поля в зоне кристаллизации и в слитке.

Мониторинг температурного поля слитка и расплава в процессе выращивания является специфической задачей, при решении которой требуется с одной стороны высокая точность результатов расчета ($\pm 6^\circ\text{C}$ при абсолютных значениях температур от 500 до 1300°C), а с другой стороны – достаточно высокая скорость расчета для обеспечения вывода результатов мониторинга с максимальным периодом $4\dots 5$ мин. С другой стороны, для реализации функциональных задач мониторинга желательно использовать стандартные промышленные компьютеры. Эти противоречивые требования заставляют отказаться от широко применяемого в научных исследованиях метода конечных элементов по следующим причинам.

Мониторинг температурного поля расплава предполагает, что применяемый метод расчета учитывает влияние пульсаций температуры расплава, вызванных конвективными потоками теплоты. Для этого теоретически существуют два пути:

- 1) Моделирование в реальном времени вязкого течения расплава с одновременным расчетом температурного поля при помощи совместного решения уравнений Навье–Стокса, уравнения теплопроводности и уравнения не-

разрывности. Однако в этом случае затруднена синхронизация реального конвективного процесса и модели.

2) Прямое вычисление пульсаций температуры при помощи обученной нейронной сети.

В обоих случаях встает вопрос о формировании граничных условий и учете таких факторов, как непрерывное изменение уровня расплава, мгновенное значение реальной температуры в контрольной точке расплава, соотношение радиусов слитка и тигля, и др.

В первом случае для моделирования приходится решать трехмерную задачу. При моделировании вязких течений несжимаемой жидкости возникает задача дискретизации системы уравнений Навье–Стокса. Обычно для этого используют метод конечных элементов (МКЭ) или метод конечных объемов (МКО). Оба метода используют неструктурированные сетки (триангуляция в случае 2D, разбиение на тетраэдры в случае 3D). Построение сетки, удовлетворяющей ряду условий (отсутствие малых углов, “вырождающихся” треугольников, смежных треугольников со значительно различающимися размерами), в заданной расчетной области представляет собой самостоятельную проблему, которая решается в каждом отдельном случае в зависимости от сложности конфигурации исследуемого объекта и характера задачи (статическая или динамическая). Основным недостатком МКЭ и МКО является то, что для каждого временного шага сетка, на которой строится решение, сохраняет свою узловую связность, что в свою очередь, может привести к её вырожденности в задачах с подвижными границами (а в решаемой задаче границы подвижные). Для преодоления указанной трудности требуется автоматическая перестройка сетки на каждом временном шаге. Поскольку корректное разбиение пространства на треугольные конечные элементы может производиться различными способами, неединственность триангуляции приводит к резкому изменению структуры сетки в соседних точках и к резкому изменению и неоднозначности результатов интерполяции. Кроме того, быстрое перестроение сетки сложной конфигурации и соответствующая коррекция граничных усло-

вий представляет собой отдельную нетривиальную вычислительную задачу.

Во втором случае (применение нейронной сети) вычислительная задача, решаемая в реальном времени, существенно упрощается. Сеть должна отражать конфигурацию моделируемого слоя расплава, воспринимать граничные условия, быть рекуррентной для воспроизведения динамики пульсаций температуры расплава.

Таким образом, решение задачи возможно с использованием комбинации метода конечных разностей (МКР) и нейронной сети, заранее обученной на примерах, полученных из экспериментальных данных и численных расчетов при помощи МКЭ.

Итак, можно сделать вывод, что мониторинг температурных полей расплава и слитка возможен только косвенными методами, с привлечением специфических математических моделей и методов, позволяющих идентифицировать температурное поле расплава в реальном времени по результатам прямых измерений температуры в отдельных точках теплового узла, скорости вращения затравки и тигля и некоторым другим параметрам. При этом система мониторинга и поддержки принятия решений должна решать такие плохо формализуемые функциональные задачи, как распознавание образов, оценка состояния объекта мониторинга, извлечение знаний, интерпретация знаний, самообучение, формирование рекомендаций оператору.

Очевидно, что, используя только одну информационную технологию, например, расчет температурного поля численным методом, систему принятия решений на базе нечеткой логики или искусственные нейронные сети, крайне сложно эффективно решить в одной системе все эти задачи. Исходя из этого, при разработке подсистем ИАС целесообразно разделить функции мониторинга и поддержки принятия оперативных решений и сформировать соответствующие комплексы функциональных задач.

Решение комплекса задач «Мониторинг» осуществляется как косвенное измерение параметров температурного поля в подкристальной области и в слитке. Косвенное измерение осуществляют так называемые «виртуальные

датчики». Принцип действия виртуальных датчиков основан на реконструкции параметров физических процессов с учётом данных, получаемых от существующих физических датчиков. С помощью виртуальных датчиков можно получить значения температуры слитка и расплава в отдельных точках. Затем, с помощью выбранных методов аппроксимации, можно построить целостную картину температурного поля.

Решение комплекса задач «Советчик» направлено на поддержку принятия оптимального решения при возникновении критических и нештатных ситуаций. Под нештатной ситуацией подразумевается ситуация, когда по тем или иным (как правило, неопределённым) причинам происходит срыв нормального протекания процесса (например, прерывание бездислокационного роста, недопустимое отклонение диаметра растущего кристалла от заданного и т.п.), который обнаруживается системами слежения и оператором. В этом случае возникает необходимость в принятии решения о дальнейших действиях, вариантами которых могут быть: сплавить выращенный монокристалл и прекратить процесс; сформировать нижний конус, вывести слиток в шлюзовую камеру, выгрузить и начать выращивать новый слиток из оставшегося в тигле расплава; продолжить вытягивание слитка, зная, что вытянутая после срыва нормального роста часть пойдёт на переплавку, а не в готовую продукцию (осуществить т. н. «выборку расплава»).

Выбор того или иного варианта действий зависит от следующих факторов:

- какая доля массы расплава была закристаллизована до возникновения нештатной ситуации;
- продолжительности пребывания загрузки в расплавленном состоянии;
- степени летучести легирующей примеси;
- степени критичности состояния сроков выполнения заказа по данной марке кремния;
- цены данной марки кремния и текущей стоимости используемых ресурсов;
- длительности процесса выращивания до возникновения нештатной ситуа-

ции (если были сплавления, то суммарная);

- суммарной длительности сплавлений и их количества.

Естественно, что такая многофакторность ситуации приводит к тому, что в настоящее время принимаемые решения не всегда совпадают с оптимальными (в смысле минимизации убытков). Поэтому возникает необходимость в построении системы поддержки принятия оперативных решений по выходу из нештатных ситуаций подобного рода.

Однако, в большинстве случаев нештатной ситуации предшествует критическая ситуация, и её обнаружение помогает предотвратить появление нештатной ситуации. Обнаружение критической ситуации – задача системы мониторинга и поддержки принятия решений.

Кроме того, поскольку рассматривается система, функционирующая в реальном времени протекания процесса выращивания, то к ней предъявляются следующие требования:

- использование временных зависимостей в базе знаний и учет временного фактора при поиске решения;
- поиск компромисса между точностью получаемого решения и затратами вычислительных ресурсов на его получение;
- получение достоверного результата при возможной неполноте исходных данных;
- выбор наиболее существенных событий, имеющих место в динамике технологического процесса;
- рациональная расстановка приоритетов решаемых задач.

Указанные требования можно реализовать только с использованием методов вычислительного интеллекта.

Проблема оптимизации условий остывания слитка в ростовой камере. Как было указано выше, в большинстве практических случаев выращивание монокристаллов арсенида галлия (GaAs) и других полупроводников методом Чохральского сопровождается возникновением внутренних макронапряжений, которые не только определяют формирование дислокационной структуры в

процессе роста, но и в значительной мере влияют на механические и физические свойства выращенных кристаллов [117]. Наибольший вклад в возникновение напряжений при росте кристаллов вносят неоднородное поле температурных деформаций, обуславливающее термоупругие напряжения [117].

Тепловые узлы существующих в настоящее время ростовых установок по методу Чохральского включают экраны, которые должны обеспечить оптимальный тепловой режим для остывающего слитка в зоне, примыкающей к фронту кристаллизации и, соответственно, минимизацию неравномерности температурных градиентов. Однако, несмотря на большое количество исследований, в настоящее время не найдено оптимальных конфигураций экрана для различных сочетаний геометрических параметров теплового узла.

Традиционно для решения задачи выбора формы, размеров и расположения экрана используется метод вычислительных экспериментов [179]. На основе локальных или глобальных тепловых моделей строится численное решение задачи тепломассопереноса. При этом исследователь задает конфигурацию и геометрические параметры теплового узла и с помощью какого-либо стандартного программного пакета строит сетку конечных элементов. Далее в программу вводятся граничные условия. Получив решение в числовом и графическом виде, разработчик пытается установить эмпирическую связь между размерами и расположением экранов и температурными полями и градиентами. Чтобы установить такую связь, приходится многократно перестраивать конфигурацию теплового узла, заново вводить геометрические параметры, заново строить сетку конечных элементов. Сложность тепловой конечно-элементной модели, и отсутствие строгой постановки задачи заставляет разработчика действовать на основании опыта и интуиции.

Для автоматизированного расчета оптимальных геометрических параметров теплового узла необходим другой подход, который заключается в установлении закономерностей влияния геометрии теплового экрана (или системы экранов) на распределение температур в рабочей зоне ростовой установки и в

слитке. Для установления таких закономерностей необходимо сформировать математическую модель, отражающую связь между геометрическими параметрами теплового экрана и параметрами тепловых потоков в тепловом узле, а также разработать модель и метод оптимизации конфигурации теплового экрана, форма и положение которого оказывают критическое влияние на режим охлаждения слитка в процессе выращивания. Указанные модели и методы должны быть реализованы в виде комплекса задач и соответствующей информационной технологии, реализуемой в отдельной подсистеме, которая поддерживает процесс технологической подготовки производства.

Таким образом, в ИАС управления качеством процесса выращивания монокристаллов необходимо реализовать три подсистемы – подсистему мониторинга, подсистему поддержки принятия оперативных решений и подсистему оптимизации размеров и положения теплового экрана.

Выводы и постановка задач исследований

Развитие информационных технологий мониторинга и регулирования сложных технологических процессов в принципе дает возможности значительно повысить эффективность производства монокристаллов полупроводников, процесс получения которых методом выращивания из расплава чрезвычайно сложен для автоматизации: непосредственный контроль многих параметров процесса затруднён, конечный продукт должен удовлетворять нескольким критериям, а сам процесс является сложным сочетанием гидродинамических, тепловых процессов и фазовых превращений.

С другой стороны, повышение требований к структурному совершенству монокристаллов ведёт к необходимости усовершенствования технологического процесса получения последних. При отсутствии принципиально новых методов получения монокристаллов процесс выращивания может быть усовершенствован как за счёт применения модернизированного оборудования, так и за счёт применения методов, моделей и алгоритмов, обеспечивающих информацион-

ную поддержку задач технологической подготовки производства.

В настоящее время лаборатории и отделы технического контроля в производстве монокристаллов в основном инспектируют качество промежуточного и конечного продукта, то есть контрольная функция практически не оказывает влияния на сам процесс выращивания как таковой. Таким образом, управление качеством процесса выращивания и поддержание значений его параметров в пределах технических условий опирается на личный опыт мастера-технолога и нередко осуществляется им на интуитивном уровне. Как правило, с потерей опытных работников на технологической линии резко снижается качество и возрастает брак выпускаемой продукции. Существующее положение объясняется, в первую очередь, слабостью прямого влияния накопленных количественных данных и теоретических знаний о кинетике и динамике процесса выращивания на алгоритмы регулирования технологических параметров в режиме реального времени.

С другой стороны, важно подчеркнуть, что по физико-технологическим вопросам производства монокристаллов имеется большой объем исследований, результаты которых необходимо использовать при разработке информационных технологий мониторинга и оптимизации процесса выращивания монокристаллов.

Однако контролируемые в существующих системах параметры лишь косвенно влияют на качество выращиваемого слитка. Факторами, прямо влияющими на возникновение структурных дефектов, являются, прежде всего, температурные напряжения в выращенном слитке, несимметричность теплового поля ростовой камеры, изменение формы фронта кристаллизации, происходящее из-за неконтролируемых колебаний температуры расплава. Поэтому с точки зрения технологов крайне желательно контролировать температурное поле в расплаве и слитке на всех стадиях выращивания. В частности, для обеспечения требуемого уровня структурного совершенства монокристалла необходим контроль осевых и радиальных температурных градиентов в слитке и в расплаве, особенно в зоне фронта кристаллизации. Однако суще-

ствующие методы и информационные технологии контроля процесса выращивания не позволяют осуществить эти функции.

В этой ситуации проблема повышения эффективности управления качеством монокристаллических слитков может быть трансформирована в проблему создания и внедрения информационно-аналитической системы управления качеством процесса выращивания (ИАС УКПВ), основной функцией которой является информационная поддержка производственного процесса на стадиях выращивания и технологической подготовки производства.

При разработке систем мониторинга и управления качеством СПП необходимо проводить междисциплинарные исследования, затрагивающие с одной стороны физические процессы и явления, на которых базируется СПП, методы моделирования этих процессов, а с другой стороны – теоретические и прикладные основы построения информационных технологий для автоматизации функциональных задач анализа, распознавания и поддержки принятия оперативных решений по управлению СПП.

В связи с этим **целью данной работы** является решение актуальной научно-прикладной проблемы создания теоретических и прикладных основ информационной поддержки процесса производства монокристаллов полупроводников путем разработки и реализации методов, моделей, информационных технологий и программно-технических средств мониторинга и оптимизации процесса выращивания монокристаллов.

Исходя из этого, определены основные задачи диссертационной работы:

1. Разработка концептуальных основ управления качеством, мониторинга и оптимизации процесса выращивания монокристаллов полупроводников.
2. Разработка теоретико-множественной модели системы управления качеством процесса выращивания.
3. Разработка метода построения прикладной информационной технологии мониторинга и диагностики сложного технологического процесса.
4. Разработка методов, моделей и информационной технологии мониторинга температурных полей в процессе выращивания монокристаллов для ин-

формационного обеспечения управления качеством.

5. Разработка методов, моделей и информационной технологии поддержки принятия оперативных решений по коррекции режима выращивания монокристаллов.
6. Разработка методов, моделей и информационной технологии поддержки задачи оптимизации тепловых условий остывания слитков в ростовой установке на этапе технологической подготовки производства.
7. Разработка интегрированной информационной технологии управления качеством процесса выращивания.
8. Разработка комплекса программных средств для реализации информационной технологии управления качеством процесса выращивания монокристаллов в виде подсистем ИАС УКПВ.
9. Внедрение результатов исследований в процесс управления качеством производства монокристаллов полупроводников.

Эти задачи решаются в последующих разделах диссертационной работы.

РАЗДЕЛ 2.

РАЗРАБОТКА КОНЦЕПТУАЛЬНЫХ ОСНОВ ПОСТРОЕНИЯ ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ КАЧЕСТВОМ ПРОЦЕССА ВЫРАЩИВАНИЯ

Структура диссертационной работы во многом отражает структуру ИАС УКПВ. Целью второго раздела является формирование концептуальной и структурной модели ИАС УКПВ, как основы для разработки комплекса математических моделей, методов и информационных технологий мониторинга и оптимизации процесса выращивания монокристаллов полупроводников.

Третий раздел диссертации посвящен разработке моделей, методов и информационной технологии, предназначенных для получения необходимого объема данных для мониторинга и визуализации температурных полей в процессе выращивания. Эти модели позволяют осуществить косвенное измерение температур в точках, недоступных для прямых измерений. Разработанная для решения этих задач информационная технология реализована в подсистеме «Мониторинг».

В четвертом разделе диссертации разработаны модели, методы и информационная технология оптимизации тепловых условий остывания слитка в ростовой установке. Это достигается выбором конструктивных параметров тепловых экранов, влияющих на режим остывания выращенной части слитка. Разработанная информационная технология реализована в подсистеме «Экран», которая используется в рамках ИАС УКПВ на стадии технологической подготовки производства монокристаллов.

Пятый раздел диссертации посвящен разработке моделей и информационной технологии решения задач поддержки принятия оперативных решений и управления качеством процесса выращивания монокристаллов. Соответствующие информационные технологии реализованы в подсистеме "Советчик".

2.1. Концепция управления качеством производственного процесса

Качество – это всегда совокупность свойств. Но свойства продукта и

свойства производственного процесса не есть одно и то же. Качество процесса проецируется на качество продукта. Механизм этого проецирования – физические закономерности явлений, составляющих основу процесса, влияющие на качество продукта, а также управляющие и корректирующие воздействия, влияющие на параметры процесса. В настоящей работе этот механизм отражен в виде моделей и методов оптимизации условий охлаждения, в виде моделей температурных полей, а также знаний, хранящихся в базе знаний СППР.

Согласно ISO-9000, качество процесса определяется качеством продукта. Другими словами, судить о стабильности производственного процесса можно по относительной частоте появления бракованного продукта.

Повышения качества монокристаллов (прежде всего – структурного совершенства) и сокращения количества нештатных ситуаций в процессе выращивания можно достичь путем разработки и внедрения специализированной информационно-аналитической системы управления качеством процесса выращивания (ИАС УКПВ), которая осуществляет информационную поддержку основных этапов производства, а именно – мониторинг ряда параметров процесса (включая температурные поля в расплаве и слитке), распознавание сложившейся ситуации и выдачу рекомендаций оператору при необходимости устранения критической ситуации, а также поддержку задачи оптимизации условий остывания слитка, которая решается на стадии технологической подготовки производства.

Улучшение характеристик производственного процесса происходит за счет:

1. Оптимизации конструктивных параметров технологического оборудования в процессе ТПП.
2. Получения полной и достоверной диагностической информации о процессе путем прямого и косвенного мониторинга критичных параметров процесса, влияющих на качество конечного продукта, в том числе путем моделирования физических явлений процесса в реальном времени.
3. Прогноза качества изделия в процессе изготовления.

4. Оптимизации реакции персонала на возникновение критических ситуаций.

5. Анализа качества продукта и коррекции базы знаний о процессе.

Назначение ИАС УКПВ – служить организующим началом всего комплекса мероприятий, обеспечивающих производство продукции с заданными свойствами.

Цель функционирования системы – установление и стабилизация оптимального количественного уровня факторов, влияющих на качество конечного продукта в процессе выращивания монокристаллов.

В процесс управления качеством производственного процесса должны быть вовлечены как подготовительные стадии, предшествующие непосредственному изготовлению монокристалла, так и стадии контроля конечного продукта. Результаты контроля используются для накопления статистических данных и знаний, необходимых для функционирования подсистемы поддержки принятия оперативных решений в ходе процесса выращивания.

Предшествующие стадии, на которых происходит подготовка исходных материалов и ростовой установки, жестко регламентированы и не требуют мониторинга и аналитической обработки. Однако в процессе технологической подготовки производства монокристаллов нового типоразмера необходимо решать задачу выбора геометрических параметров тепловых экранов для оптимизации теплового режима на стадии остывания выращенной части монокристалла. Эта задача также решается в рамках ИАС УКПВ.

В процессе выращивания монокристалла необходим мониторинг температурных полей расплава и слитка. Результаты мониторинга используются оператором ростовой установки для контроля теплового режима. Кроме того, данные мониторинга поступают в подсистему поддержки принятия оперативных решений, которая диагностирует ситуации и выдает оператору сообщения и рекомендации по коррекции теплового режима. Общая схема взаимодействия подсистем ИАС УКПВ с производственным процессом и конечными пользователями показана на рис. 2.1.

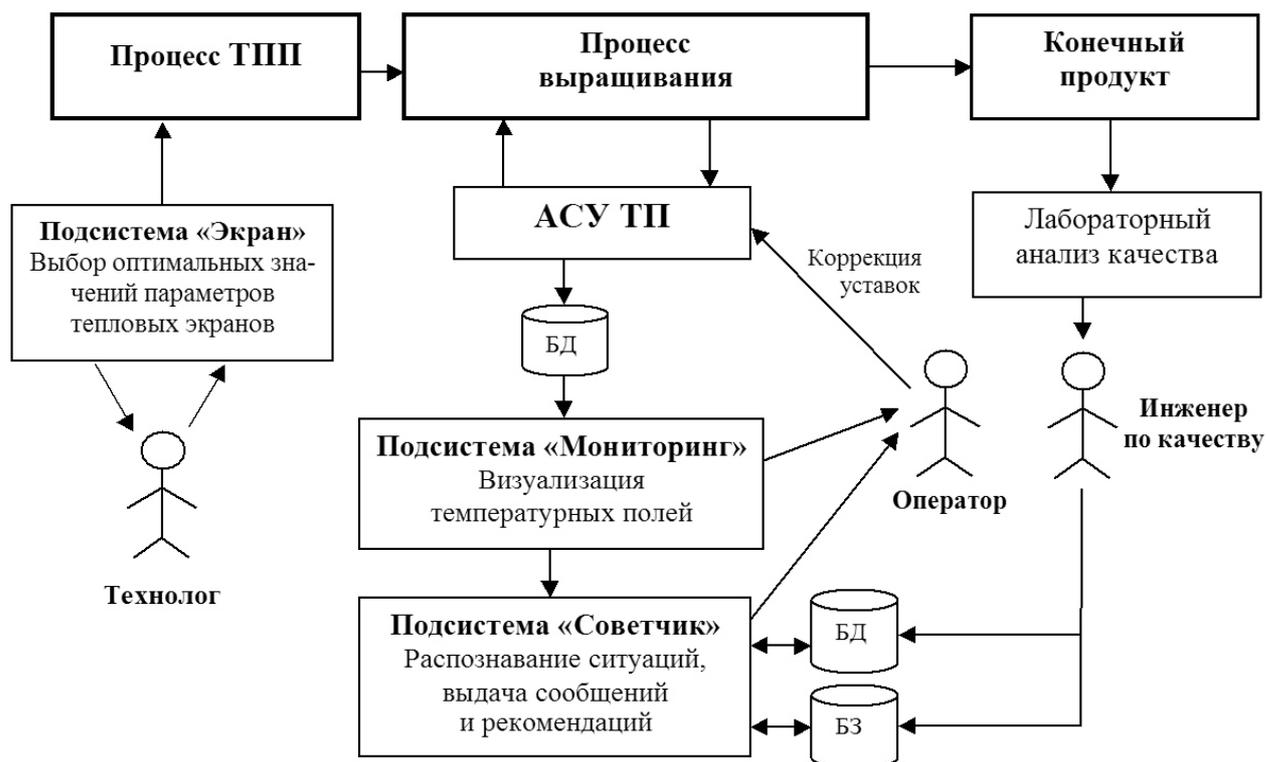


Рисунок 2.1 – Общая схема взаимодействия подсистем ИАС УКПВ с производственным процессом и конечными пользователями

На стадии технологической подготовки производства подсистема "Экран" обеспечивает оптимизацию условий охлаждения слитка в ростовой камере путем расчета оптимальных размеров и положения теплового экрана, окружающей выращенную часть слитка. В процессе выращивания подсистема "Мониторинг" осуществляет косвенные измерения параметров температурных полей в расплаве и слитке и визуализацию температурных полей для оператора, который получает дополнительную информацию о состоянии процесса. Подсистема "Советчик" (СППР) обеспечивает распознавание ситуаций и поддержку принятия оперативных решений по коррекции теплового режима выращивания, тем самым минимизируя вероятность возникновения нештатных ситуаций и появления брака. По результатам лабораторного анализа качества продукта пополняется база данных СППР и база знаний.

2.2. Формальная постановка задачи управления качеством сложного производственного процесса

Структуру задачи управления качеством сложного производственного процесса поясняет рис. 2.2.

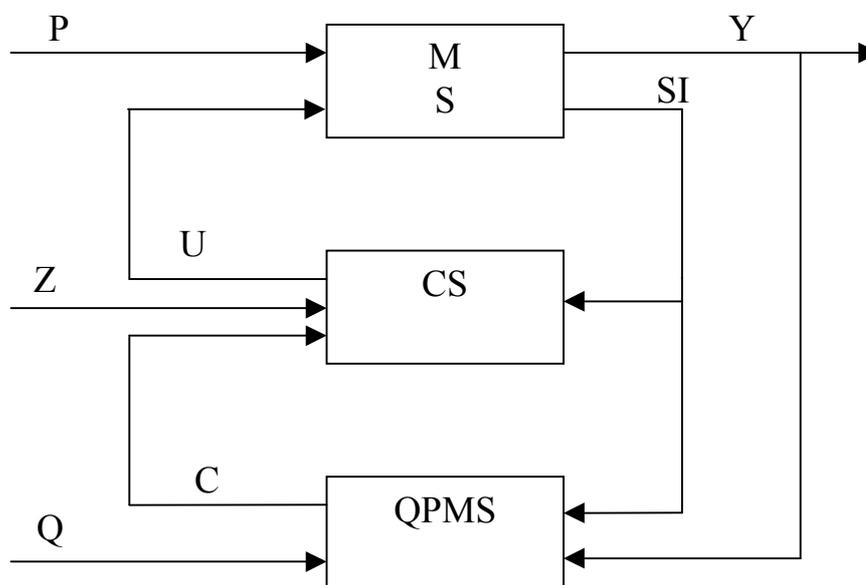


Рисунок 2.2 – Структура задачи управления качеством сложного производственного процесса

На рис. 2.2 – М – производственный процесс; CS – система управления производственным процессом; QPMS – система управления качеством производственного процесса.

Для записи формальной постановки задачи управления качеством производственного процесса введем следующие обозначения:

$T = \{t_l, l = \overline{1, L}\}$ – множество дискретных моментов времени производственного процесса;

$U = \{u_i(t) \mid u_i(t) \in D^{U_i}, i = \overline{1, I}\}, t \in T$ – множество управляющих воздействий на производственный процесс;

$D^U = \{D^{U_i}, i = \overline{1, I}\}$, области допустимых значений управляющих воздействий;

$P = \{p_j(t) \mid p_j(t) \in D^{P_j}, j = \overline{1, J}\}, t \in T$ – множество параметров возмущающих (неуправляемых) входов;

$D^P = \{D^{Pj}, j = \overline{1, J}\}$ – области допустимых значений возмущений;

$S = \{S_t: S_t = f(S_{t-1}, U, P), U \in D^U, P \in D^P, t \in T\}$ – множество состояний процесса;

$SI = \{SI_t: SI_t = \varphi(S_t), t \in T\}$ – множество параметров, характеризующих состояние процесса;

$Y = \{y_m(t), m = \overline{1, M}\}, t \in T, y_m(t) = \eta_m(t, S_t), t \in T$ – множество результирующих целевых выходов производственного процесса;

$Z = \{z_n(t), n = \overline{1, N}\}, t \in T$ – множество задаваемых параметров, определяющих номинальный режим протекания производственного процесса;

$C = \{c_k(t) | c_k(t) \in D^{Ck}, k = \overline{1, K}\}, t \in T$ – множество корректирующих воздействий на систему управления технологическим процессом с целью улучшения качества процесса;

$D^C = \{D^{Ck}, k = \overline{1, K}\}$, область допустимых значений корректирующих воздействий;

$Q = \{q_g, g = \overline{1, G}\}$ – множество целей управления качеством производственного процесса, зависящих от бизнес-правил предприятия и характера продукции.

Тогда взаимодействие системы управления технологическим процессом и системы управления качеством производственного процесса можно представить рядом отображений:

$\eta: U \times P \times S \rightarrow Y$ – отображение множества управляющих воздействий U , множества возмущений P , множества состояний производственного процесса S во множество выходов процесса Y ;

$\mu: P \times U \times T \rightarrow S$ – отображение множества возмущений P , множества управляющих воздействий U , на всём интервале времени T в котором осуществляется управление, во множество состояний S ;

$\psi: Z \times SI \times C \rightarrow U$ – отображение множества задаваемых параметров Z , множества параметров состояний производственного процесса SI и множества корректирующих воздействий C во множество управляющих воздействий U ;

$\varphi: Q \times Y \times SI \rightarrow C$ – отображение множества целей управления качест-

вом Q , множества целевых параметров производственного процесса Y и множества параметров состояний процесса SI во множество корректирующих воздействий C на систему управления процессом, которые осуществляет система управления качеством производственного процесса QPMS.

Выбор критерия качества производственного процесса. Как указывалось в разделе 1, в процессе выращивания могут возникать необратимые нештатные ситуации, приводящие к выходу бракованной продукции. Нештатным ситуациям предшествуют так называемые критические ситуации. Распознавание и устранение критических ситуаций предотвращает возникновение нештатных ситуаций. Считая, что качество сложного производственного процесса во многом определяется вероятностью P_E пропуска критических и, как следствие, возникновения нештатных ситуаций, ведущих к возникновению брака продукции, запишем критерий оптимальности качества производственного процесса в виде:

$$P_E = \sum_{k=1}^K P_k [1 - P_{kd}(s(t))P_{ke}(u(t), c(t))] \rightarrow \min, \quad (2.1)$$

где P_k – вероятность возникновения k -й критической ситуации; P_{kd} – вероятность своевременного обнаружения данной ситуации; P_{ke} – вероятность своевременного устранения данной ситуации.

В систему ограничений в данной задаче входят:

а) ограничения на параметры состояния и управления:

$$\begin{aligned} s(t) &\in D^S, \quad t \in T; \\ u_i(t) &\in D^{U_i}, \quad i = \overline{1, I}, \quad t \in T; \\ c_k(t) &\in D^{C_k}, \quad k = \overline{1, K}, \quad t \in T. \end{aligned}$$

б) ограничения времени реакции на возникновение критических ситуаций: $T_D + T_R \leq T_{ID}$, где T_{ID} – время необратимого ухудшения ситуации; T_D – время обнаружения критической ситуации; T_R – время реакции;

в) соотношения между показателями качества продукции, параметрами технологического процесса, управляющими и корректирующими воздействиями: $Q(t) = F(t, u(t), s(t), y(t), c(t))$, $t \in T$; для процесса выращивания монокристаллов эти ограничения формулируются в виде системы дифференциальных уравнений в частных производных, описывающих процессы тепло-массопереноса, уравнений задачи Стефана, описывающих процесс кристаллизации, дифференциальных уравнений, замыкающих контуры управления и стабилизации АСУ ТП и продукций базы знаний по распознаванию ситуаций и коррекции тепловых режимов.

При этом ограничения могут быть жесткими и нежесткими, в последнем случае они могут быть записаны в вероятностном виде, нечетком виде и т.п.

Таким образом, сформулирована задача управления качеством сложного производственного процесса, основанная на мониторинге параметров процесса и коррекции его режима с помощью целенаправленных изменений значений задаваемых параметров, которые осуществляет оператор по рекомендациям информационно-аналитической системы.

2.3. Разработка модели информационно-аналитической системы управления качеством процесса выращивания

Для синтеза всех необходимых функциональных компонентов разработана теоретико-множественная модель ИАС УКПВ. В общем виде модель ИАС УКПВ можно представить кортежом:

$$M_{ис} = \langle F, OK_{ис}, R \rangle,$$

где F – функциональные подсистемы ИАС, $OK_{ис}$ – обеспечивающие комплексы; R – отношения, связывающие элементы ИАС в единую структуру. Применительно к рассматриваемой проблеме создания ИАС УКПВ детализируем содержание модели [178]:

$$M_{ИАС} = \langle F(SM, SAD, SO), ИК, MQ_P, MQ_M, MM, АК, ПК, ОпК, R_1, R_2, R_3 \rangle, \quad (2.2)$$

где SM – подсистема мониторинга температурных параметров процесса выращивания в реальном времени; SAD – подсистема поддержки принятия оперативных решений по изменению режима процесса выращивания; SO – подсистема оптимизации тепловых условий остывания слитка в ростовой установке; $ИК$ – информационный комплекс – базы данных значимых технологических параметров и база знаний о ситуациях, возникающих в процессе выращивания;

$MQ_P = \langle Q_P, LQ_P \rangle$ – модель качества продукта, где Q_P – множество показателей качества согласно техническим условиям на продукт; LQ_P – множество допустимых значений показателей качества;

$MQ_M = \langle Q_{PP}, Q_M, LQ_M \rangle$ – модель качества процесса, где Q_{PP} – множество параметров процесса; Q_M – множество значимых показателей качества; LQ_M – множество допустимых значений показателей;

MM – комплекс математических моделей, использующихся для решения задач управления качеством процесса выращивания;

AK – комплекс алгоритмов решения задач мониторинга и коррекции процесса выращивания в соответствии с локальными критериями качества разных сторон технологического процесса и глобальным критерием качества, а также прогноза качества монокристалла;

$ПК$ – комплекс инструментальных программных средств, реализующих функциональные задачи ИАС УКПВ;

OpK – организационный комплекс ИАС УКПВ, то есть организационные принципы и документы, регламентирующие контроль технологического процесса и уровня качества продукции;

$R1 \subseteq Q_M \times Q_P$ – отображение множества параметров качества процесса на множество параметров качества продукта;

$R2 \subseteq MM \times F$ – распределение моделей по подсистемам;

$R3 \subseteq F \times Q_M$ – отношение влияния функциональных подсистем на качество технологического процесса.

Структурная схема ИАС УКПВ показана на рис. 2.3. Комплексы функ-

циональных задач ИАС УКПВ определяются для каждой подсистемы.

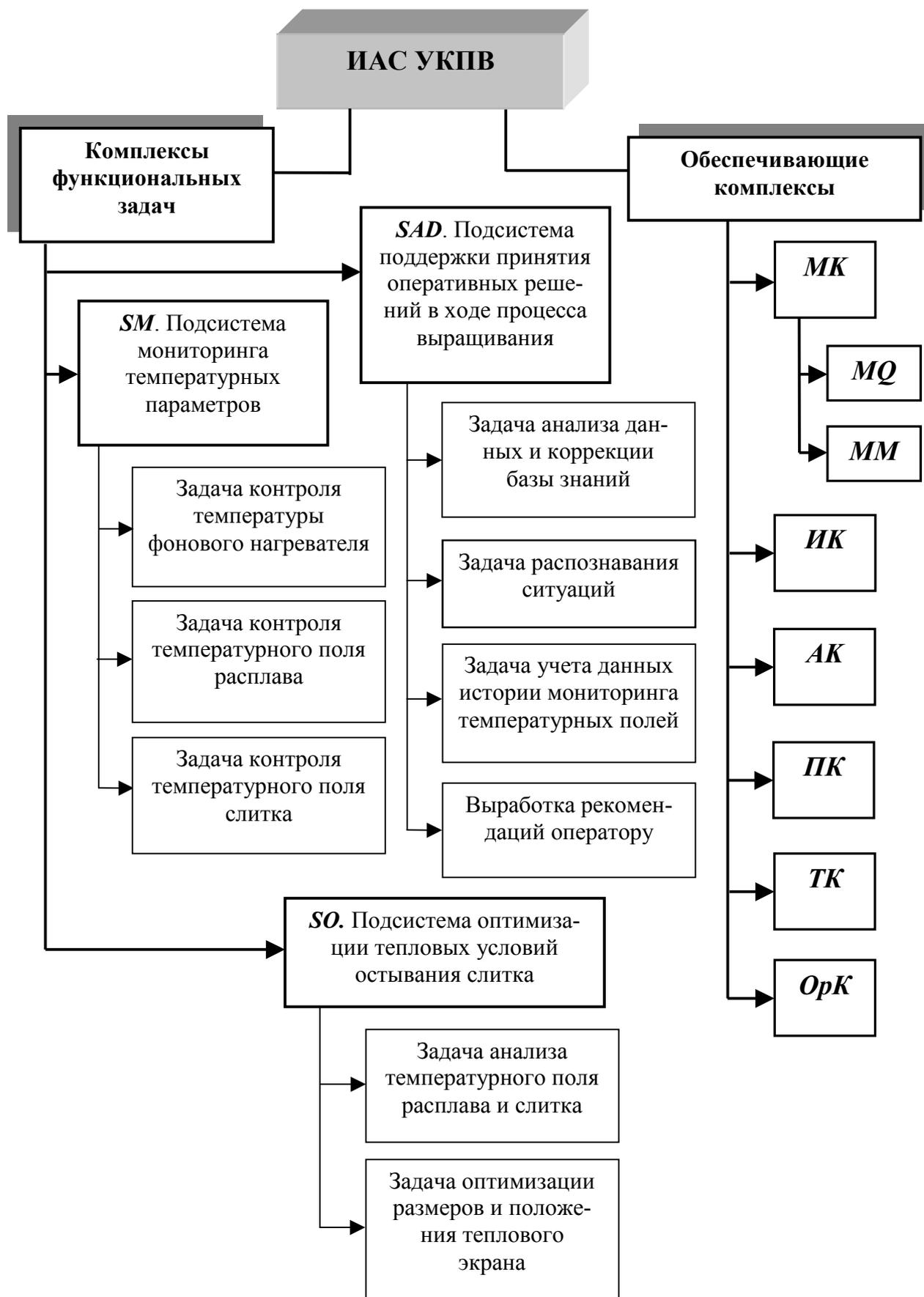


Рисунок 2.3 – Структурная схема ИАС УКПВ

Краткая характеристика комплексов функциональных задач ИАС.

1. *Комплекс задач подсистемы мониторинга* температурных параметров процесса выращивания предназначен для обеспечения наблюдаемости температурных параметров процесса путем косвенного многоточечного измерения температуры в слитке и в подкристальной области и выдачи результатов измерения на монитор мастера-технолога в табличном виде.

В комплекс входят следующие задачи:

- контроль температуры фонового нагревателя;
- контроль температурного поля расплава;
- контроль температурного поля слитка.

Комплекс задач решается непосредственно на ростовой установке. Продолжительность решения задач обусловлена продолжительностью процесса выращивания и составляет от 6 до 12 часов. Периодичность решения задач определяется периодичностью запуска процессов выращивания на данной установке. Автоматизированное решение задач может быть прекращено по желанию мастера при обнаружении нештатной ситуации.

В процессе решения данного комплекса задач подсистема мониторинга связана информационными потоками с комплексом задач подсистемы поддержки принятия оперативных решений в ходе процесса выращивания (*SAD*).

Информация о температурных полях и температурных градиентах в слитке и в подкристальной области обрабатывается в *SAD*, которая генерирует в случае необходимости сообщения и рекомендации для мастера-технолога.

Входной информационный поток комплекса задач содержит:

1. Исходные данные для тепловых расчетов, в том числе заданный диаметр слитка, масса загрузки, диаметр тигля, скорости вращения затравки и тигля, значения теплотехнических характеристик материалов и т.п.

2. Первичные данные, полученные от физических датчиков, в том числе температура основного нагревателя, мощность, потребляемая фоновым нагревателем, температура расплава под слоем герметизатора, текущая масса слитка, скорость вертикального перемещения затравки и штока тигля и др.

Выходной информационный поток комплекса задач содержит массивы

значений температуры в заданных точках расплава и слитка, массивы осевых и радиальных градиентов температуры в подкристальной области и в слитке.

2. *Комплекс задач подсистемы поддержки принятия оперативных решений (SAD)* в ходе процесса выращивания предназначен для обеспечения мастера-технолога советами и рекомендациями по ведению процесса выращивания на разных стадиях. В комплекс входят следующие задачи:

- анализ данных мониторинга, истории процесса и коррекция базы знаний;
- учет данных истории мониторинга температурных полей;
- прогноз и распознавание ситуаций;
- выработка рекомендаций для оператора или мастера-технолога.

Комплекс задач решается непосредственно на рабочем месте мастера-технолога. Периодичность и продолжительность решения задач и условия, при которых прекращается решение комплекса задач полностью совпадают с условиями, сформулированными для комплекса задач №1.

В процессе решения второго комплекса задач подсистема поддержки принятия оперативных решений является получателем данных о выходном информационном потоке подсистемы мониторинга температурных полей. Информация о температурных полях и температурных градиентах в слитке и в подкристальной области обрабатывается в *SAD*, которая генерирует в случае необходимости сообщения и рекомендации для оператора и мастера-технолога. Кроме того, подсистема *SAD* получает необходимые данные от подсистем АСУ ТП процесса выращивания, в частности, значения уставок и текущие значения скорости вытягивания затравки, температуры основного нагревателя и т.п. Для коррекции базы знаний необходимо также получать информацию о качестве выращенных слитков. Таковую информацию предоставляет отдел технического контроля.

Таким образом, входной информационный поток комплекса задач содержит массивы значений температуры в заданных точках расплава и слитка, массивы осевых и радиальных градиентов температуры в подкристальной области и в слитке, значения скоростей вращения тигля и затравки, статистические данные о плотности дислокаций в выращенных слитках.

Выходной информационный поток *SAD* содержит сообщения и рекомендации для мастера-технолога.

2. *Комплекс задач подсистемы оптимизации тепловых условий остывания слитка (SO)* предназначен для определения диаметра, высоты и расположения теплового экрана относительно слитка в ходе технологической подготовки производства монокристаллов и, тем самым, оптимизации тепловых условий в зоне остывания слитка. В комплекс входят:

- анализ температурного поля расплава и слитка;
- оптимизация размеров и положения теплового экрана.

Комплекс задач решается в отделе технологической подготовки производства на рабочей станции инженера-технолога. Периодичность решения задач определяется производственным планом по выпуску монокристаллов различного диаметра. Продолжительность решения задач в зависимости от мощности рабочей станции составляет 1...5 мин. Решение комплекса задач возможно только автоматизированным способом.

Связь данного комплекса задач с другими комплексами косвенная, решение данного комплекса задач не зависит от результатов решения задач описанных выше комплексов, но оно непосредственно влияет на качество выпускаемой продукции.

Входной информационный поток комплекса задач формируется из значений геометрических параметров теплового узла и слитка, значений теплофизических параметров материалов, табличных значений распределения температуры на стенках тигля, заданных констант – значений целевой функции минимизации среднеквадратичных значений температурных градиентов вдоль оси слитка.

Выходной информационный поток комплекса задач содержит рассчитанные значения размеров теплового экрана и координаты его положения относительно слитка и расплава.

ИАС УКПВ имеет информационное, математическое, программное, техническое и организационное обеспечение.

В информационное обеспечение ИАС УКПВ входят:

1. Комплект нормативных документов, регламентирующих параметры качества монокристаллов.

2. База данных об информативно-значимых технологических параметрах, достаточно полно отражающих существо процессов технологии в их связи с уровнем качества получаемой продукции.

3. База знаний, позволяющая осуществлять поддержку принятия оперативных решений по корректировке параметров и хода процесса выращивания.

В математическое обеспечение ИАС УКПВ входят:

1. Комплекс моделей, предназначенных для решения задач косвенного измерения параметров температурных полей в процессе выращивания.

2. Комплекс моделей и процедур преобразования первичных параметров процесса выращивания в признаки распознаваемых ситуаций.

3. Модели и алгоритмы распознавания ситуаций и выработки рекомендаций мастеру-технологу.

4. Модели и алгоритмы коррекции базы знаний.

5. Комплекс методов и моделей оптимизации геометрических параметров экрана теплового узла.

Программное обеспечение ИАС УКПВ представляет собой комплекс программных средств, реализующий решение задач, перечисленных выше, в том числе мониторинг процесса выращивания; поддержка принятия оперативных решений в ходе процесса и оптимизация геометрических параметров теплового экрана.

В техническое обеспечение ИАС УКПВ входят:

1. Комплекс инструментальных средств измерения и контроля информативно-значимых параметров процесса выращивания и показателей качества монокристалла.

2. Технические средства автоматизированного управления процессом выращивания для получения продукции заданного качества.

Организационное обеспечение ИАС УКПВ представляет собой организационные принципы осуществления производственного контроля процессов технологии и оценки уровня качества продукции.

2.4. Концепция мониторинга температурных полей в процессе выращивания монокристаллов

Целями создания подсистемы мониторинга являются последовательное снижение до минимального уровня плотности дислокаций в выращиваемых монокристаллах и, соответственно, количества бракованной продукции.

Задачей подсистемы мониторинга является информационная поддержка функционирования подсистемы “Советчик”, которая входит в состав ИАС УКПВ производства монокристаллов.

Объектом мониторинга является процесс выращивания монокристаллов полупроводников. Подсистема мониторинга параметров процесса выращивания монокристаллов предназначена для информационной поддержки функционирования информационно-аналитической системы управления качеством процесса выращивания монокристаллов полупроводников методом Чохральского и реализации функций по своевременному прогнозированию и выявлению критических и предупреждению нештатных ситуаций в процессе выращивания.

Особенностью задачи мониторинга температурных полей в расплаве и слитке является недоступность этих зон для прямых многоточечных измерений. Поэтому необходимо реконструировать температурное поле расчетным путем с применением численных методов и нейросетевых технологий. Данные прямых измерений параметров процесса выращивания поступают в систему мониторинга из АСУ ТП ростовой установки. После первичной обработки и агрегирования эти данные используются для вычисления параметров температурного поля расплава и слитка. Эти параметры являются основным объектом мониторинга, так как непосредственно влияют на качество монокристалла.

Подсистема мониторинга должна обеспечивать выполнение следующих функций:

- косвенное измерение температуры фонового нагревателя;

- учет текущего уровня расплава в тигле;
- воссоздание температурного поля (абсолютных значений в °С и градиентов температуры по радиусу и по вертикальной оси) в подкристальной области и в слитке и вывод результатов измерений и вычислений на монитор в табличном виде;
- информационная поддержка функционирования подсистемы “Советчик” в целях коррекции режима процесса выращивания и устранения критических ситуаций;
- периодическое уточнение параметров моделей;
- ведение базы данных мониторинга и ее синхронизация с базой данных подсистемы поддержки принятия оперативных решений.

При разработке подсистемы мониторинга сложного технологического процесса, каким является процесс выращивания монокристаллов, необходимо руководствоваться следующими основными принципами:

1. Организационное, информационное и функциональное единство подсистемы мониторинга, основу которого составляют:

- единая система классификации производственных ситуаций, показателей и критериев оценки состояния процесса выращивания монокристаллов;
- базовые (типовые) протоколы, алгоритмы (программы) сбора, обработки и обмена информацией, подготовки и автоматизированной поддержки принятия и реализации управленческих решений на основе данных мониторинга;
- обеспечение целостности и непротиворечивости информации в системе.

3. Применение методов и моделей вычислительного интеллекта для получения данных косвенных измерений, для анализа, прогнозирования и моделирования процессов в объекте мониторинга.

4. Унификация программных, информационных и технических средств, обеспечение совместимости элементов подсистемы мониторинга, возможности ее модульного наращивания и модернизации;

5. Подсистема должна быть реализована в виде совокупности совместно функционирующих модулей (компонентов), взаимодействие между которыми

должно осуществляться через единую информационную среду.

6. Подсистема должна быть разработана как совокупность независимых, но логически взаимосвязанных программных модулей и элементов для обеспечения возможности структурного и функционального развития.

Для реализации указанных принципов разработан комплекс моделей – источников данных. Модели объединены в многокомпонентную структуру, которая представлена в подразделе 2.5.

2.5. Обобщенная структура взаимосвязей моделей решения задач мониторинга процесса выращивания монокристаллов

Для решения задачи мониторинга температурных полей в расплаве и слитке требуется разработать комплекс моделей, которые осуществляют поддержку процесса преобразования первичных параметров, полученных из АСУ ТП, в параметры температурных полей. Для описания связей моделей в таком комплексе разработана многосвязная модельная структура, способная отражать взаимосвязь физических явлений и внешних воздействий. Этот подход позволяет дополнять и уточнять модельное описание контролируемого процесса без качественного изменения структуры комплекса, применять различные математические и феноменологические модели для описания различных явлений, использовать различные уровни детализации для исследования внутренних процессов и свойств с гарантированным сохранением общей целостности. Такая декомпозиция позволяет сделать структуру гибкой и прозрачной.

Структурная матрица взаимосвязи исходных данных, моделей и вторичных параметров показана в табл. 2.1 [178]. Зарегистрированные значения первичных параметров процесса выращивания – X_i , $i = \overline{1, m}$ – суть данные, характеризующие конкретную ситуацию на объекте управления. Подсистема мониторинга должна не только непрерывно отслеживать изменения текущей ситуации, но и достоверно, с расчетом на опережение, предсказывать дальнейший ход и результат контролируемого процесса.

Таблица 2.1 – Структурная матрица взаимосвязи исходных данных, моделей и вторичных параметров

Входы	Модели	Выходы					
		F_1	F_2	---	F_j	---	F_n
X_1	M_1	Y_{11}	Y_{12}	---	Y_{1j}	---	Y_{1n}
X_2	M_2	Y_{21}	Y_{22}	---	Y_{2j}	---	Y_{2n}
---	---	---	---	---	---	---	---
X_i	M_i	Y_{i1}	Y_{i2}	---	Y_{ij}	---	Y_{in}
---	---	---	---	---	---	---	---
X_m	M_m	Y_{m1}	Y_{m2}	---	Y_{mj}	---	Y_{mn}

Выходы системы F_j , $j = \overline{1, n}$ – конечное множество вторичных данных, полученных при текущих значениях входных сигналов X_i . Связи между данными X_i и выходами F_j осуществляют преобразующие модели M_i . Необходимое конкретное содержание выхода F_j обеспечивается не только конечным числом s_j (количеством активных элементов в столбце j), но и подмножествами выходных сигналов моделей Y_{ij} , участвующих в формировании выхода F_j .

Модель M_i , описывающую связь вектора входных параметров X_i и выходной величины F_j , представим отображением:

$$M_i: X_i \rightarrow F_j. \quad (2.3)$$

В общем случае каждая модель M_i может быть представлена матрицей показанной в табл. 2.2.

Здесь x_l^i – элемент вектора X_i ; Y_k^i – k -е подмножество выходов модели M_i ; I_{lk} – информационное (смысловое) содержание, отражающее связь параметра x_l^i – с композицией выходов Y_k модели M_i .

В каждом столбце матрицы табл. 2.2 имеется g_k активных элементов ($g_k \leq r$). Отдельные модели связаны между собой, так же, как связаны физические процессы, которые они воспроизводят.

Таблица 2.2 – Структурная матрица модели M_i

Входы	Выходы модели M_i					
	Y_1^i	Y_2^i	---	Y_k^i	---	Y_p^i
x_1^i	I_{11}	I_{12}	---	I_{1k}	---	I_{1p}
x_2^i	I_{21}	I_{22}	---	I_{2k}	---	I_{2p}
---	---	---	---	---	---	---
x_l^i	I_{l1}	I_{l2}	---	I_{lk}	---	I_{lp}
---	---	---	---	---	---	---
x_r^i	I_{r1}	I_{r2}	---	I_{rk}	---	I_{rp}

Формальную модель предложенной многокомпонентной структуры можно представить в виде [178]:

$$MCS = \langle K, E, R, F \rangle, \quad (2.4)$$

где K – множество компонентов; E – множество факторов внешней среды, в которой функционирует комплекс моделей; R – множество отношений между компонентами; F – множество задач, решаемых при помощи комплекса моделей.

Предложенная обобщенная структура взаимосвязей комплекса моделей решения задач мониторинга является концептуальной основой для построения подсистемы мониторинга. Подсистема мониторинга температурных полей является поставщиком данных для подсистемы поддержки принятия оперативных решений “Советчик”, которая решает задачи распознавания ситуаций и выдачи сообщений и рекомендаций по коррекции процесса выращивания.

2.6. Разработка модели подсистемы поддержки принятия оперативных решений в процессе выращивания

Подсистема поддержки принятия оперативных решений (ППОР) реализует комплекс задач поддержки принятия оперативных решений в ходе процесса выращивания для обеспечения мастера-технолога рекомендациями по

ведению процесса выращивания на разных стадиях. В комплекс входят следующие задачи [179]:

- прием данных от АСУ ТП и расчет параметров температурных полей в расплаве и слитке;
- распознавание текущей ситуации с точки зрения её критичности;
- выработка сообщений и рекомендаций мастеру-технологу;
- формирование истории процесса и выданных сообщений;
- дообучение системы на примерах, уточнение правил для выработки сообщений и рекомендаций.

В процессе реализации данного комплекса задач подсистема ППОР получает необходимые данные от подсистемы мониторинга температурных полей, от АСУ ТП процесса выращивания и от подсистемы ТЭП АСУ предприятия. Входной информационный поток комплекса задач содержит массивы значений температуры в заданных точках расплава и слитка, массивы осевых и радиальных градиентов температуры в подкристалльной области и в слитке, значения скоростей вращения тигля и затравки, а также необходимые для принятия решений значения технико-экономических параметров производства. Выходной информационный поток представляет собой набор сообщений и рекомендаций для оператора или мастера-технолога по выходу из критических и нештатных ситуаций. Функционирование подсистемы ППОР обеспечивается за счет:

- сопряжения подсистемы с АСУ ТП;
- сопряжения с подсистемой мониторинга на уровне баз моделей и баз данных;
- рационального выбора моделей представления и обработки знаний о процессе выращивания с учетом как физических, так и технико-экономических параметров и их взаимосвязей;
- возможности обучения и дообучения подсистемы;
- универсальности подсистемы ППОР в рамках рассматриваемых техноло-

гических процессов.

Для синтеза подсистемы требуется разработать её модель, а также модель поиска и принятия оперативных решений для оператора в ходе процесса выращивания. Для этого, прежде всего, сформулируем задачу принятия решений с учётом специфики предметной области.

Задачу принятия решений по коррекции хода процесса выращивания необходимо рассматривать как задачу коррекции бизнес-процесса, владельцем которого является мастер-технолог. Это связано с тем, что при выращивании монокристалла могут возникать критические и нештатные ситуации. При анализе и устранении этих ситуаций приходится учитывать технико-экономические показатели, такие, как время, прошедшее с начала процесса, энергетические затраты, средний коэффициент выхода в готовую продукцию, средний коэффициент безвозвратных потерь материала, средняя цена готовой продукции и др. Эти параметры должны учитываться при поиске решений в пространстве состояний производственного процесса.

Вербально задача формулируется следующим образом: задается некоторое подмножество начальных состояний, подмножество конечных состояний и множество правил преобразования состояний. Требуется найти такую последовательность правил, которая позволяет управляемому объекту перейти из текущего состояния в желаемое или допустимое. Если искомая последовательность должна удовлетворять требованиям оптимальности, то имеем задачу поиска оптимального решения, если требованиям допустимости – то задачу поиска удовлетворительного решения.

Задача принятия решений определяется набором [179]:

$$Z = \langle DM, S, S_d, S_0, S_k, P, Q \rangle, \quad (2.5)$$

где DM – модель проблемной ситуации в предметной области; S – множество текущих состояний (ситуаций); $S_d \in S$ – подмножество возможных (допустимых) состояний; $S_0 \in S$ – подмножество начальных состояний; $S_k \in S$ – подмножество

конечных, или целевых состояний; $P: S \rightarrow S$ – конечное множество правил преобразований. Каждое правило $P_i \in P$ является функцией, реализующей отображение $P_i: S_i \rightarrow S$, где S_i – область определения P_i ; Q – множество критериев качества решения.

Структура подсистемы ППОР показана на рис. 2.4. Подсистема содержит все необходимые функциональные узлы, включая базу данных, базу знаний, базу моделей, базу алгоритмов, модель поиска решений и программный монитор, реализующий информационную технологию поддержки принятия оперативных решений [179].

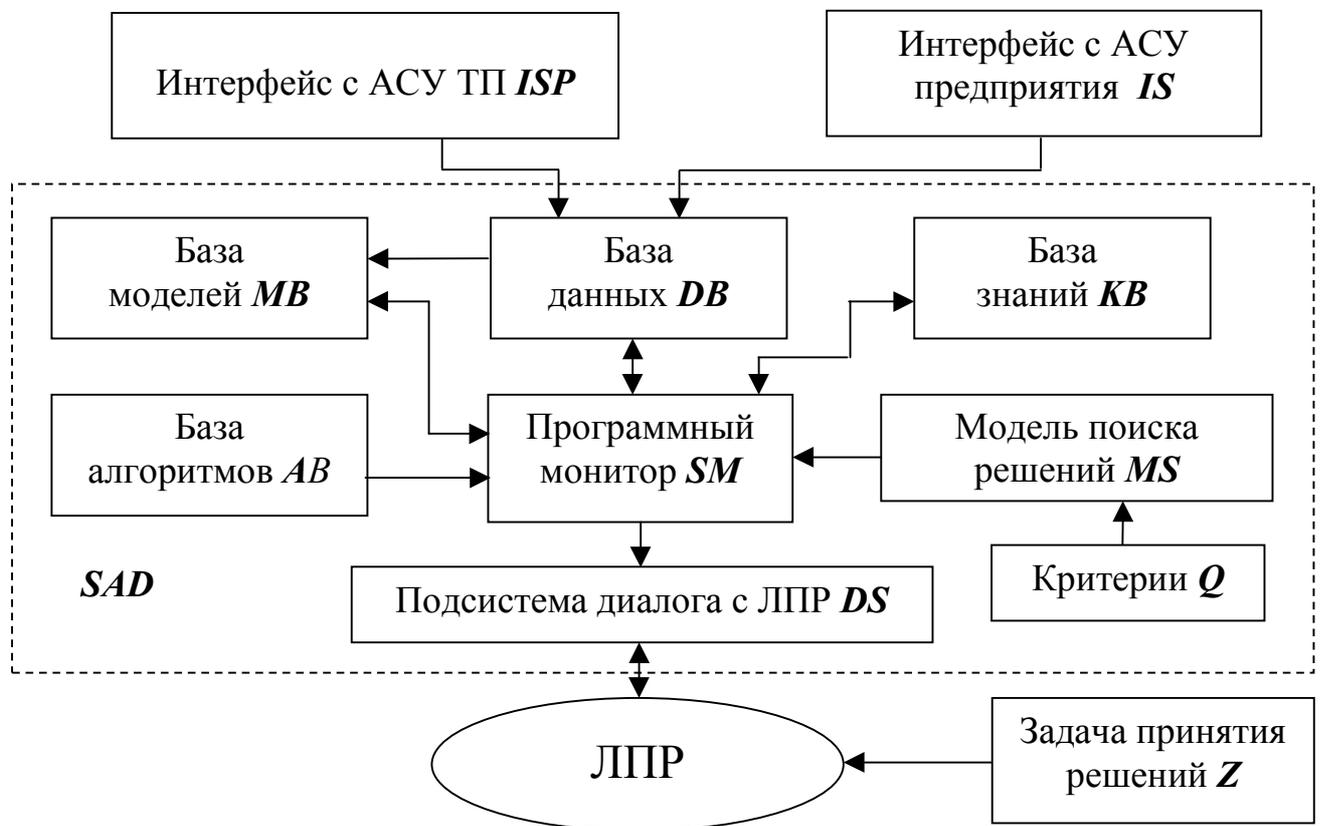


Рисунок 2.4 – Структура подсистемы поддержки принятия оперативных решений

Формально состав подсистемы поддержки принятия решений SAD представим в виде [179]:

$$SAD = \langle MS, KB, MB, DB, SS, RR, SM, AB, ISP, IS, DS \rangle, \quad (2.6)$$

где MS – модель поиска решений; KB – база знаний; MB – база моделей для решения функциональных задач мониторинга физических процессов, подлежащих анализу; DB – база данных; SS – множество признаков ситуации; $RR \subseteq Q_{PP} \times SS$ – отображение множества показателей, характеризующих состояние процесса, на множество признаков ситуации; SM – программный монитор; AB – база алгоритмов; ISP – интерфейс с АСУ ТП; IS – интерфейс с подсистемой ТЭП АСУ предприятия; DS – блок диалога с ЛПР.

Основополагающими элементами интеллектуальных СППР являются модели представления проблемных ситуаций, модели поиска решений, а также средства организации диалогового взаимодействия с пользователем (экспертом, ЛПР) и средства связи с другими информационными системами. Проблемная ситуация может описываться посредством некоторого выделенного множества признаков или посредством некоторой структуры, позволяющей отражать различные связи (отношения) между элементами проблемной области. В качестве таких структур можно использовать любые известные модели знаний. Чаще всего используются системы продукций, семантические сети или фреймы.

Модель поиска решений определяет допустимые преобразования ситуаций и набор стратегий применения этих преобразований. Для применения ПСППОР в режиме “советчика”, модели представления проблемной ситуации и поиска решения должны периодически корректироваться по результатам предыдущих процессов выращивания монокристаллов.

Модель поиска решений, предназначенную для решения задачи коррекции хода процесса выращивания, формально определим набором [179]:

$$MS = \langle FR, A_S, P, A_P, F_S, F_M \rangle, \quad (2.7)$$

где FR – представление проблемной ситуации и тенденций изменения признаков ситуаций на языке высказываний нечеткой логики; A_S – множество алгоритмов выбора продукций и их интерпретации при выборе решения; P – множество продукций; A_P – алгоритм пополнения множества P в процессе

функционирования СППР; F_m – правила модификации модели FR (расширения алфавита, модификации множества P).

Модель базы знаний KB имеет следующий вид:

$$KB = \langle WNM, RT, AT \rangle, \quad (2.8)$$

где WNM – весовые коэффициенты нейронных сетей системы мониторинга, необходимые для расчета температур в расплаве; RT – таблица правил для интерпретации данных системы мониторинга и определения риска нарушения оптимальных условий выращивания с точки зрения выбранных критериев; AT – таблица правил выдачи рекомендаций.

База моделей MB содержит:

- набор моделей для решения функциональных задач мониторинга и анализа температурных полей расплава и слитка, определения температуры фонового нагревателя и моделирования процесса кристаллизации, преобразования значений первичных параметров в значения признаков. Модели используются как в подсистеме мониторинга, так и в подсистеме ППОР как источники первичных данных, необходимых для принятия решения;
- модели распознавания ситуации и определения степени критичности ситуации.

База данных DB содержит:

- исходные данные для тепловых расчетов, в том числе заданный диаметр слитка, масса загрузки, диаметр тигля, скорости вращения затравки и тигля, значения теплотехнических характеристик материалов и т.п.;
- первичные данные, полученные от физических датчиков, в том числе температура основного нагревателя, мощность, потребляемая фоновым нагревателем, температура расплава под слоем герметизатора, текущая масса слитка, скорость вертикального перемещения затравки и штока тигля, значения скоростей вращения тигля и затравки др.;
- массивы значений температуры в заданных точках расплава и слитка;
- массивы осевых и радиальных градиентов температуры в подкристалльной

области и в слитке;

- данные мониторинга температурных полей в течение процесса выращивания;
- данные в виде формулировок рекомендаций для мастера-технолога, выданных в течение процесса.

Системный монитор SM – основной программный модуль подсистемы ППОР, осуществляющий диспетчеризацию процесса анализа ситуации и генерации рекомендаций, запуск и остановку всех функциональных модулей подсистемы.

База алгоритмов представлена набором:

$$AB = \langle AK, AГП, АО, АД, АГВП, АФИ, АВС \rangle, \quad (2.9)$$

где AK – алгоритмы кластеризации пространства признаков ситуаций; $AГП$ – алгоритмы генерации примеров; $АО$ – алгоритмы обучения нейронных сетей на примерах; $АД$ – алгоритмы диагностики состояния процесса выращивания; $AГВП$ – алгоритмы модификации правил для выработки сообщений и рекомендаций; $AФИ$ – алгоритмы формирования истории мониторинга температурных полей и истории генерации рекомендаций; $АВР$ – алгоритмы выработки рекомендаций мастеру-технологу. Эти алгоритмы реализованы в программном обеспечении подсистемы ППОР в виде функциональных модулей, работающих под управлением программы-монитора.

Интерфейс с АСУ ТП – ISP описывается набором:

$$ISP = \langle XM, XS \rangle, \quad (2.10)$$

где XM – множество входов подсистемы, отображающих данные мониторинга температурных полей в процессе выращивания; XS – множество входов подсистемы, отображающих данные, получаемые от существующей АСУ ТП.

Множество XM определяется набором:

$$XM = \{T_L, T_S, FF, GR, GZ\}, \quad (2.11)$$

где T_L – массив распределения температур в расплаве; T_S – массив распреде-

ления температур в кристалле; FF – направление прогиба фронта кристаллизации; GR – массив температурных градиентов по радиусу слитка; GZ – массив температурных градиентов по оси слитка;

Множество XS определяется вектором:

$$XS = \{T_{OH}, T_{ФН}, V_{Ш}, m_C, L_M, DD_C, L_C\}, \quad (2.12)$$

где T_{OH} – температура основного нагревателя; $T_{ФН}$ – температура фонового нагревателя; $V_{Ш}$ – скорость перемещения штока тигля; m_C – текущая масса слитка; L_M – уровень расплава в тигле, %; DD_C – текущее отклонение диаметра слитка; L_C – текущая длина слитка, %.

Интерфейс с подсистемой ТЭП АСУ предприятия – IS описывается набором:

$$IS = \langle XE, MR \rangle, \quad (2.13)$$

где XE – множество входов подсистемы, отображающих технико-экономические показатели процесса выращивания; MR – множество запросов СППР, на получение текущих значений экономических показателей.

Блок диалога с ЛПР – DS – можно представить набором:

$$DS = \langle L(RD, SR(D_S, D_P)), MS, A, P_A \rangle, \quad (2.14)$$

где L – язык диалога; RD – правила формирования сообщений; SR – множество стандартных сообщений; D_S – множество заключений, определяющих текущее состояние процесса выращивания; D_P – множество рекомендаций по коррекции температурного режима выращивания; MS – стандартное сообщение, имеющее вид:

$$MS = \langle TM, T, R, PM,) \rangle, \quad (2.15)$$

где TM – время сообщения, соотнесенное со временем процесса выращивания; T – ключевая тема сообщения; R – ссылка на предыдущее сообщение PM ; A – ответ пользователя; P_A – процедура выдачи советов.

Таким образом, получено формализованное описание задачи принятия решений и структуры подсистемы поддержки принятия оперативных решений в ходе процесса выращивания. Следующим этапом синтеза ИАС УКПВ является получение формализованного описания структуры подсистемы оптимизации тепловых условий остывания слитка (выбора геометрических параметров теплового экрана). Эта подсистема используется на стадии технологической подготовки производства монокристаллов.

2.7. Разработка модели подсистемы оптимизации условий остывания слитка в ростовой установке

В выращенных монокристаллах GaAs наблюдается образование и размножение дислокаций различного типа. Иногда они группируются в скопления, сильно ухудшающие структуру слитков. Для многих областей применения монокристаллов наличие дислокаций, особенно их скоплений, нежелательно. Исследованиями установлена прямая связь между величинами температурных градиентов, температурными напряжениями и количеством дислокаций. Термические напряжения можно уменьшить подбором значений параметров теплового узла и условий выращивания, обеспечивающими уменьшение градиентов температуры в слитке в процессе выращивания и охлаждения. Исследования показывают, что особенности экранировки существенно влияют на качество получаемого монокристалла. Именно поэтому важно на стадии технической подготовки производства (ТПП) монокристаллов с заданными геометрическими и электрофизическими параметрами оптимизировать размеры и положение теплового экрана, окружающего остывающий слиток в процессе выращивания.

Модель подсистемы оптимизации условий остывания слитка запишем в виде:

$$SO = \langle IT_{OVO}(T_{ATП}(M_{PT}, M_{PG}, P_{Э}, A_{PT}), T_O(M_O, A_O)) \rangle, \quad (2.15)$$

где IT_{OVO} – информационная технология оптимизации условий остывания; $T_{ATП}$ – задача анализа тепловых полей; M_{PT} – модель расчета температурного

поля; M_{PT} – модель расчета граничных условий; P_{Σ} – множество параметров теплового экрана и теплового узла; A_{PT} – алгоритм расчета температурного поля; T_O – задача оптимизации параметров теплового экрана; M_O – модель задачи оптимизации; A_O – алгоритм оптимизации.

Полученное формализованное описание структуры подсистемы оптимизации тепловых условий даёт возможность подойти к разработке соответствующей информационной технологии. Решение задачи разработки методов, моделей и информационной технологии оптимизации тепловых условий при остывании слитка приведено в разделе 4.

2.8. Разработка метода построения информационной технологии поддержки принятия решений по диагностике и коррекции сложного производственного процесса

Как было указано в разделе 1, в настоящее время отсутствует единый системный подход в разработке систем мониторинга и диагностики сложных производственных процессов. Это можно объяснить следующими причинами:

- принципиальная невозможность единого формального описания всех возможных видов состояний и явлений из-за применения разного математического аппарата для анализа различных по своей природе процессов;
- наличие большого количества возможных типов моделей представления знаний об объекте мониторинга, обусловленное спецификой предметных областей;
- отсутствие теоретического обоснования структуры и состава информационных технологий, способных обеспечить эффективное решение задач мониторинга СТС.

Исходя из вышеизложенного, проблема создания на концептуальном уровне метода разработки информационных технологий мониторинга, диагностики и поддержки принятия оперативных решений по коррекции сложных ТП является актуальной.

Согласно стандартному определению информационная технология (ИТ)

есть совокупность методов, приёмов и программно-технологических средств, объединенных в технологическую цепочку для обеспечения сбора, хранения, обработки и вывода информации. Любая технология подразумевает также наличие моделей и алгоритмов. Алгоритмы реализуются как информационные процессы, многообразие которых определяется как спецификой предметных областей, так и соответствующими методами и моделями.

Поставим задачу построения ИТ как задачу создания комплекса взаимосвязанных информационных процессов, использующих определенные методы и модели, и направленных на решение задачи диагностики сложного ТП. Согласно определению, метод – это обобщённый способ решения задач определённого класса. Для решения указанной выше задачи необходим метод, позволяющий синтезировать рациональный состав информационных технологий подобного назначения.

Метод построения ИТ диагностики сложного ТП. Этапы метода заключаются в следующем [180].

Этап 1. Формирование модели состава ИТ.

Разрабатывая информационную технологию необходимо определить её статическую часть – структуру данных (*DS*) и комплекс математических методов и моделей (*CMM*), а также описать динамическую составляющую информационной технологии – информационные процессы (*IP*) и их взаимодействие между собой (*IPI*). Исходя из этого информационная технология должна представляться набором:

$$IT = \langle DS, CMM, IP, IPI \rangle. \quad (2.16)$$

Каждый информационный процесс представляется блоком, имеющим информационные входы, управляющие входы, выходы и регламент выполнения, который определяется методами и моделями, привлекаемыми по мере необходимости для реализации процесса (рис.2.5).

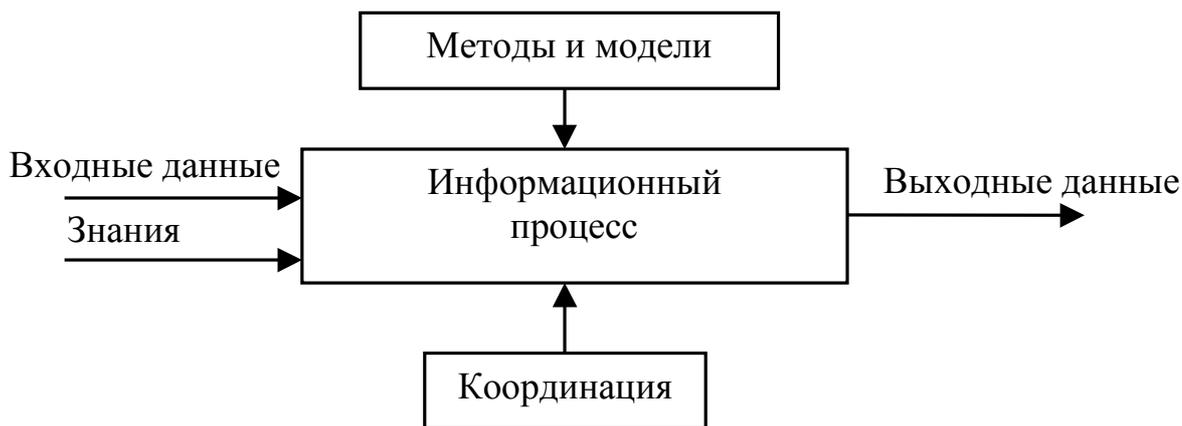


Рисунок 2.5 – Информационный процесс

Этап 2. Формирование состава и структуры системы диагностики (СППР). Формальное изображение состава СППР, осуществляющей диагностику, представлено выражением (2.6). Структура системы представлена на рис. 2.4.

Этап 3. Формирование состава базы данных и базы знаний.

Структура данных DS определяет информационный комплекс – базу данных значимых технологических параметров и базу знаний по распознаванию ситуаций, возникающих в ходе технологического процесса.

База данных должна содержать:

- исходные данные по физическим параметрам объекта мониторинга;
- первичные данные, полученные от физических датчиков в ходе технологического процесса;
- вторичные данные – результаты косвенных измерений;
- значения признаков ситуаций;
- массивы параметров функций принадлежности и другие параметры систем нечеткого логического вывода.

База знаний содержит:

- решающие правила распознавания ситуаций;
- массивы параметров нейронных сетей, если таковые используются для распознавания ситуаций или моделирования процессов;
- формулировки рекомендаций по коррекции ТП в случае возникновения такой необходимости;

- метаправила коррекции содержимого базы знаний.

Этап 4. Формирование состава комплекса математических методов и моделей.

Комплекс математических методов и моделей *СММ* должен содержать:

- модель проблемной ситуации в предметной области (*МРС*);
- модель структуры СППР как концептуальную основу построения информационной технологии;
- модель качества конечного продукта в виде совокупности показателей, характеризующих физические свойства продукта (*М_Q*), поскольку именно множество показателей качества продукта проецируется на множество показателей качества процесса изготовления;
- набор математических методов и моделей для расчета значений параметров процесса, которые невозможно измерить прямыми методами (*М_{ИМ}*);
- набор методов и моделей для решения задач мониторинга технологического процесса, включая распознавание ситуации (*ММ*);
- модели поиска решений для коррекции хода технологического процесса (*М_{SS}*) при возникновении неблагоприятных ситуаций;
- модели преобразования первичных данных в значения признаков ситуации (*М_{ТПД}*).

Этап 5. Формирование комплекса информационных процессов.

Комплекс информационных процессов представим набором:

$$IP = \langle IPC, IPDPP, IPM, IPDC, IPDS, IPDR, IPRM, IPFH \rangle, \quad (2.17)$$

где *IPC* – информационный процесс координации; *IPDPP* – информационные процессы предварительной обработки данных; *IPM* – информационные процессы косвенных измерений параметров технологического процесса; *IPDC* – информационные процессы преобразования данных в признаки ситуаций; *IPDS* – информационные процессы диагностики ситуаций; *IPDR* – информационные процессы выработки рекомендаций оператору; *IPRM* – информаци-

онные процессы модификации правил распознавания; *IPFH* – информационные процессы формирования истории мониторинга.

Как было указано выше, каждый процесс обработки информации использует определенный метод, одну или несколько моделей, один или несколько алгоритмов. Не рассматривая модельный и алгоритмический уровень процессов (этот уровень полностью зависит от конкретной задачи), рассмотрим взаимодействие процессов как структуру, в которой центральным управляющим звеном является процесс координации *IPC* (рис. 2.6).

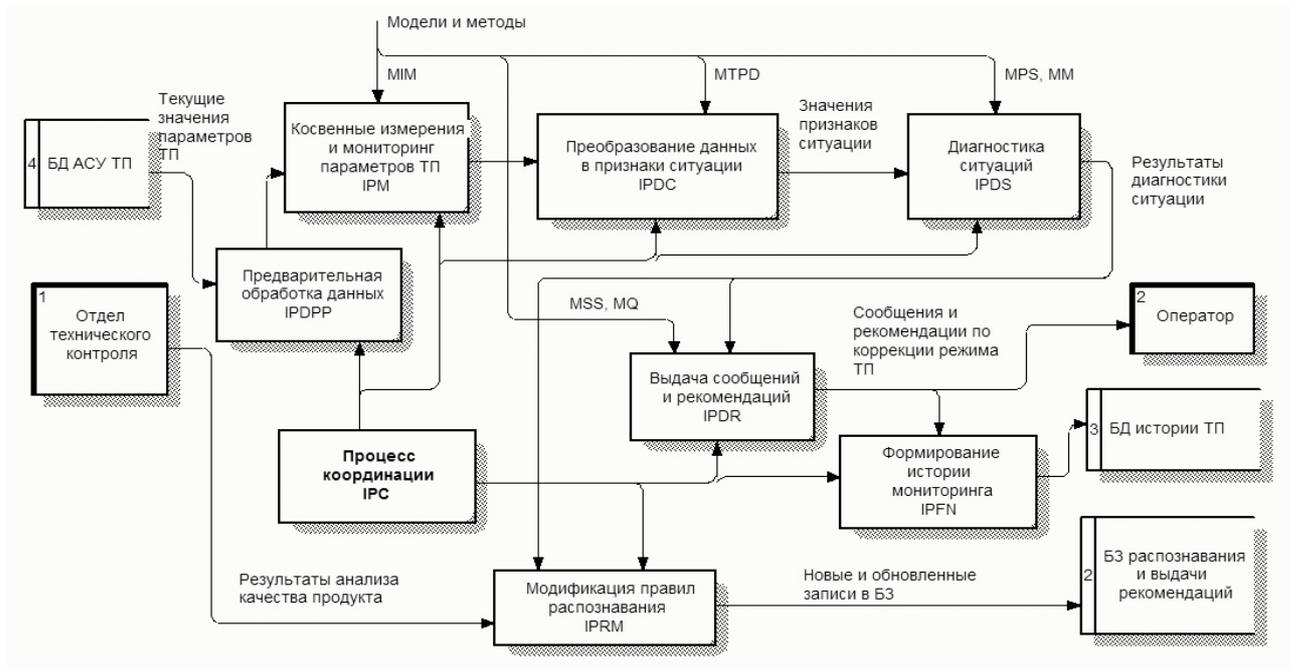


Рисунок 2.6 – Общая схема информационной технологии диагностики сложного технологического процесса

Основные информационные процессы решения задачи мониторинга представляют собой технологическую цепочку в соответствии с этапами решения задачи диагностики. Дополнительные и вспомогательные процессы, также управляемые координатором, направлены на решение задач коррекции баз данных и знаний, организации диалога с пользователем и т.п. Для каждого информационного процесса обработки указаны виды моделей, которые используются в данном процессе.

Таким образом, сформулированы этапы метода построения информацион-

ной технологии диагностики состояния сложного технологического процесса.

Выводы по разделу

1. Разработана концепция управления качеством технологического процесса, предусматривающая разработку и внедрение специализированной информационно-аналитической системы управления качеством процесса (ИАС УКПВ), которая осуществляет информационную поддержку основных этапов производства, а именно – мониторинг ряда параметров процесса (включая температурные поля в расплаве и слитке), распознавание сложившейся ситуации и выдачу рекомендаций оператору при необходимости устранения критической ситуации, а также поддержку задачи оптимизации условий остывания слитка, которая решается на стадии технологической подготовки производства.

Улучшение характеристик технологического процесса происходит за счет: оптимизации конструктивных параметров технологического оборудования в процессе ТПП; прямого и косвенного измерения параметров процесса в том числе путем моделирования физических явлений процесса; получения полной и достоверной диагностической информации о процессе; прогноза качества изделия в процессе изготовления; оптимизации реакции персонала на возникновение критических ситуаций; анализа качества продукта и коррекции базы знаний о процессе.

2. Формализована задача управления качеством сложного технологического процесса, основанная на мониторинге параметров процесса и коррекции его режима с помощью целенаправленных изменений значений задаваемых параметров, которые осуществляет оператор по рекомендациям информационно-аналитической системы.

3. Впервые предложена теоретико-множественная модель информационно-аналитической системы управления качеством процесса выращивания монокристаллов, которая, в отличие от известных, содержит в своем составе мо-

дель качества продукта, модель качества технологического процесса, функциональную подсистему оптимизации параметров оснастки на стадии технологической подготовки производства, функциональную подсистему мониторинга процесса выращивания, функциональную подсистему поддержки принятия оперативных решений по коррекции режима выращивания, отображение множества параметров качества процесса на множество параметров качества продукта и отображение влияния множества решений функциональных задач на качество технологического процесса, что позволяет реализовать комплексный подход к повышению качества технологического процесса и конечного продукта.

4. Разработана концепция мониторинга температурных полей в процессе выращивания монокристаллов, предусматривающая косвенное измерение температуры фонового нагревателя, учет текущего уровня расплава в тигле, воссоздание температурного поля в подкристалльной области и в слитке и вывод результатов измерений и вычислений на монитор оператора, что позволяет поднять на новый качественный уровень управление режимом процесса выращивания.

5. Получила дальнейшее развитие модель подсистемы поддержки принятия оперативных решений для коррекции процесса выращивания монокристаллов, путём введения базы математических моделей для решения функциональных задач мониторинга и анализа температурных полей расплава и слитка, предусматривающая интеграцию с АСУ ТП выращивания монокристаллов и с подсистемой технико-экономического планирования АСУ предприятия, что позволяет принимать оперативные решения в ходе процесса выращивания с учетом как физических, так и экономических показателей.

6. Получила дальнейшее развитие модель поиска решений (генерации рекомендаций) для оператора путем введения нечеткого представления ситуаций, которое учитывает тренды параметров процесса выращивания, что позволяет гибко реагировать на возникновение различных ситуаций в реальном времени технологического процесса и принимать адекватные решения.

7. Усовершенствован метод построения прикладной информационной технологии поддержки принятия решений по диагностике и коррекции сложного производственного процесса, путем добавления этапа формирования комплекса моделей физических явлений технологического процесса, что позволяет осуществить мониторинг важных параметров процесса, которые недоступны для прямых измерений и, тем самым, обеспечить качество конечного продукта.

8. Разработана модель подсистемы оптимизации условий остывания слитка, которая используется на этапе технической подготовки производства, что позволяет обеспечить минимальную плотность структурных дефектов в монокристаллах.

9. Разработана обобщенная структура взаимосвязей в комплексе моделей решения задач мониторинга процесса выращивания монокристаллов, что позволяет упростить синтез структуры подсистемы мониторинга сложного технологического процесса, в котором одновременно имеют место разнородные физические явления.

Основные результаты раздела опубликованы в научных трудах автора [178, 179, 180, 181].

РАЗДЕЛ 3.

РАЗРАБОТКА МОДЕЛЕЙ, МЕТОДА И ИНФОРМАЦИОННОЙ ТЕХНОЛОГИИ МОНИТОРИНГА ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПОЛЕЙ В ПРОЦЕССЕ ВЫРАЩИВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ

Информационная технология мониторинга температурных полей позволяет обеспечить необходимыми данными операторов и технологов, осуществляющих контроль качества продукта непосредственно в процессе его изготовления и является одной из необходимых составляющих ИАС УКПВ. Это объясняется тем, что на структурное совершенство растущего монокристалла решающее влияние оказывает именно температурное поле. Сущность концепции мониторинга – определение параметров температурного поля в расплаве и слитке расчетным путем с применением специально разработанных методов и моделей, визуализация результатов косвенных измерений, а также передача результатов мониторинга в подсистему «Советчик». Разработанные в третьем разделе модели предназначены для получения необходимого объема данных о температурных полях в расплаве и слитке в процессе выращивания.

Процесс мониторинга состоит из следующих, периодически повторяющихся этапов:

1. Получение из базы данных АСУ ТП результатов прямых измерений значений температур в отдельных точках теплового узла ростовой установки и механических параметров процесса выращивания (скорость вытягивания, скорости вращения, диаметр слитка, уровень расплава в тигле и т.д.).
2. Расчет температуры фонового нагревателя, находящегося в расплаве.
3. Расчет значений параметров температурного поля в расплаве и слитке.
4. Выдача на монитор оператора-технолога значений параметров температурного поля в расплаве и значений градиентов температуры по радиусу и оси слитка.
5. Фиксация в базе данных рассчитанных значений для передачи в систему поддержки принятия решений по коррекции теплового режима в случае

необходимости.

Особенностью задачи мониторинга температурных полей в расплаве и слитке является недоступность этих зон для прямых многоточечных измерений. Косвенные измерения можно осуществить, используя в качестве «виртуальных датчиков» комплекс специально разработанных моделей. В комплекс указанных моделей входят: нейросетевая модель для косвенного мониторинга температурного поля в расплаве; численно-аналитическая модель решения задачи расчета температурного поля в слитке; модель расчета температуры фонового нагревателя. К вспомогательным моделям относится нечеткий клеточный автомат, моделирующий процесс кристаллизации и используемый для уточнения значений коэффициента теплопроводности в зоне фронта кристаллизации в период наладки системы мониторинга. Входами перечисленных моделей являются данные прямых измерений температуры и механических параметров, а выходами – параметры температурных полей в слитке и подкристалльной области расплава.

3.1. Разработка нейросетевой модели для косвенного мониторинга температурного поля в расплаве

Целью данного подраздела является разработка модели расчета температуры в подкристалльной области, позволяющей в реальном времени реконструировать картину температурного поля с учетом влияния динамики движения расплава и других факторов. Данная модель входит в комплекс «виртуальных датчиков» температурного поля. Для обоснования применения специальной модели и для её построения необходимо проанализировать условия тепломассопереноса в расплаве.

Основными физическими явлениями, определяющими конфигурацию температурного поля в расплаве, являются кондуктивная теплопроводность, вынужденная конвекция, вызванная вращением тигля и затравки и свободная конвекция, обусловленная разностью температур у стенок тигля и вблизи по-

верхности расплава [182]. Непостоянство значений температур создает в расплаве неоднородное поле плотностей. Взаимодействие гравитационных сил с полем плотностей расплава приводит к свободной конвекции. Вынужденная конвекция возникает под действием центробежных и кориолисовых сил, величина которых обусловлена скоростью вращения кристалла ω_k и тигля ω_t [183].

Как было сказано выше, в стандартной постановке задачи математическая модель движения расплава в тигле и распределения примеси представляется нестационарными уравнениями Навье-Стокса, которые решаются совместно с уравнениями переноса тепла [183 – 186]. В таких математических моделях, как правило, предполагается осевая симметрия и учитывается вращение кристалла и тигля, а также тепловая и концентрационная конвекция. При исследовании технологических режимов выращивания кристаллов распределение температур на стенках тигля, поверхности расплава и в подкристалльной области задаётся в соответствии с экспериментальными данными в виде граничных условий [183].

Основные этапы решения задачи методом конечных элементов (МКЭ) включают:

- генерацию сетки конечных элементов для заданной сложной области;
- аппроксимацию компонент скорости и давления соответственно квадратичным и линейным базисным функциям;
- вариационную формулировку уравнений конечных элементов по методу Галеркина и их решение фронтальным методом [78, 82].

Разработанная в работе [101] методика расчета параметров температурного поля расплава, основанная на методе конечных элементов, позволяет запомнить и хранить температурные поля для различных стадий процесса выращивания. Температурные распределения вдоль оси и кромки кристалла представлены в виде полиномов 6–8-ой степени, которые используются для расчета дефектообразования. Следует отметить, что полиномы 6–8 степеней, как правило, очень чувствительны к небольшим случайным изменениям входных величин. Это является недостатком предложенного подхода. Кроме того,

указанные работы не предполагают решение задач виртуального мониторинга температурного поля в реальном времени.

Недостатками МКЭ, ограничивающими его применение непосредственно в процессе выращивания монокристаллических слитков, являются: сложность реконфигурации расчетной сетки по мере роста слитка и уменьшения уровня расплава, и, соответственно, сложность задания граничных условий, что накладывает определённые ограничения с точки зрения квалификации персонала, обслуживающего установку, и влечёт значительные вычислительные затраты. Поэтому, наиболее приемлемым численным методом для расчета температурного поля мы считаем метод конечных разностей (МКР). Однако МКР реализуется итеративным путем, с минимизацией разности между текущим решением и решением на предыдущей итерации. Не имея гарантий быстрой сходимости алгоритма, с учетом специфики решаемой задачи целесообразно рассмотреть применение нейронной сети для решения задачи теплового расчета в расплаве. При этом следует рассмотреть вклад в теплоперенос различных явлений, а именно – теплопроводности, естественной и вынужденной конвекции в расплаве.

Известно, что распространение локализованных градиентов температуры и скорости через слой жидкости определяется уравнением тепловой диффузии. Для процесса распространения температуры "коэффициентом диффузии" является температуропроводность: $\chi = \lambda / \rho C$, где λ – коэффициент теплопроводности, ρ – плотность жидкости, C – удельная теплоемкость жидкости [183].

Коэффициентом диффузии для распространения количества движения (вихря, градиента скорости) является кинематическая вязкость: $\nu = \eta / \rho$, где η – коэффициент динамической вязкости. Эти коэффициенты диффузии позволяют определить порядок величин характеристического времени релаксации градиентов в слое глубины d : $\tau_t = d^2 / \chi$, $\tau_v = d^2 / \nu$. Отношение этих двух времен является числом Прандтля, которое «контролирует» развитие во времени этих двух типов градиентов [183]: $Pr = \tau_t / \tau_v = \nu / \chi$.

Отсюда видно, что при малых числах Прандтля (для расплавов полу-

проводников оно составляет порядка 0,01) градиент температуры распространяется гораздо быстрее, чем градиент скорости. Именно поэтому в работе [183] отмечено, что теплопроводность расплава играет ведущую роль в формировании температурного поля расплава. Кроме того, в монографии [183] указывается на тот факт, что расплавленные металлы и полупроводники обладают малыми числами Пекле, а это, несмотря на многообразие форм движения в жидкости, приводит к тому, что перенос тепла теплопроводностью играет решающую роль. В частности, такое положение создается при числах Тейлора, превышающих некоторое критическое значение $Ta_{кр} = 0,68 \cdot Ra^{1.28}$, где Ra – число Релея, характеризующее конвекцию в расплаве. В работах, посвященных экспериментальному исследованию температурного поля в расплаве кремния, приведены оценки числа Релея [94, 95, 183]. В соответствии с этими данными Ra изменяется в диапазоне $6,72 \cdot 10^{-4} \dots 0,185 \cdot 10^{-4}$. Для чисел Тейлора соответственно получим $Ta = 0,893 \cdot 10^7$ при $Ta_{кр} = 0,1027 \cdot 10^7$, $Ta = 0,75 \cdot 10^5$ при $Ta_{кр} = 0,1034 \cdot 10^5$.

Приведенные значения чисел Ra , Ta и $Ta_{кр}$ свидетельствуют о том, что перенос тепла в расплаве при выращивании монокристаллов методом Чохральского при реальных значениях скоростей вращения тигля и затравки осуществляется в основном теплопроводностью, а в меньшей степени – за счет конвекции. В таком случае расчет температурного поля расплава можно проводить, при помощи нейронной сети рекуррентного типа, способной воспроизводить пульсации температуры из-за вынужденной и естественной конвекции.

Таким образом, задачу разработки модели расчета температурного поля расплава будем решать как задачу разработки нейронной сети. Это позволяет получить адекватные целям мониторинга результаты расчета температуры расплава в реальном времени процесса выращивания. Модель должна обладать следующими свойствами:

- позволять найти решение на грубой расчетной сетке и в то же время получить достаточно полную картину температурного поля в зоне фронта кристаллизации, которая может быть интерпретирована в СППР для корректи-

ровки режима выращивания;

- учесть влияние таких факторов, как температура основного и фонового нагревателя, скорость вытягивания, текущий уровень расплава в тигле.

Поставленная задача может быть решена путём разработки и применения многоблочной нейросетевой модели [187].

Достоинства нейронных сетей делают их удобным инструментом для моделирования сложных многопараметрических нелинейных физических процессов. Однако получение с помощью НС достаточно густой сетки решений наталкивается на трудности, связанные с тем, что увеличение количества нейронов выходного слоя увеличивает время обучения и переобучения НС. Поэтому в данной работе предлагается использовать обученную нейронную сеть для получения решений в нескольких контрольных точках, после чего проводить расчет температурного поля методом конечных разностей на грубой сетке для получения полей распределения температур. При этом выходы нейронной сети могут интерпретироваться как точки с известной температурой в расчетной сетке.

Согласно проведенным предварительным исследованиям, к факторам, влияющим на температурное поле в расплаве, относятся: температура основного и фонового нагревателей, уровень расплава в тигле, скорость вытягивания.

При разработке нейросетевой модели необходимо решить задачу выбора пространственной структуры нейронной сети для расчёта значений температуры в заданных точках. Требуется выбрать точки, наилучшим образом отражающие температурный режим в интересующей нас области расплава. Часть этих точек являются входами НС, а часть – выходами. Перечислим эти точки:

1. Контрольная точка в расплаве под слоем герметизатора – точка, в которой производится измерение температуры при помощи термопары (один из входов НС). Мгновенное значение температуры в данной точке непрерывно изменяется в ходе вытягивания под действием конвективных составляющих теплопереноса, что позволяет нейронной сети реагировать на динамику изменения температуры расплава в реальном времени.

2. Точка, принадлежащая фоновому нагревателю, температура которого вычисляется при помощи специально разработанной математической модели (один из входов НС).

3. Точки на оси симметрии системы тигель-расплав (выходы НС).

4. Точки в расплаве на радиусе тигля, совпадающие с расчетной сеткой аппроксимации (входы и выходы отдельных блоков НС).

Определение контрольных точек позволяет перейти к выбору структуры нейронной сети. Практические исследования в области нейросетевого моделирования показали, что нелинейные задачи, к числу которых принадлежит и задача расчета температуры в расплаве, обычно достаточно хорошо аппроксимируются нейросетями с одним скрытым слоем [134]. Предлагаемая нейронная сеть имеет блочную структуру. Состав одного блока показан на рис. 3.1.

Блок состоит из четырех модулей. Для первого и второго модулей i – индекс по радиусу (индексация идет от периферии к центру оси симметрии), j – индекс по оси z (индексация идёт снизу вверх), k – индекс по времени.

Первый модуль – F_1 – суммирует текущее и два предыдущих значения температуры расплава слоя j радиуса i и текущие значения с нижнего прилежащего слоя $j-1$ и с верхнего прилежащего слоя $j+1$ того же радиуса. Вторым модулем – F_2 – суммирует два предыдущих значения температуры слоя j радиуса $i+1$, осуществляя рекуррентную часть вычислений. Таким образом, первые два модуля осуществляют временную и пространственную увязку рассчитываемых значений температуры.

Третий модуль – F_3 – реализован в виде регрессионного уравнения и вычисляет температуру фонового нагревателя, которая во многом определяет параметры температурного поля в подкристалльной области расплава. Входами модуля являются температура основного нагревателя $T_{\text{ОНК}}$, потребляемая мощность фонового нагревателя $P_{\text{ФН}}$, скорость вытягивания $V_{\text{вк}}$ и относительный уровень расплава в тигле $h_{\text{рк}}$, влияющий на характер гидродинамики расплава. Синтез регрессионной модели описан в подразделе 3.4.

Четвертый модуль – F_4 – суммирует выходы первых трех модулей и вычисляет значение температуры в точке $T_{i+1,j,k}$.

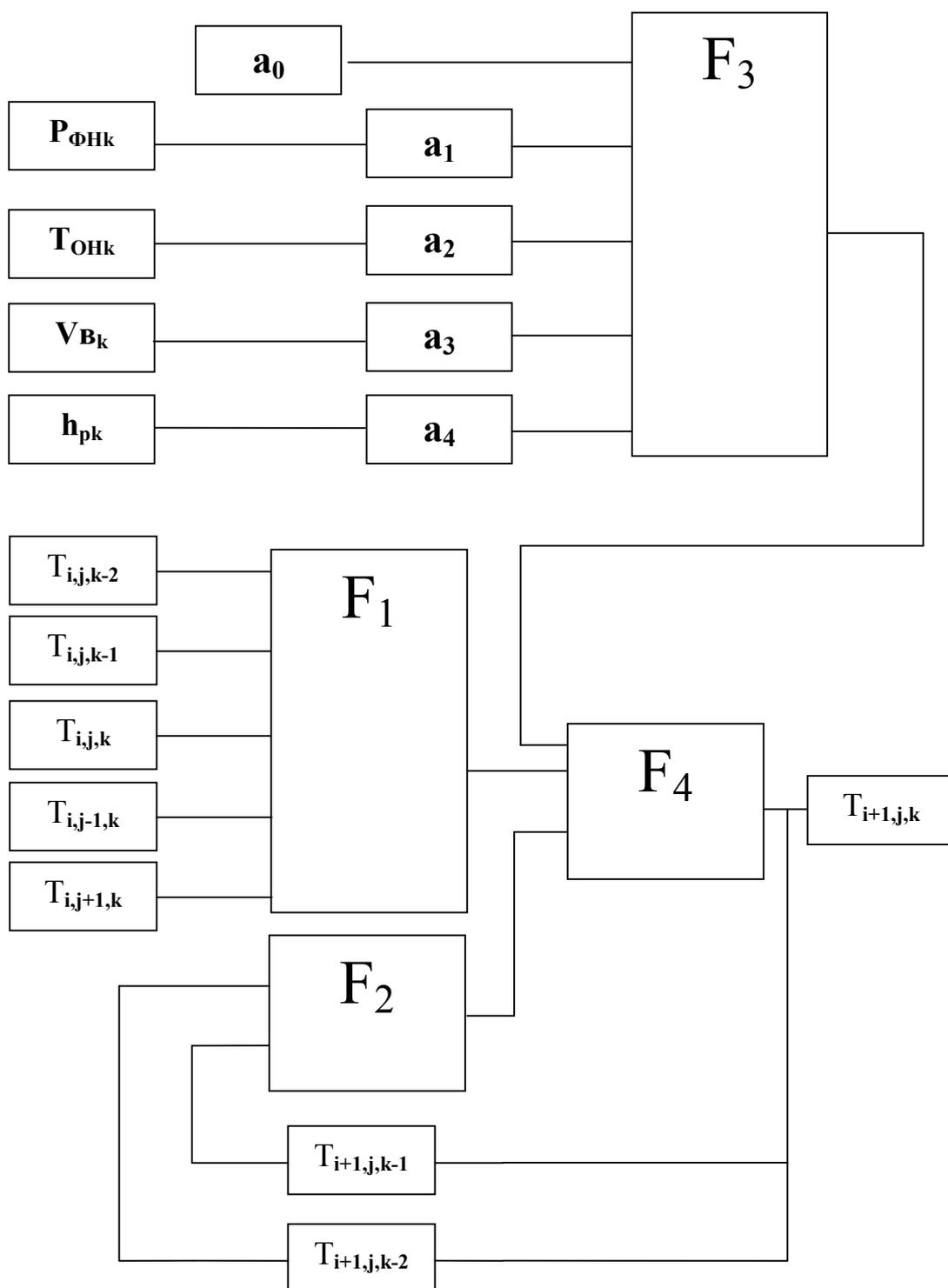


Рисунок 3.1 – Структура одного блока нейронной сети.

С учетом введённых обозначений модель нейронной сети выразим следующим образом:

$$M_{NN} = \langle F_1, F_2, F_3, F_4 \rangle, \quad (3.1)$$

где $F_1 = f_1(T_{i,k}, T_{i,k-1}, T_{i,k-2}); \quad (3.2)$

$$F_2 = f_2(T_{i+1,k-1}, T_{i+1,k-2}); \quad (3.3)$$

$$F_3 = f_3(T_{\text{ОНк}}, P_{\text{ФНк}}, V_{\text{вк}}, h_{\text{рк}}) \quad (3.4)$$

$$F_4 = f_4(F_1, F_2, F_3). \quad (3.5)$$

Для получения целостной картины распределения температур в расплаве несколько вышеописанных блоков "расположены" в осевом и радиальном направлениях. Количество «слоев» сети в осевом направлении ограничено таким образом, чтобы конфигурацию сети не нужно было изменять при понижении уровня расплава до 20%. При меньших уровнях расплава мониторинг температурного поля не актуален.

Передаточные функции нейронов во всех модулях НС – сигмоидальные, со сдвигом по оси ординат:

$$Y = \frac{2}{1 + e^{-s}} - 1.0.$$

Обучение сети проводилось на примерах, полученных в результате численного расчета сопряженной задачи тепломассопереноса методом конечных разностей по схеме, аналогичной приведенной в работе [81]. Каждый пример содержал последовательность нормированных значений температур, включающую 12 точек во временном окне. При этом граничные условия и геометрия теплового узла соответствовали реальным данным, полученным в ходе предварительных экспериментов на установке «Арсенид-1». Для увеличения количества обучающих примеров использовалось аддитивное наложение случайной составляющей с нормальным распределением на примеры, полученные указанным выше способом.

Размер обучающей выборки составлял 250 примеров – «снимков» температурного поля расплава при различных значениях скорости вытягивания температуры нагревателей и уровня расплава. Корректировка весо-

вых коэффициентов каждого блока сети производилась стандартным методом Backpropagation с учётом расположения блока в расчетной сетке. Модуль 3 в обучении не участвует.

Обучение на каждом примере велось до получения значения ошибки меньшего либо равного заданному, но не более 5-ти итераций, после чего обучение продолжалось на следующем примере. После прохождения обучения на всех примерах, вычислялась интегральная ошибка, как сумма квадратов ошибок по всей обучающей выборке. При значении контрольной ошибки большей заданного значения обучение повторялось по той же схеме до тех пор, пока не было получено приемлемое значение суммарной квадратичной ошибки. Тестовый набор содержал 200 примеров, которые не предъявлялись сети во время обучения.

Расчет параметров температурного поля с применением разработанной модели (3.1) – (3.5) включает следующие этапы:

1. Вычисление граничных условий на границе расчетной сетки, а именно:
 - аппроксимация распределения температуры на стенке тигля;
 - вычисление температуры фонового нагревателя при помощи специальной математической модели (см. подраздел 3.4) с учетом потребляемой нагревателем мощности, скорости подъема затравки, температуры основного нагревателя и уровня расплава в тигле;
 - аппроксимация температуры на поверхности герметизатора с учетом стадии роста монокристалла;

2. Вычисление значений температуры в контрольных точках расплава с помощью предложенной нейросетевой модели и сохранение результатов расчета, как «точек с известной температурой» в расчетной сетке наряду с температурой в контрольной точке расплава, полученной при помощи измерения термопарой.

3. Вычисление значений температуры расплава в промежуточных узлах расчетной сетки методом конечных разностей с использованием значений температур в контрольных точках, полученных на предыдущем шаге и сохра-

нение результатов в базе данных подсистемы мониторинга.

4. Вычисление осевых и радиальных градиентов температуры в зоне фронта кристаллизации и сохранение результатов в базе данных подсистемы мониторинга.

На рис. 3.2 показано изменение температуры в одной из контрольных точек в расплаве на протяжении времени выращивания цилиндрической части слитка. Для удобства масштабирования по оси абсцисс отложено отношение массы выращенной части слитка к массе загрузки.

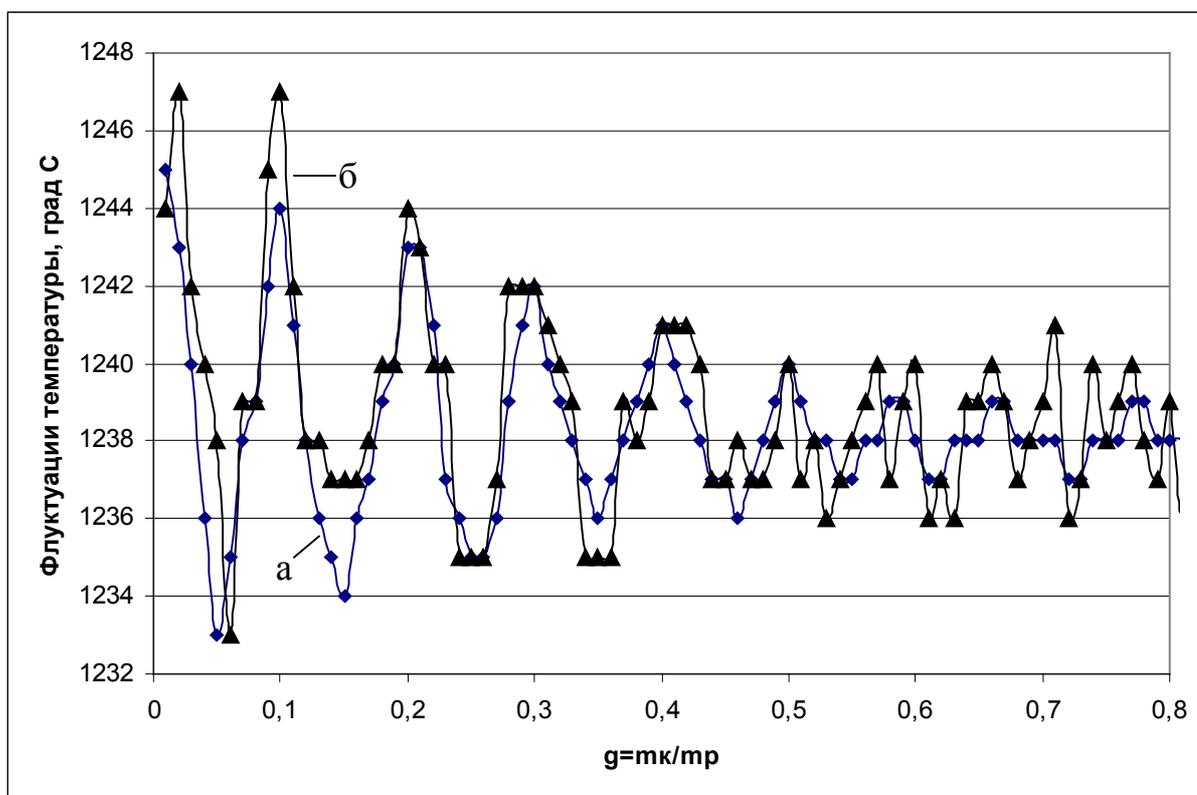


Рисунок 3.2 – Температурные флуктуации, зафиксированные термопарой (а) и рассчитанные нейросетевой моделью (б)

Сравнение результатов измерений прямым методом (термопара) (кривая а) и косвенным методом (нейронная сеть) (кривая б) показывает, что разработанная модель может использоваться в качестве виртуального датчика температуры в расплаве.

На рис. 3.3 показано полученное в ходе экспериментов с предложенной моделью отображение изотерм в расплаве. Картина распределения температур

хорошо согласуется с результатами измерений и расчетов, опубликованными в работах [87, 89].

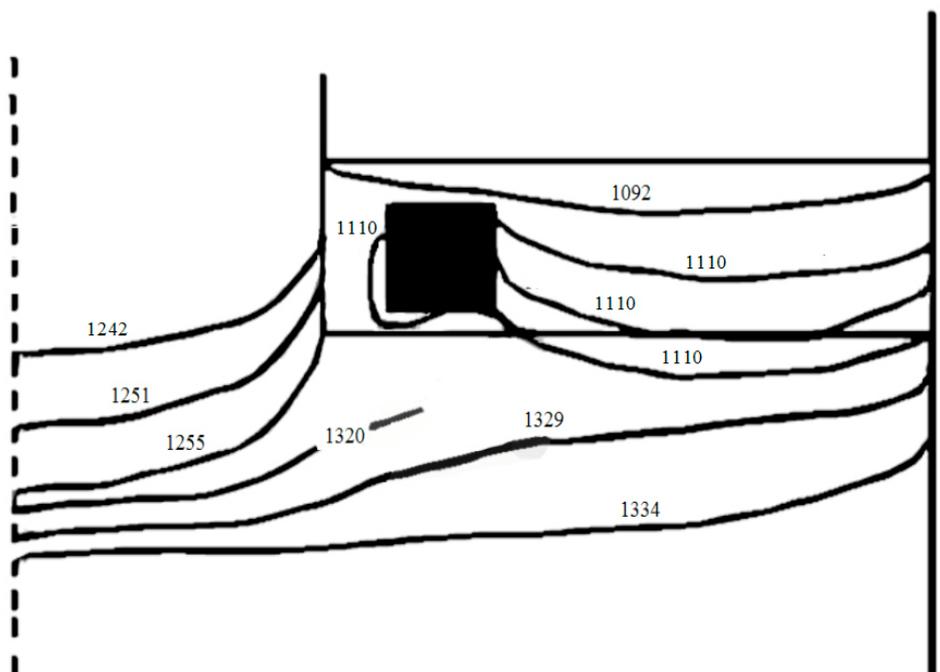


Рисунок 3.3 – Результаты вычисления температурного поля представленные в виде изотерм, °С.

Разработанная нейросетевая модель, позволяет учесть конвективные тепловые потоки, скорость вытягивания, стадию процесса вытягивания и является одним из базовых элементов в комплексе моделей подсистемы мониторинга температурного поля в процессе выращивания. Однако, расчет температурного поля в расплаве не может осуществляться в отрыве от расчета температурного поля в слитке, поскольку и расплав и слиток являются элементами единой тепловой системы. Для расчета температурного поля в слитке была разработана специальная численно-аналитическая расчетная модель.

3.2. Численно-аналитическая модель расчета температурного поля в слитке как элемент информационной технологии мониторинга температурных полей

Расчет температурного поля в слитке в процессе выращивания необходим для косвенного измерения параметров температурного поля. Традицион-

ный подход к решению задачи расчета температурного поля в слитке – это решение системы дифференциальных уравнений в частных производных методом конечных разностей или методом конечных элементов [81-85]. При постановке задачи мониторинга температурных полей в процессе выращивания монокристаллов необходимо учитывать, что все расчеты происходят циклически в реальном времени протекания процесса выращивания, а используемые в заводских условиях вычислительные ресурсы ограничены. Поэтому желательно использовать грубые сетки и минимальное количество итераций. В работе [189] нами предложена нейросетевая модель для расчета температурного поля в слитке. Эксперименты показали, что модель позволяет получить результаты, сравнимые по точности с результатами численного моделирования. Однако недостатком модели является необходимость изменения её структуры по мере изменения длины слитка. В данном подразделе разработана численно-аналитическая модель решения задачи расчета температуры по оси слитка и на его поверхности с применением аналитического выражения для расчета коэффициента теплопроводности.

Задача расчета температуры в слитке состоит в решении стационарного уравнения теплопроводности Фурье-Кирхгофа [186]:

$$\frac{dT}{d\tau} = a \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + \frac{q_V}{c\rho} \quad (3.6)$$

где $a = \lambda / c\rho$, м²/с – коэффициент температуропроводности, который характеризует скорость распространения тепла в теле.

Задача решается методом конечных разностей (МКР), основанном на замене истинных значений производных, входящих в дифференциальное уравнение, приближёнными значениями в узлах сетки [80, 81]. Конечно-разностный подход является наиболее эффективным при решении квазистационарных задач. Простота записи конечно-разностных выражений и отсутствие необходимости построения конечно-элементных сеток делают МКР весьма популярным. Расчетная схема построена с

помощью метода переменных направлений [81], который, по-видимому, является лучшим из разностных методов для решения двумерных задач теплопроводности. Он позволяет значительно сократить объем вычислений и получить вполне адекватные результаты при счете даже на сравнительно грубых сетках.

Для уточнения решения задачи предлагается метод прямой подстановки нелинейной зависимости коэффициента теплопроводности от температуры. Суть этого приема заключается в следующем. Пусть известно исходное решение задачи и оно имеет вид: $T = q_0 f(x, \alpha, \varepsilon, \lambda)$, где T – искомое температурное поле какого-либо объекта; q_0 – плотность мощности падающего на этот объект излучения; $f(x, \alpha, \varepsilon, \lambda)$ – некоторая функция, выражающая пространственную (по x) зависимость величины T и ее связь с результирующим коэффициентом теплообмена (α) с внешней средой, с поглощательной способностью объекта ε и с коэффициентом теплопроводности λ . Если теплофизическое свойство объекта нелинейное, то в функцию $f(x, \alpha, \varepsilon, \lambda)$ прямо вводятся известные зависимости $\alpha(T)$ и $\lambda(T)$, где T принимается за искомую температуру. В итоге для величины T получается алгебраическое уравнение, которое сразу решается в явном виде: $T = q_0 f(x, \varepsilon, \alpha(T), \lambda(T))$. Для решения этой задачи в нелинейной постановке используется кусочно-линейная функция:

$$\lambda(T) = \begin{cases} \lambda(1 + K_1 T), & T < T_1; \\ \lambda(1 + T_1(K_1 - K_2) + K_2 T), & T_1 < T < T_2; \\ \lambda(1 + T_1(K_1 - K_2) + T_2(K_2 - K_3) + K_3 T), & T > T_2, \end{cases} \quad (3.7)$$

где λ – теплопроводность при значении температуры $T = T_{нач}$; T_1, T_2 – уровни сопряжения отрезков прямых; K_j – локальный линейный коэффициент зависимости теплофизических свойств от температуры ($j = 1...3$).

Расчетная сетка размерности 2D является прямоугольной, с постоянным шагом 5 мм. Размер сетки изменяется по высоте по мере увеличения длины слитка. Расчет температуры по выражению (3.7) ведется во вложенном цикле от уровня $z=0$ до верхней границы слитка.

Замыкает решение тепловой задачи расчет тепловых потоков излучения и конвекции между поверхностями слитка, экрана, тигля и герметизатора с проверкой условия баланса входящих и исходящих тепловых потоков на каждой элементарной площадке слитка:

$$q_{ic} = q_{iэ} + q_{it} + q_{it} + q_{конв} . \quad (3.8)$$

Если невязка превышает заданную константу, происходит коррекция значений температур боковой поверхности экрана по формуле:

$$T_{iэ} = T_{iэ} + a\eta, \quad (3.9)$$

где η – нормированное значение невязки; a – масштабный коэффициент, значение которого подобрано экспериментально.

Таким образом, выражения (3.6)–(3.9) составляют разработанную численно-аналитическую модель расчета температурного поля в слитке [189, 207]. Полная схема теплового расчета в тепловом узле, включающая математические модели лучевого теплообмена, приведена в разделе 4.

Для периодического уточнения значений коэффициента температуропроводности в зоне фронта кристаллизации, процесс кристаллизации моделируется специально разработанным методом на базе нечеткого клеточного автомата.

3.3. Разработка метода моделирования процесса кристаллизации на базе нечеткого клеточного автомата

В период отладки подсистемы мониторинга температурных полей в качестве имитационной модели процесса кристаллизации использовалась специально разработанная модель на базе нечеткого клеточного автомата. Это дало возможность многократно воспроизводить этапы процесса выращивания в условиях компьютерного эксперимента при различных температурных режимах. Ниже описывается метод моделирования и модель процесса кристал-

лизации на базе нечеткого клеточного автомата [190].

Клеточные автоматы (КА) получают всё большее распространение при моделировании систем и процессов в различных областях естествознания [191- 192]. Не без оснований считается, что именно КА могут сыграть чрезвычайно важную роль в качестве как концептуальных, так и прикладных моделей пространственно распределенных динамических систем. КА активно используются для описания сложных развивающихся систем, в частности для описания формирования микроструктуры материала при кристаллизации. В работе [192] дается достаточно полный обзор существующих моделей процесса кристаллизации и рассматриваются перспективы их использования и развития. В обзоре большое место уделяется стохастическим методам моделирования, в том числе имитационным подходам, использующим технику клеточных автоматов.

«Классический» клеточный автомат – дискретная динамическая система, представляющая собой совокупность одинаковых клеток, одинаково соединенных между собой [191]. Все клетки образуют так называемую решетку клеточного автомата. Эти решетки могут быть разных типов и отличаться как по размерности, так и по форме клеток. Каждая клетка – это конечный автомат, состояние которого определяется состояниями соседних клеток и, возможно, её собственным. В известных клеточных автоматах, как в моделях вычислений, не рассматриваются входные и выходные воздействия. В общем случае классические клеточные автоматы обладают следующими свойствами:

- изменения значений всех клеток происходят одновременно после вычисления нового состояния каждой клетки решетки;
- решетка однородна - невозможно различить какие-либо две области решетки по ландшафту;
- взаимодействия локальны, то есть, лишь клетки окрестности (как правило, соседние) способны повлиять на данную клетку;
- множество состояний клетки конечно;
- правила взаимодействия клеток не изменяются во времени.

Уже из перечисленных выше свойств «стандартного» КА видны его недостатки относительно возможностей моделирования специфических процессов кристаллизации, имеющих место в технологическом процессе выращивания монокристаллов по методу Чохральского. Прежде всего, это противоречие между свойством однородности решетки КА и неоднородностью свойств различных зон в области кристаллизации.

Другое противоречие состоит в том, что попытка моделировать динамику процесса кристаллизации на микроуровне приводит к задаче невообразимой размерности. Следовательно, клетка (в дальнейшем – ячейка) автомата должна моделировать свойства некоторого объема конечных размеров. Но если интерпретировать состояние объема как интегральную оценку степени перехода из жидкой фазы в твердую, то число возможных состояний ячейки КА не может быть конечным.

В классической постановке задачи моделирования процесса роста монокристалла используется уравнение Стефана, имеющее как аналитические, так и численные решения [193]. Температурное поле в жидкой и твердой фазах описывается уравнениями теплопроводности с соответствующими теплофизическими характеристиками; кристаллизация происходит на границе раздела фаз, причём априори предполагается существование однозначной достаточно гладкой границы раздела фаз.

При численном решении задачи Стефана применяются две группы методов. Первая группа использует обобщенную или энтальпийную, запись скрытой теплоты кристаллизации (плавления) в самом уравнении [193]. Это приводит к необходимости той или иной аппроксимации нелинейных членов в уравнении или, иными словами, к «размазыванию» скрытой теплоты [193]. Эти методы хорошо приспособлены к нахождению обобщенного решения задачи Стефана, в частности, для двухфазной зоны (для переходного слоя). Вторая группа методов исходит из классической постановки задачи Стефана и приводит к необходимости выделения четкого фронта кристаллизации тем или иным способом [193].

В работах [193 - 195] приведены различные способы аппроксимации нелинейных членов уравнения в обобщенной постановке задачи Стефана. Авторы приходят к выводу, что «размазывание» скрытой теплоты в интервале $(T_{пл} - \Delta T)$ физически равносильно допущению частичной кристаллизации в рассматриваемом объеме расплава, причем доля твердой фазы пропорциональна переохлаждению. Это говорит о том, что степень кристаллизации в рассматриваемом объеме можно рассматривать как нечеткое множество с функцией принадлежности, определённой на отрезке $[0,1]$. Данное утверждение не противоречит «обобщенной постановке задачи» моделирования процесса кристаллизации в терминологии фундаментальной работы [193].

Более простой подход состоит в использовании геометрико-вероятностной модели кристаллизации [198], позволяющей получить явное выражение объемной доли закристаллизовавшегося вещества в зависимости от времени при известной скорости зародышеобразования и скорости роста кристаллов. Этот, в общем случае приближенный подход, удобен, когда необходимо решать сопряженную задачу теплообмена и кинетики объемной кристаллизации в расплаве. Для этого разработан метод моделирования процесса кристаллизации на базе нечеткого клеточного автомата.

Ниже приводится описание этапов метода моделирования процесса кристаллизации.

Этап 1. Установление механизмов влияния различных факторов на процесс роста кристалла. Алгоритм управления выращиванием кристалла формируется при выполнении условий постоянства площади поперечного сечения (S_k) и линейной скорости (V_k) роста кристалла [195]:

$$\frac{dV_k}{dt} = 0, \quad (3.10)$$

$$\frac{dS_k}{dt} = 0, \quad (3.11)$$

и если массоперенос в системе осуществляется только на фронте кристаллизации:

$$\frac{dm_p}{dt} = \frac{dm_k}{dt}, \quad (3.12)$$

где m_p и m_k – массы расплава и кристалла, соответственно.

При условии постоянства формы фронта кристаллизации обеспечение условий (3.10) и (3.11) предполагает выполнение условия постоянства расхода расплава:

$$\frac{d^2 m_p}{dt^2} = \frac{d^2 m_k}{dt^2} = 0. \quad (3.13)$$

Условие (3.13) является необходимым, но не достаточным. В качестве дополнительного требования должно выполняться условие постоянства S_k или V_k . Последнее возможно при постоянстве скорости вытягивания кристалла V_z , диаметра тигля D и конфигурации температурного поля в ростовой системе в области фронта кристаллизации.

При условии постоянства диаметра тигля и скорости вытягивания кристалла управление величиной поперечного сечения слитка или его диаметра может осуществляться изменением конфигурации температурного поля в системе путем изменения температуры расплава или кристалла.

Поэтому при $V_z = const$ и $D = const$ для управления процессом выращивания кристаллов путем корректировки температуры нагревателей необходимо наличие текущей информации об одной из величин [195]:

- аксиальной линейной скорости кристаллизации;
- поперечном сечении или диаметре кристалла;
- убыли расплава.

Из вышеизложенного следует, что в случае вытягивания кристалла с постоянной скоростью при постоянной величине площади поперечного сечения

тигля достаточно иметь информацию и управлять лишь одним из четырех параметров – линейной аксиальной скоростью роста (V_k), величиной сечения кристалла (S_k) или его диаметра (d_s), массовой скоростью кристаллизации ($\frac{dm_k}{dt}$) или массовой скоростью расхода расплава ($\frac{dm_p}{dt}$) – путем соответствующих изменений температуры системы кристалл-расплав.

Таким образом, базовые способы управления процессами кристаллизации из расплава на затравку можно свести к корректировке температуры системы кристалл-расплав по данным измерения следующих параметров:

- диаметра кристалла;
- массы кристалла и массы расплава;
- длины растущего кристалла;
- уровня расплава.

Для определения режимов управления (реальных комбинаций параметров, влияющих друг на друга) в процессе кристаллизации необходимо располагать моделями, связывающими основные параметры процесса (в частности, вариации диаметра кристалла с вариациями скорости роста и температуры расплава вблизи фронта кристаллизации). Так, например, можно изменять диаметр кристалла при постоянной скорости роста по заданному закону либо изменять скорость роста при постоянном диаметре, либо одновременно изменять оба параметра. В этих случаях могут использоваться комбинации базовых методов и методов программного изменения параметров процесса. Отметим также, что в условиях производства возникает необходимость использования нескольких контуров управления и, помимо температуры, корректировать другие параметры процесса, например скорость вытягивания, скорость вращения кристалла и т.д. [195].

Из вышеизложенного следует, что при имитационном моделировании процесса кристаллизации удобно считать, что скорость вытягивания постоянна (что характерно для реального процесса), а управляющей величиной является температура расплава.

Этап 2. Анализ теплового баланса в области фронта кристаллизации. При формировании монокристалла наибольший интерес представляет область теплового поля, непосредственно примыкающая к растущему слитку. Изменение градиента температуры в этой области изменяет соотношение между диаметром выращиваемого слитка, скоростью роста и формой фронта кристаллизации. Общее уравнение теплового баланса с учётом осевой симметрии слитка и расплава записывается в виде [137]:

$$Q_L + Q_q = Q_S + Q_p, \quad (3.14)$$

где Q_L – тепловой поток, поступающий от расплава и нагревателя; Q_q – тепловой поток, обусловленный скрытой теплотой плавления; Q_S – кондуктивный тепловой поток от фронта кристаллизации в слиток; Q_p – тепловой поток от фронта кристаллизации за счет излучения с его поверхности. В модели кристаллизации тепловой баланс учитывается при расчете температурного поля.

Этап 3. Анализ условий роста кристалла на границе раздела фаз. Как известно, идея метода Чохральского заключается в росте кристалла за счет перехода атомов из жидкой фазы вещества в твердую фазу на границе раздела двух фаз. Эту границу в настоящее время принято считать размытой [193].

Скорость изменения суммарного объёма твёрдой фазы определяется скоростью роста отдельных зародышей кристаллов с учётом лимитирующего влияния теплоотвода и диффузии. Для того, чтобы происходила кристаллизация, температура в переходной зоне кристалл-расплав должна быть ниже равновесной температуры плавления $T_{пл}$ на некоторую малую величину ΔT , называемую переохлаждением. Последняя определяет скорость кристаллизации: чем больше ΔT , тем выше скорость кристаллизации. Необходимость снижения температуры на границе раздела кристалл-расплав является следствием того, что «равновесная температура плавления» характеризует равновесие между жидкой и твердой фазами, которое определяется равенством свободных энергий этих фаз. Кристаллизация происходит тогда, когда свободная энергия жидкой фазы выше, чем твердой. Последнее условие удовлетворяется в том

случае, если температура расплава, находящегося в контакте с растущим кристаллом, ниже температуры плавления.

Скорость роста кристалла определяется числом мест на его поверхности для присоединения атомов, поступающих из жидкой фазы, и особенностями переноса на границе раздела. Условия теплопереноса на границе раздела фаз с использованием макропараметров можно записать в виде уравнения [193]:

$$L \frac{dm}{dt} + \lambda_1 \left(\frac{dT}{dz} \right)_1 B_1 = \lambda_2 \left(\frac{dT}{dz} \right)_2 B_2, \quad (3.15)$$

где L – удельная теплота кристаллизации, λ_1, λ_2 – коэффициенты теплопроводности расплава и слитка, B_1, B_2 – коэффициенты, характеризующие особенности процесса и материала, $\frac{dm}{dt}$ – скорость перехода вещества в новое состояние, $\left(\frac{dT}{dz} \right)_1, \left(\frac{dT}{dz} \right)_2$ – градиенты температуры в переходном слое и в твердой фазе.

В работе [193] исследовалась зависимость частоты зародышеобразования $J(\Delta T)$ от степени переохлаждения расплава и предлагается аппроксимировать зависимость $J(\Delta T)$ выражением:

$$J(\Delta T) = A \exp\left(-\frac{B}{\Delta T^2}\right), \quad (3.16)$$

где значения кинетических констант A и B варьируются в широких пределах для различных условий выращивания и видов материалов. Так, значения коэффициента A варьируются от $1 \cdot 10^{-1}$ до $1 \cdot 10^{10}$. Вместе с тем, проведение физических экспериментов, позволяющих определить реальную скорость образования зародышей в зависимости от переохлаждения весьма затруднительно [193].

Сказанное выше дает основания предположить, что в рамках рассматриваемой в данной работе макромоделли рост доли твердой фазы следует соотне-

сти с одним параметром – скоростью кристаллизации, которая в свою очередь зависит от величины переохлаждения.

В настоящей работе кинетика кристаллизации рассматривается в рамках модели послойного роста, т. е. предполагается, что рост новой фазы происходит за счет наращивания последовательных слоев. Формирование каждого слоя идет путем двумерного роста зародышей, причем зародыши нового i -го слоя могут возникать лишь на закристаллизовавшихся участках предыдущего $(i-1)$ -го слоя. Результатом работы предлагаемой модели является послойное формирование твердой фазы монокристалла и исключение затвердевшего слоя из феноменологической модели кристаллизации.

Этап 4. Формулирование правил взаимного влияния ячеек клеточного автомата. Под состоянием ячейки будем понимать степень перехода ячейки из жидкой фазы в твердую. В силу осевой симметрии объекта моделирования для локализации ячеек и определения значений координатных функций выбрана цилиндрическая система координат, в которой модель оперирует радиусом монокристалла R_k , дискретным отсчетом радиальной координаты r_i с шагом Δr , шагом изменения угла $\Delta\alpha$ и дискретным отсчетом z_j по координате z с шагом Δz . Граничные условия задаются в виде функции, зависящей от дискретного отсчета кольцевого участка Δr . На каждом шаге Δr возможно задавать скорость вращения расплава и при необходимости учета влияния примесей менять их концентрацию. Схема автомата показана на рис. 3.4 [190].

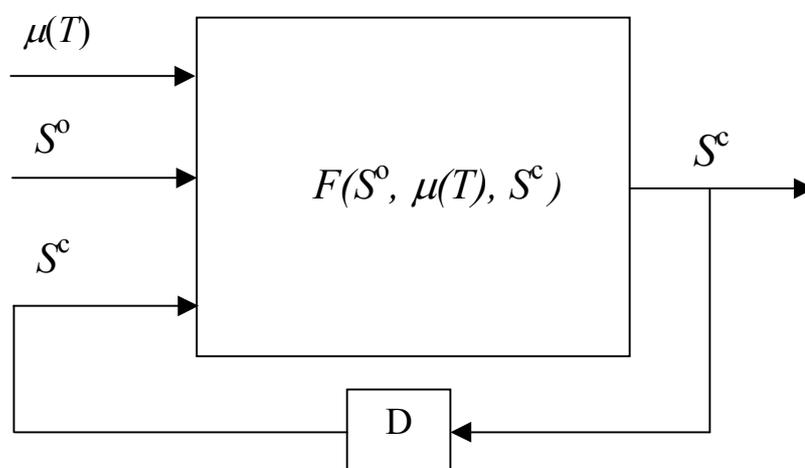


Рисунок 3.4 – Схема нечеткого автомата.

Входной алфавит автомата включает:

а). Нечеткие значения степени переохлаждения ΔT , приведенные (нормированные) к диапазону $[0,1]$. За опорное значение принимается температура плавления $T_{пл}$. Поскольку температура ячейки может быть и выше и ниже температуры плавления, эксперт назначает верхнюю и нижнюю границы температурного диапазона в зоне кристаллизации для данного технологического процесса – T_{max} и T_{min} . Нормирование происходит по соотношению:

$$T_j^H = \frac{T_j - T_j^{min}}{T_j^{max} - T_j^{min}}, \quad (3.17)$$

где T_j^H – нормированное значение температуры; T_j – реальное значение температуры. Нечеткая переменная «Переохлаждение» имеет функцию принадлежности вида:

$$\mu(T) = \begin{cases} 0 & \text{if } T_{яч}^H > T_{пл}^H \\ 1 - \frac{0.5 \cdot T_{яч}^H}{T_{пл}^H} & \text{if } T_{яч}^H \leq T_{пл}^H \end{cases}; \quad (3.18)$$

б). Собственное состояние (степень кристаллизации) ячейки S^c . Нечеткая переменная «Состояние» имеет линейную функцию принадлежности, возрастающую от 0 до 1.

в). Интегральная оценка состояния соседних ячеек S^o , вычисляемая как среднее значение их собственных состояний. Соседними считаются: ячейка, расположенная сверху (предыдущий слой) и четыре ячейки, примыкающие к рассматриваемой в своем слое.

Элемент D осуществляет задержку на один такт расчета, то есть является памятью автомата. На основании сказанного выше модель процесса кристаллизации можно представить как четверку вида:

$$A = \{X, S, S^o, F\}, \quad (3.19)$$

где X – конечное множество входов; S – бесконечное множество состояний; S_0 – начальное состояние; $F = \varphi(S, X)$ - функция переходов.

Сформулируем правила вычисления степени перехода ячейки в твердую фазу. Состояние ячейки в каждый момент времени будет определяться композицией вектора перечисленных входных сигналов, включая задержанное на один такт значение собственного состояния, а именно – вероятность перейти из «жидкого» состояния в «твёрдое» будет увеличиваться: по мере увеличения числа соседей, находящихся в твёрдом состоянии, по мере увеличения переменной «Скорость роста» и по мере увеличения значения функции $f(T)$. Очевидно, что если все соседи клетки находятся в «твёрдом» состоянии, то вероятность для данной клетки перейти в «жидкое» состояние равна нулю и наоборот, если все соседи клетки находятся в «жидком» состоянии, то вероятность клетки перейти в «твёрдое» состояние мала.

Переход автомата из одного состояния в другое описывается функцией переходов. Для описания переходов из каждого состояния во все другие состояния используется t -конорма Лукасевича [25], модифицированная за счет введения весовых коэффициентов [190]:

$$F(S_0, \mu(T), S_c) = \min(a_1 S^0 + a_2 \mu(T) + a_3 S^c, 1), \quad (3.20)$$

где коэффициенты a_1, a_2, a_3 , являются параметрами настройки для учета неоднородности свойств ячеек.

Этап 5. Разработка алгоритма работы автомата. Моделирование процесса кристаллизации начинается от слоя, примыкающего к ФК, и продолжается послойно от слитка в расплав. Для расчета новых состояний одного слоя используется «зеркальный» массив. При расчете первого слоя считается, что расположенный над ним слой полностью затвердел, то есть, состояния ячеек верхнего (нулевого) слоя равны 1. Приведем шаги алгоритма:

Шаг 1. Инициализация автомата. Инициализация заключается в фиксации начальных значений индексов слоя $k=1$ (координата z), индекса угла $i=1$

(угол α), индекса отсчета по радиусу $j=1$. Для ячейки с индексами $i=1, j=1$ устанавливается текущее собственное среднестатистическое состояние $S_{11}^c = 0.5$. Начальные состояния для ячеек, примыкающих к ячейке $[1,1]$, также устанавливаются равными 0.5.

Шаг 2. Расчет новых состояний для ячеек с фиксированным значением индекса i и $j=1..m$, где m – число ячеек вдоль радиуса слитка.

Шаг 3. Инкремент индекса i . Если $i \neq n+1$, где n – число дискретных значений угла α , то переход к п.2. Иначе – переход к п.4.

Шаг 4. Для обработанного слоя вычисляется значение критерия перехода в твердую фазу для всех N ячеек:

$$Q_k = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N_\alpha} \sum_{j=1}^{N_r} S_{ij} \quad , \quad (3.21)$$

где N_α – число дискрет по угловой координате; N_r – число дискрет по радиусу.

Шаг 5. Если выполняется условие $Q_k \geq Q_{\max}$, то слой считается затвердевшим, ему присваивается индекс $k=0$ и слой исключается из списка обрабатываемых. Происходит инкремент индекса k и переход к п.1. Иначе ($Q_k < Q_{\min}$) инкремент индекса k не происходит и выполняется переход к п.1.

Шаг 6. Если поступила команда «Стоп» от координатора, то конец, иначе переход к п.

Для сокращения объема вычислений и с учетом того, что расчет температуры ведется в 2D-сетке, горизонтальная развертка сетки нечеткого автомата происходит в диапазоне $\pm 5\alpha$ с последующим усреднением степени затвердевания.

Этап 6. Установка физических размеров ячеек автомата. В экспериментах высота слоя составляла 0,5 мм; размер вдоль радиуса – 1 мм; угловой размер – $3,6^\circ$. Таким образом, каждый слой при 3D-моделировании может содержать до 10^5 ячеек при заданном диаметре слитка до 200 мм. Количество слоёв колебалось от 10 до 35.

Этап 7. Настройка параметров автомата методом обучения. Для обучения используется следующий метод.

Этап 7.1. Генерируется обучающая выборка. Примеры для выборки формируются следующим образом. Для каждого слоя задан радиус R_k^o в мм. Значение радиуса отражает форму ФК, полученную по численному расчету и заданному значению переохлаждения ΔT . По каждому слою случайным образом отбирается по K_α значений угловых координат α . Для каждой угловой координаты автомат рассчитывает M значений состояний ячеек вдоль радиуса. Таким образом, в каждом примере автомат совершает M вычислений состояния и эффективный радиус R_{ki} , в пределах которого состояние отвердения $S_{ki}^c \geq Q_{\max}$.

Этап 7.2. Формируется вектор настраиваемых параметров, который содержит три весовых коэффициента a_1, a_2, a_3 , по числу входов автомата. Во время обучения значения коэффициентов варьируются в пределах $0,1 \dots 1,0$.

Этап 7.3. Формируется критерий оптимальной настройки. Таким критерием служит функция полной ошибки автомата на всех примерах обучающей выборки:

$$E = \frac{1}{N_o} \sum_{k=1}^{N_z^o} \sum_{i=1}^{N_R^o} (R_k^o - R_{ki})^2, \quad (3.22)$$

где N_z^o – заданное число слоёв; N_R^o – заданное число примеров в слое; R_k^o – заданный радиус слоя; N_o – общее число примеров в обучающей выборке.

Этап 7.4. Для обучения используется адаптивный алгоритм случайного поиска, содержащий следующие шаги:

ШАГ 1. Формирование популяции векторов весовых коэффициентов, содержащей 30 особей. Размер популяции выбирается небольшим, учитывая объём вычислений по каждому примеру.

ШАГ 2. Каждая особь выполняет весь объём вычислений по обучающей выборке и вычисляется значение критерия (3.22).

ШАГ 3. Особи ранжируются в порядке возрастания критерия.

ШАГ 4. Три лучших особи исследуются путем сужения диапазона случайных значений весовых коэффициентов в малой окрестности координат особи. Остальные особи заменяются новыми.

ШАГ 5. Если произошло заданное количество итераций, конец. Иначе переход на ШАГ 2.

На рис. 3.5 показаны результаты моделирования геометрии фронта кристаллизации при помощи нечеткого автомата.

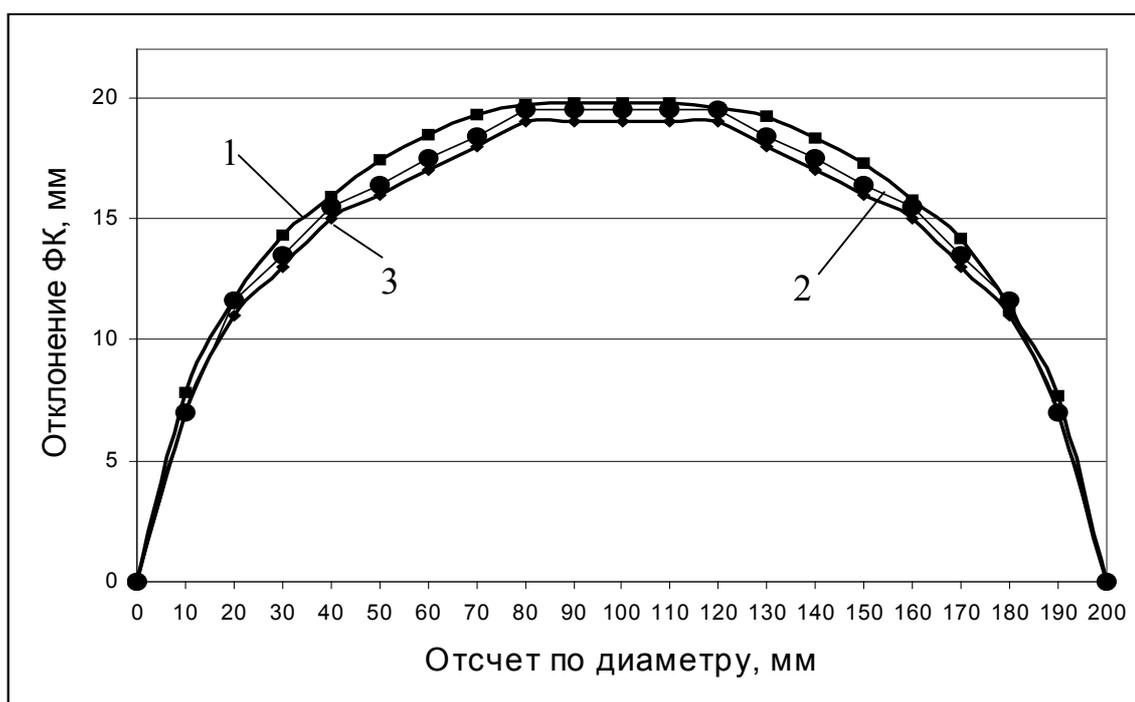


Рисунок 3.5 – Сравнение геометрии фронта кристаллизации:
 1 – численный расчет по МКЭ; 2 – расчет по МКР;
 3 – нечеткий клеточный автомат.

Кривая 1 показывает геометрию ФК, полученную в работе [201] при тех же граничных условиях. Кривая 2 показывает геометрию ФК, полученную по численному расчету методом конечных разностей. Кривая 3 показывает геометрию ФК, полученную в результате работы обученного нечеткого автомата. Видно, что форма ФК имеет аналогичную геометрию, несмотря на другой подход к моделированию. Систематическая погрешность, кривой 3 относительно кривой 2 легко устраняется выбором значения константы Q_{\max} .

Результаты моделирования говорят об адекватности нечеткого автома-

та как инструмента макро моделирования процесса роста монокристалла. При наличии указанного автомата расчет температурного поля выполняется итерационно, с коррекцией коэффициента теплопроводности в зависимости от состояния ячеек автомата.

Таким образом, предложен усовершенствованный метод моделирования процесса кристаллизации за счет применения нечеткого обучаемого клеточного автомата, что дает возможность упростить и ускорить процесс моделирования по сравнению с известными методами.

Впервые предложен метод настройки параметров нечеткого клеточного автомата, позволяющий достичь приемлемой адекватности в отображении динамики моделируемых процессов в различных зонах физической среды.

Поскольку в расплаве арсенида галлия имеется дополнительный (фоновый) нагреватель, его температура должна быть учтена в тепловых расчетах. Разработке модели расчета температуры фонового нагревателя посвящен подраздел 3.4.

3.4. Разработка модели расчета температуры фонового нагревателя как виртуального датчика в составе подсистемы мониторинга

Одним из важных параметров процесса выращивания по LEC-технологии является температура фонового нагревателя (ФН), которая во многом определяет температурные градиенты в зоне кристаллизации. Кроме того, постоянный контроль температуры фонового нагревателя представляет отдельную проблему, связанную с необходимостью оптимизации значения его температуры на разных этапах процесса выращивания [202].

Прямое измерение температуры ФН сопряжено с техническими и технологическими трудностями, указанными в предыдущих разделах работы. В существующих серийных ростовых установках мастер-технолог вынужден оценивать температуру ФН, ориентируясь на значение потребляемой мощности и свой опыт. Однако на температуру ФН помимо потребляемой мощности

вливают и другие факторы, определяющие тепловые потоки вокруг ФН.

Поскольку условия теплоотдачи от ФН в окружающую среду в процессе выращивания меняются из-за изменения расположения деталей теплового узла, непосредственное вычисление температуры ФН по потребляемой мощности при помощи простой линейной аппроксимации не дает адекватного результата. Методика косвенного измерения температуры ФН и соответствующая математическая модель должны учитывать эти особенности. Наиболее подходящим методом построения адекватной математической модели косвенного измерения температуры ФН следует признать регрессионный метод.

Таким образом, для разработки адекватной математической модели косвенного измерения температуры фонового нагревателя и методики измерения необходимо решить следующие задачи:

1. Выделить факторы, по мнению экспертов влияющие на температуру ФН.
2. Сформировать стратегию и план эксперимента и провести все необходимые опыты.
3. Проверить результаты на воспроизводимость.
4. Определить коэффициенты регрессионного уравнения.
5. Оценить значимость коэффициентов.
6. Проверить адекватность модели.
7. Сформировать методику косвенных измерений температуры ФН.

Прежде всего, определим факторы, влияющие на изменение температуры ФН, и обсудим на качественном уровне влияние и взаимосвязь этих факторов. Эта предварительная работа заметно упрощает дальнейшие действия исследователя.

Главным фактором, несомненно, является потребляемая ФН электрическая мощность, значение которой вычисляется по известному напряжению питания и потребляемому постоянному току.

К другим рассматриваемым факторам относятся температура основного нагревателя (ОН), теплопроводность герметизатора, конвекция в расплаве и в среде над слоем герметизатора, скорости вращения затравки и тигля, уровень

расплава в тигле, скорость вытягивания затравки.

Считаем электрическую мощность ФН независимым фактором, так как потребляемый нагревателем ток и напряжение питания поддерживаются на заданном уровне вне зависимости от других рассматриваемых факторов.

Температура ОН косвенно влияет на температуру ФН, создавая основное тепловое поле. Чем выше температура ОН, тем выше (при прочих равных условиях) температура в зоне расположения ФН, меньше теплоотдача самого ФН и выше его температура. Считаем температуру ОН фактором, который не зависит других, перечисленных выше факторов.

Для расчета температуры ФН нужно также определить факторы, влияющие на теплоотдачу с поверхности герметизатора в окружающую среду. К этим факторам относятся:

- теплопроводность герметизатора (примем её постоянной, так как диапазон температур, в которых производится эксперимент, небольшой);
- теплообмен поверхности герметизатора с окружающей средой за счет излучения;
- конвективный теплообмен поверхности герметизатора с окружающей средой.

Тепловой поток с единицы поверхности герметизатора можно представить в виде трех слагаемых [186]:

$$q_{nzi} = \sigma \varepsilon_i T_i^4 + p_i H_i + \alpha (T_i - T_{cp}), \quad (3.23)$$

где σ – постоянная Больцмана, ε_i – коэффициент излучения с единичной i -й поверхности герметизатора, T_i – температура единичной i -й поверхности герметизатора, p_i – отражательная способность единичной поверхности, H_i – внешний теплоток на единичную поверхность от поверхностей теплового узла и слитка, α – коэффициент конвективной теплоотдачи, T_{cp} – температура среды над герметизатором.

Рассмотрим на качественном уровне изменения составляющих этого теплового потока в течение процесса выращивания. Измерения показали,

что распределение температуры по высоте стенки тигля практически линейно и её максимум наблюдается в области верхней рабочей области, примыкающей к поверхности расплава в начале процесса выращивания. Перегрев по сравнению с температурой кристаллизации составляет $\approx 45^\circ\text{C}$. Для сохранения неизменными тепловых условий на уровне фронта кристаллизации в течении всего процесса вытягивания тигель, по мере опускания уровня расплава, перемещается вверх. Фоновый нагреватель при этом перемещается вглубь тигля, чтобы расстояние между его нижней кромкой и уровнем расплава оставалось неизменным. Однако при этом изменяются условия лучистого теплообмена поверхности герметизатора со стенкой тигля, так как площади слитка и внутренней поверхности тигля, участвующие в теплообмене излучением, увеличиваются. Это приводит к изменению второго слагаемого в выражении (3.23), то есть, к изменению условий теплоотдачи с поверхности герметизатора.

По мере заглубления ФН и герметизатора в тигель величина $T_{\text{ср}}$ растет. Таким образом, конвективный тепловой поток уменьшается, что служит еще одним подтверждением того, что фактор “уровень расплава” является качественно значимым и его влияние следует оценить количественно.

Рассмотрим тепловой эффект, возникающий при увеличении скорости подъема затравки. Увеличение этой скорости приводит к мгновенному возрастанию объемной скорости кристаллизации. Выделяющаяся на фронте кристаллизации скрытая теплота плавления не будет успевать “уходить теплопроводностью” через кристалл. Поэтому она в основном будет рассеиваться в примыкающем столбике расплава, температура в нем повысится, а это повлечет за собой уменьшение теплоотдачи ФН и повышение его температуры.

Вращение затравки и тигля создаёт вынужденную конвекцию в слое герметизатора и дополнительный отток тепла от ФН. Поскольку ФН имеет кольцевую форму, то заметный отток теплоты могут создать только радиальные токи в слое герметизатора. Если учесть, что толщина этого слоя составляет не более 20 мм, а плотность герметизатора мала по сравнению с плотно-

стью расплава, то становится ясно, что радиальные токи незначительны. Тем не менее, влияние скорости вращения затравки и тигля с нашей точки зрения было необходимо исследовать, чтобы априори не ухудшить адекватности модели. Естественная конвекция в слое герметизатора мала из-за его малой глубины и ею можно пренебречь. Следует также учесть, что коэффициент теплопроводности герметизатора (0,02 Вт/смК) в семь раз ниже теплопроводности расплава GaAs (0,14 Вт/смК), что уменьшает кондуктивную тепловую связь между ФН и примыкающим к герметизатору слоем расплава.

Таким образом, можно составить перечень варьируемых факторов, которые следует учесть в модели вычисления температуры ФН: $X1$ – потребляемая мощность ФН; $X2$ – температура ОН; $X3$ – скорость вытягивания; $X4$ – скорость вращения затравки; $X5$ – скорость вращения тигля; $X6$ – уровень расплава.

Статистический анализ, результаты которого приведены в Приложении А, показал, что переменными $X4$ и $X5$ можно пренебречь, так как P -значение (P -value – граничный уровень значимости) для $X4$ и $X5$ больше или равно 0,10 (0,4634 и 0,5273 соответственно). Другими словами, эти факторы не являются статистически значимыми на 90% или более доверительном уровне и их влияние не является закономерным. Дальнейшие исследования велись с переменными $X1$, $X2$, $X3$, $X6$.

Модель расчета температуры фонового нагревателя имеет следующий вид (значения коэффициентов модели округлены) [203] :

$$Y = 765,14 + 0,1436 * X1 + 0,0512 * X2 + 48,913 * X3 - 0,0799 * X6 . \quad (3.24)$$

Подробное описание экспериментов по построению регрессионной модели, проверки её адекватности и методика измерения температуры приведены в Приложении А.

Алгоритм расчета температуры ФН состоит из следующих шагов:

ШАГ 1. Фиксация значений следующих параметров:

- температура основного нагревателя, °С;
- скорость вытягивания, мм/мин;

– уровень расплава, вычисляемый в реальном времени по формуле:

$$h_p = \left(\frac{m_z - m_c}{\rho_p \pi R_m^2} + h_2 \right) \cdot 100\% , \quad (3.25)$$

где m_z – масса загрузки; m_c – измеренная в реальном времени масса выращенного на данный момент слитка; ρ_p – плотность расплава; R_m – радиус тигля; h_2 – высота слоя герметизатора.

– потребляемая мощность ФН, кВт.

ШАГ 2. Расчет температуры ФН по формуле (3.24), где X_1 – потребляемая мощность ФН; X_2 – температура ОН; X_3 – скорость вытягивания; X_6 – уровень расплава.

ШАГ 3. Фиксация расчетного значения температуры ФН в качестве данных косвенного измерения в системе мониторинга.

ШАГ 4. Конец.

Разработанная модель расчета температуры фонового нагревателя, погруженного в расплав, позволяет производить расчет температурного поля расплава, что в свою очередь обеспечивает решение задачи мониторинга температурного поля расплава и, кроме того, позволяет ввести дополнительный контур автоматического регулирования в АСУ ТП процесса выращивания монокристаллов GaAs по LEC-технологии.

Разработка описанных выше моделей – источников информации о температурных полях расплава и слитка, позволяет перейти к разработке информационной технологии мониторинга температурных полей.

3.5. Разработка информационной технологии мониторинга температурных полей в процессе выращивания монокристаллов

Согласно методу разработки информационной технологии, изложенному в подразделе 2.7, определим состав ИТ мониторинга температурных полей.

Состав информационной технологии определен исходя из требований мониторинга одного из наиболее сложных процессов выращивания, а именно выращивания монокристаллов арсенида галлия из под слоя герметизатора. Разработанная информационная технология мониторинга температурного поля в процессе выращивания монокристаллов арсенида галлия включает в себя комплекс математических моделей и методов, в том числе:

- модель аппроксимации закона распределения температуры на стенке тигля (M1);
- модель аппроксимации закона распределения температуры на поверхности герметизатора (M2);
- численно-аналитическая модель расчета температуры в слитке (M3);
- нейросетевая модель, вычисляющая температуру в расплаве (M4);
- модель процесса кристаллизации (M5);
- модель расчета температуры фонового нагревателя (M6);
- метод расчета температурного поля расплава (МРТП);
- метод моделирования процесса кристаллизации (ММПК).

Для реализации методов и моделей в ИТ мониторинга температурных полей необходимо сформировать перечень исходных, первичных, вторичных, промежуточных и конечных данных, необходимых для обеспечения функционирования подсистемы виртуального мониторинга температурных полей, а также данных, интерпретируемых как знания.

1. Исходные данные: масса загрузки, кг; масса герметизатора, кг; масса затравки, кг; заданный диаметр слитка, см; радиус затравки, см; длина затравки, см; скорость вращения затравки, об/мин; скорость вращения тигля, об/мин; диаметр тигля, см; высота тигля, см; внутренний диаметр экрана, см; высота экрана, см; высота слоя герметизатора, см; плотность GaAs (кристалл), г/см³; плотность GaAs, (расплав) г/см³; плотность В₂О₃, г/см³; теплопроводность GaAs (кристалл), Вт/смК; теплопроводность GaAs (расплав), Вт/смК; теплопроводность В₂О₃, Вт/смК; излучательная способность GaAs (кристалл); излучательная способность В₂О₃; температура плавления GaAs, °С; кристал-

логографическое направление плоскости роста монокристалла.

2. Первичные данные: температура основного нагревателя, °С; мощность фонового нагревателя, Вт; скорость перемещения штока затравки, мм/мин; скорость перемещения штока тигля, мм/мин; температура расплава под слоем герметизатора, °С; текущая масса слитка, кг; мощность теплового экрана (при наличии активного экрана), Вт.

3. Вторичные данные: температура фонового нагревателя, °С; уровень расплава в тигле, %; массив значений температуры на поверхности герметизатора, °С; массив значений температуры на поверхности тигля, °С; текущий диаметр слитка, см; текущая длина слитка, см.

4. Промежуточные данные: теплопроводность GaAs в зоне ФК, Вт/смК; степень затвердевания дискретных областей в зоне фронта кристаллизации (ячеек клеточного автомата); температура в заданных точках расплава, °С; температура в заданных точках кристалла, °С; эффективный коэффициент теплоотдачи с поверхности слитка; номер стадии процесса выращивания.

5. Конечные данные: массив распределения температур в расплаве, °С; массив распределения температур в кристалле, °С; форма фронта кристаллизации (график); температурные градиенты в зоне фронта кристаллизации; температурные градиенты в слитке.

6. Данные для базы знаний: массивы весовых коэффициентов нейронной сети, вычисляющей температуру в расплаве.

Мониторинг температурных полей при помощи набора моделей, входящих в состав подсистемы мониторинга, производится по следующему алгоритму:

ШАГ 1. Настройка подсистемы виртуального мониторинга при проведении типового процесса выращивания. При этом база данных подсистемы обновляется скорректированными значениями параметров моделей.

ШАГ 2. Запуск основного цикла мониторинга с отсчетом дискретного времени с заданным интервалом Δt .

На каждом временном интервале циклически выполняются:

ШАГ 2.1. Запрос в БД АСУ ТП и фиксация значений прямо измеряемых и вычисляемых величин (температуры основного и мощности фонового нагревателей, температуры теплового экрана, температуры в точке под поверхностью расплава, скорости вращения тигля и затравки, массы выращенного слитка, диаметра слитка, уровня расплава).

ШАГ 2.2. Расчет температуры фонового нагревателя (М6).

ШАГ 2.3. Расчет граничных условий для численных расчетов температуры на основании прямо измеряемых величин (М1, М2).

ШАГ 2.4. Нейросетевой расчет значений температуры расплава в заданных точках с учетом влияния конвекции в расплаве, скорости вращения тигля и других параметров (М4).

ШАГ 2.5. Моделирование процесса кристаллизации. Коррекция коэффициентов теплопроводности расплава в зоне фронта кристаллизации с учётом наличия двухфазной зоны (М5, ММПК).

ШАГ 2.6. Определение формы и расположения фронта кристаллизации. Вычисление проводится исходя из известной температуры плавления арсенида галлия и отклонений от неё в направлении поверхностей солидуса и ликвидуса. При определении формы фронта кристаллизации каждый из элементарных участков монокристалла и расплава под ним проверяется на выполнение следующего условия:

$$(T_{пл} - \Delta_T) \leq T \leq (T_{пл} + \Delta_T), \quad (3.26)$$

где T – температура элементарного участка; $T_{пл}$ – температура плавления арсенида галлия; Δ_T – заданное максимальное отклонение температуры фронта кристаллизации от температуры плавления. Участки, для которых выполняется условие (3.26) составляют зону фронта кристаллизации.

ШАГ 2.7. Расчёт температуры в заданных точках слитка (М3) с учетом граничных условий, в качестве которых выступают уравнения тепловых потоков излучения с поверхностей слитка, тигля, экрана и герметизатора. При этом учитываются результаты расчетов шагов 2.2–2.5.

ШАГ 2.8. Сохранение измеренных и рассчитанных значений параметров

в базе данных.

ШАГ 2.9. Формирование и вывод результатов мониторинга в табличном формате.

ШАГ 2.10. Фиксация времени протекания процесса, текущей длины и диаметра слитка, уровня расплава и (при необходимости) перестройка расчетной сетки.

ШАГ 2.11. Конец тела основного цикла.

ШАГ 3. Пополнение базы данных подсистемы ППОР сведениями о срывах оптимальных условий выращивания для последующего анализа.

ШАГ 4. Конец.

На рис. 3.6 приведена общая схема информационной технологии мониторинга температурного поля системы кристалл-расплав в технологическом процессе производства монокристаллов арсенида галлия [204].

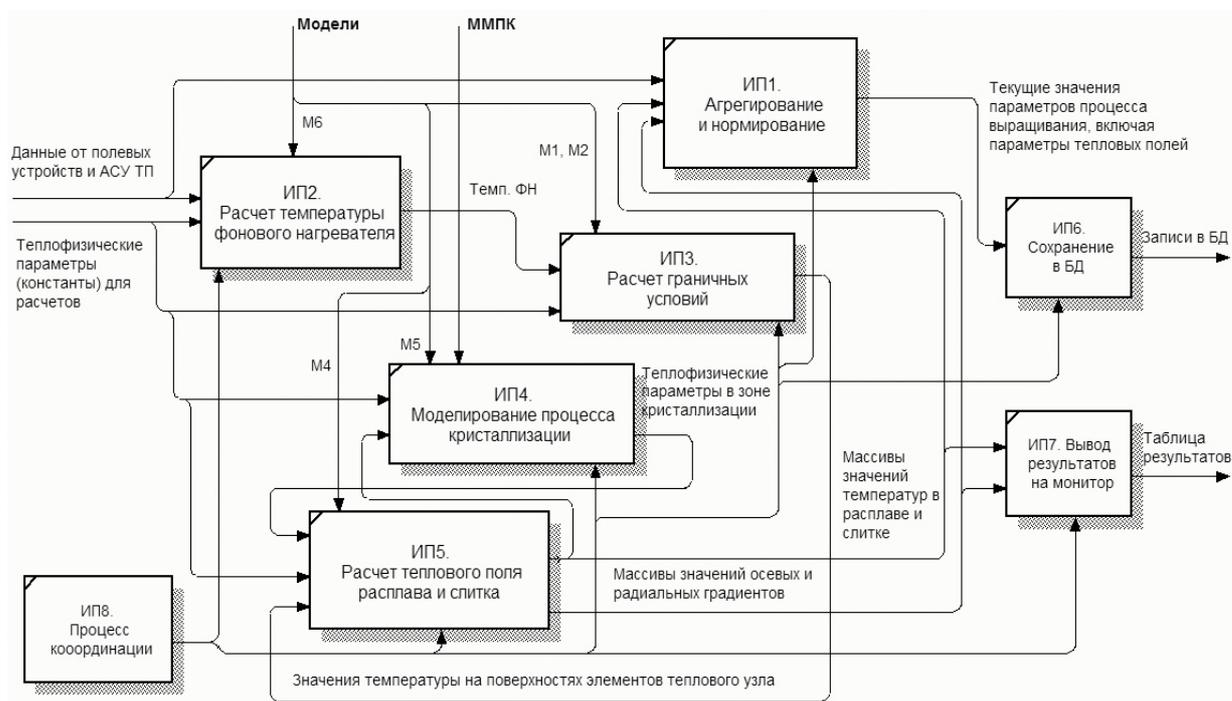


Рисунок 3.6 – Общая схема информационной технологии мониторинга температурного поля системы кристалл-расплав в процессе выращивания монокристаллов арсенида галлия.

Рассмотрим процессы сбора, обработки и передачи информации, показанные на рис. 3.6.

По запросу к БД АСУ ТП в подсистему мониторинга поступают значе-

ния исходных данных и измеренных значений параметров процесса, таких как скорость вращения тигля, скорость вращения затравки, скорость подъема затравки, масса загрузки, масса выращенной части слитка, температура расплава в контрольной точке, температура основного нагревателя, мощность, потребляемая фоновым нагревателем.

ИП1. Полученные от программ-драйверов числовые значения в соответствующих форматах передаются в оперативную память ЭВМ и сохраняются в отдельных массивах базы данных с соответствующим значением дискретного времени t_i .

ИП2. Обработка исходных данных для получения температуры фонового нагревателя. Вычислительная процедура, основанная на математической модели М6, осуществляет следующие операции:

2.1 Прием данных о температуре основного нагревателя, °С (измеряется в реальном времени прямым методом);

2.2 Прием данных о скорости вытягивания (значение задаётся оператором);

2.3 Прием данных для расчета уровня расплава (масса загрузки; измеренная масса выращенного на данный момент слитка; плотность расплава; радиус тигля; высота слоя герметизатора) и вычисление уровня расплава.

2.4 Прием данных о потребляемой мощности ФН, Вт.

2.5 Расчет текущего значения температуры ФН по модели М6. Процесс выполняется по алгоритму, приведенному в п.п 3.4.

ИП3. Обработка исходных данных для определения граничных условий. Процедура расчета граничных условий осуществляет следующие действия:

3.1 Прием данных о температуре ФН от процесса ИП3.

3.2 Прием данных о температуре расплава от термопары, погруженной в расплав.

3.3 Прием данных о температуре основного нагревателя от термопары.

3.4 Вычисление распределения температуры на стенке тигля (М2), на поверхности герметизатора (М2) и экрана (табличная аппроксимация). Коэф-

фициенты моделей и табличные значения распределения температур корректируются для каждой ростовой установки и хранятся в базе данных подсистемы мониторинга.

ИП4. Определение степени затвердевания расплава в подкристалльной области путем моделирования процесса кристаллизации. Процесс выполняется в период наладочных работ.

4.1. При опускании затравки поверхность раздела фаз считается гладкой, соответствующей геометрическим размерам затравки. При этом ячейки клеточного автомата имеют значения степени затвердевания равные нулю для жидкой фазы и единице – для твёрдой.

4.2. После вычисления значений температуры на всей расчётной сетке, пересчитываются значения степеней затвердевания ячеек клеточного автомата. Пересчёт значений осуществляется исходя из предыдущего состояния ячейки, значений переохлаждения в её окрестности и интегральной оценки состояния соседних ячеек. Ячейки клеточного автомата пространственно совпадают с сеткой расчёта температурного поля.

4.3. После пересчёта значений степеней затвердевания ячеек производится пересчёт значений коэффициента теплопроводности арсенида галлия в зоне фронта кристаллизации. Значения коэффициента теплопроводности получают исходя из выражения: $\mu_i = \mu \cdot \lambda_{ТВ} + (1 - \mu) \cdot \lambda_{Ж}$, где μ – степень затвердевания ячейки нечёткого клеточного автомата; $\lambda_{ТВ}$ и $\lambda_{Ж}$ – известные значения коэффициентов теплопроводности твёрдой и жидкой фазы. Пересчёт значений степени затвердевания производится, начиная с верхнего твёрдого слоя, вниз, к расплаву.

4.4. Производится пересчёт температурного поля расплава методом конечных разностей с применением полученных на предыдущей итерации значений коэффициентов теплопроводности ячеек в подкристалльной области.

4.5. Вычисляется разность значений температур, полученных по МКР, на предыдущей и текущей итерациях: $\Delta T_i^t = T_i^t - T_i^{t-1}$.

При незначительном абсолютном значении максимальной разности температур $\left| \Delta T_i^t \right| \leq \varepsilon$ процесс пересчёта заканчивается, в противном случае продолжается до тех пор, пока значения температур от итерации к итерации не перестанут существенно изменяться.

Полученные значения температур используются в качестве «нижних» граничных условий при расчёте температурного поля слитка.

ИП5. Расчет температурного поля расплава и слитка. Данный информационный процесс является иерархическим. Он содержит два вспомогательных процесса **ИП5.1**, **ИП5.2**. Вначале выполняются процессы нижнего уровня – **ИП5.1** и **ИП5.2**.

ИП5.1 Расчет значений температуры расплава в заданных точках с учетом влияния конвекции в расплаве. Эту задачу решает специальная нейронная сеть (модель М4). Рассмотрим данную процедуру подробнее.

Структура элементарного блока нейросетевой модели, предназначенной для определения температурного поля расплава и её пространственная конфигурация описаны в подразделе 3.1. Пространственное расположение элементарных ячеек нейронной сети совпадает с узлами расчётной сетки МКР, но их количество ограничено. Вычисление температуры с помощью нейросетевой модели производится в направлении от поверхности расплава по направлению ко дну тигля. В радиальном направлении расчёт в верхнем слое сети производится от контрольной точки (точки под поверхностью расплава, температура в которой измеряется при помощи термопары в течении всего процесса выращивания) к оси симметрии системы и к боковой поверхности тигля; в последующих слоях – от боковой поверхности тигля по направлению к оси симметрии системы. Таким образом, расчёт начинается с нахождения температуры в точке у поверхности расплава, соответствующей верхнему слою модели, и заканчивается нахождением температуры на оси симметрии системы в точке, соответствующей нижнему слою модели. В предположении осесимметричности системы значения температуры определяется только для радиуса.

Блоки нейронной сети, находящиеся вблизи кварцевого контейнера с

термопарой получают в качестве входных данных измеренную ею температуру.

Вычисление значений температуры проводится в направлении от дна тигля к поверхности герметизатора. Граничные условия для области, примыкающей к тиглю и для поверхности герметизатора, представляют собой граничные условия второго рода.

ИП5.2. Расчёт температуры в заданных точках слитка при помощи численно-аналитической модели МЗ. Для определения температуры в опорных точках слитка с помощью данной модели, необходимо задать граничные условия на поверхностях теплового узла, участвующих в лучевом теплообмене с поверхностью кристалла. К ним относятся поверхности экрана, тигля и герметизатора. Температура экрана задается путем копирования массива значений из результатов расчета на предыдущем временном шаге.

ИП5. Замыкает решение тепловой задачи расчет тепловых потоков излучения и конвекции между поверхностями слитка, экрана, тигля и герметизатора с проверкой невязки. Если невязка превышает заданную константу, происходит коррекция значений температур боковой поверхности экрана по формуле (3.9).

Таким образом, информационные процессы ИП3, ИП4, ИП5 позволяют получить результаты расчета температурных полей расплава и слитка не прибегая при этом к значительным вычислительным затратам.

ИП6. Сохранение измеренных и рассчитанных параметров в базе данных. Данный процесс реализуется стандартными средствами языка программирования.

ИП7. Формирование и вывод результатов мониторинга в табличном формате. Данный процесс также реализуется стандартными средствами языка программирования.

ИП8. Координация выполнения информационных процессов. Для координации выполнения описанных выше информационных процессов используется программа-монитор, которая реализует описанный выше алгоритм мониторинга.

Результаты мониторинга (массивы значений температур и градиентов)

поступают на вход подсистемы «Советчик» – специализированной СППР, которая интерпретирует полученные данные в форме сообщений о текущем состоянии процесса выращивания. Помимо данных о тепловых условиях СППР получает информацию и о других параметрах процесса – стадия выращивания, уровень расплава в тигле, длина выращенной части слитка и др. В базе знаний СППР хранятся правила, учитывающие весь набор признаков, характеризующих состояние процесса. Нечеткий логический вывод позволяет выдать сообщение о текущем состоянии процесса и рекомендацию по выходу из критической или нештатной ситуации.

Выводы по разделу

Разработаны методы, модели и информационная технология, предназначенные для получения максимального объема данных о температурных полях в расплаве и слитке в процессе мониторинга, а именно:

1. Усовершенствована нейросетевая модель для косвенного мониторинга температурного поля, которая, в отличие от известных, учитывает конвективные тепловые потоки, скорость вытягивания, стадию процесса вытягивания, что позволяет повысить точность результатов косвенных измерений параметров температурного поля и создать новую информационную технологию получения важных данных для оценки качества изготавливаемых монокристаллов полупроводников.

2. Усовершенствован метод моделирования процесса кристаллизации путем применения нечеткого клеточного автомата на этапе воспроизведения формы монокристалла, что позволяет упростить вычислительный процесс моделирования по сравнению с известными методами, получать уточненные значения коэффициента теплопроводности в проблемной зоне фронта кристаллизации и осуществлять информационную технологию мониторинга процесса выращивания монокристаллов.

3. Впервые предложен метод настройки параметров нечёткого клеточно-

го автомата, основанный на поиске оптимальных значений коэффициентов во взвешенной t-конорме Лукаевича при помощи адаптивного алгоритма случайного поиска, что позволяет достичь приемлемой точности в отображении динамики моделируемых процессов в различных по свойствам зонах физической среды в сложных технологических процессах, подлежащих мониторингу.

4. Разработана модель расчета температуры фонового нагревателя и методика косвенного измерения температуры фонового нагревателя при различных сочетаниях значений параметров технологического режима. Полученная модель дает возможность контролировать температуру фонового нагревателя в контурах стабилизации АСУ ТП и проводить расчет температурного поля расплава в целях мониторинга.

5. Разработана информационная технология мониторинга температурного поля в процессе выращивания монокристаллов арсенида галлия, включающая комплекс математических моделей и методов, а также набор взаимосвязанных информационных процессов. Информационная технология мониторинга температурных полей позволяет обеспечить необходимыми данными операторов и технологов, осуществляющих контроль качества продукта непосредственно в процессе его изготовления и является одной из необходимых составляющих ИАС УКПВ.

Основные результаты раздела опубликованы в научных трудах автора [187, 188, 189, 190, 203, 204].

РАЗДЕЛ 4.

РАЗРАБОТКА МЕТОДА, МОДЕЛЕЙ И ИНФОРМАЦИОННОЙ ТЕХНОЛОГИИ ПОДДЕРЖКИ ЗАДАЧИ ОПТИМИЗАЦИИ ТЕПЛОВЫХ УСЛОВИЙ ОСТЫВАНИЯ СЛИТКОВ

В четвертом разделе диссертации разработаны модели, методы и информационная технология поддержки решения задачи оптимизации конструктивных параметров тепловых экранов ростовой установки, прямо влияющих на режим остывания выращенной части слитка. Разработанная информационная технология реализована в подсистеме «Экран», которая используется в составе ИАС УКПВ на стадии технологической подготовки производства монокристаллов. Для разработки данной информационной технологии необходимо сделать анализ проблемной области, а именно – физических явлений и процессов, вызывающих образование структурных дефектов в процессе остывания слитка в тепловом узле ростовой камеры.

Одной из проблем, возникающих при обеспечении надлежащего качества монокристаллов, является оптимизация тепловых условий остывания выращенной части слитка в процессе выращивания. Это связано с тем, что при остывании слитка могут возникнуть термические напряжения, обусловленные большими и/или неравномерными градиентами температуры в слитке. Термические напряжения, возникающие в процессе охлаждения слитка, частично снимаются при появлении дислокаций. В свою очередь дислокации вызывают напряжения в выращенном кристалле после его охлаждения. Термические напряжения можно уменьшить подбором параметров теплового узла и условий выращивания, обеспечивающих уменьшение градиентов температуры в слитке в процессе выращивания и охлаждения. Исследования показывают, что особенности экранировки существенно влияют на характер роста (дислокационный, малодислокационный или бездислокационный) и структуру выращиваемого кристалла [97, 103–108].

Поскольку физические эксперименты на серийных ростовых установках затруднены, а разработка и изготовление экспериментальной установки тре-

бует проведения предварительных исследований, актуальной является разработка методов, моделей и информационной технологии оптимизации параметров тепловых экранов, окружающих выращенную часть слитка. Это должно ускорить процесс технологической подготовки производства монокристаллов произвольного диаметра, а, главное – обеспечить оптимальные тепловые условия остывания слитка в процессе выращивания. Такой подход позволяет приблизиться к решению важной задачи – созданию механизма быстрой адаптации ростовой установки к выращиванию монокристаллов GaAs заданного размера с уровнем плотности дислокаций $<10^{-4}$ см⁻².

Решение задачи оптимизации температурных условий необходимо начинать с анализа связи между тепловыми условиями и термическими напряжениями в слитке.

4.1. Анализ связи тепловых условий и термических напряжений в слитке

Вследствие неравномерного распределения температуры по длине и поперечному сечению монокристалла охлаждение его также протекает неравномерно. В результате в нем возникают термические напряжения. Величина их зависит от механических характеристик полупроводника, коэффициента термического расширения и радиального перепада температур. В свою очередь, радиальный перепад температур возрастает с увеличением диаметра монокристалла.

В тот момент, когда термические напряжения в монокристалле, находящемся в той области температур, где его деформация протекает пластически (в общем случае от $0,75 T_{пл}$ до $1,0 T_{пл}$), превзойдут значение критического напряжения образования дислокаций, последние возникнут в монокристалле. Величина критического напряжения образования дислокаций для разных полупроводников различна и возрастает с понижением температуры. Так, при 930°C она составляет для кремния 220, германия 40 и арсенида галлия 110 кгс/мм², а при 830°C – для кремния 330, германия 88 и арсенида галлия 170 кгс/мм² [117].

Таким образом, появление дислокаций в выращиваемом из расплава монокристалле полупроводника происходит под действием возникающих в монокристалле термических напряжений. При этом плотность дислокаций возрастает с увеличением термических напряжений. Так как термические напряжения по объему, а следовательно, и по сечению монокристалла распределяются неравномерно, то и дислокации по сечению монокристалла полупроводника в общем случае распределяются неравномерно.

На некотором удалении от фронта кристаллизации, в области температур, где деформация монокристалла протекает пластически, распределение температур по сечению T_3 монокристалла будет иным. Так как тепло от монокристалла отводится с его поверхности, то периферийные слои будут более холодными, чем центральные [117]. Вследствие этого они будут быстрее сокращать свои линейные размеры и сжимать внутренние слои, в которых появятся сжимающие напряжения. Наоборот, внутренние слои будут препятствовать усадке наружных, и в последних появятся растягивающие напряжения (рис. 4.1).

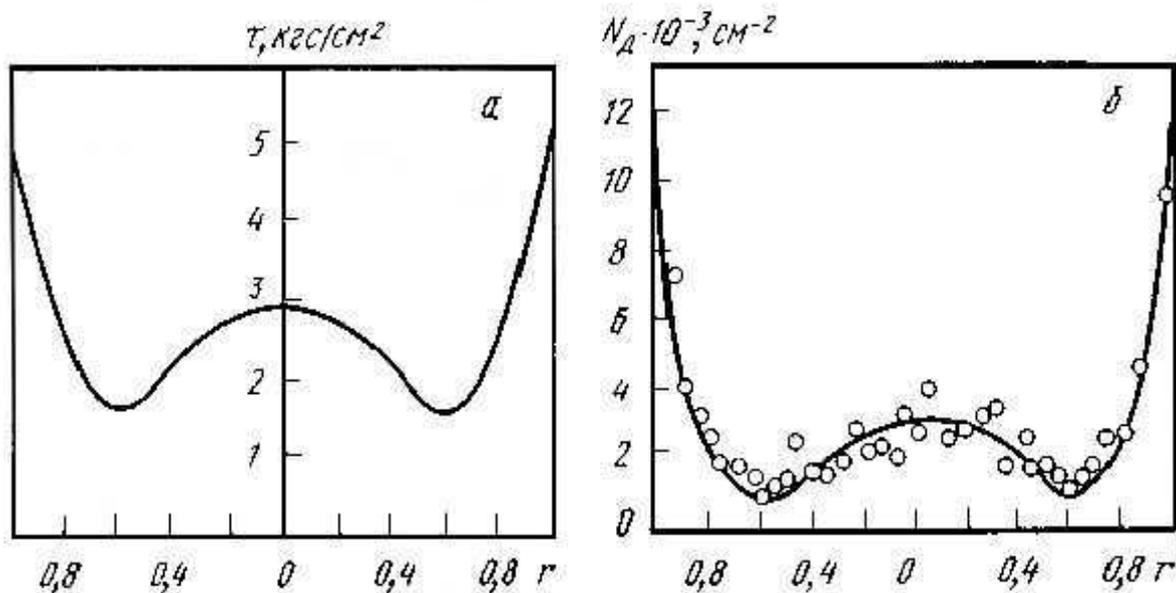


Рисунок 4.1 – Эпюра касательных напряжений τ (а) и распределение плотности дислокаций N_d (б) по сечению монокристалла диаметром $2r$, выращенного методом Чохральского

Таким образом, в самом общем случае термические напряжения в выращиваемом монокристалле максимальны в центре и на периферии его сече-

ния. Между двумя областями с различным знаком напряжений существует область, где напряжения в результате самокомпенсации отсутствуют. Поскольку количество дислокаций возрастает с увеличением напряжений, то распределение дислокаций по сечению монокристалла неравномерно – на периферии и в центре плотность их максимальна [117].

Следует отметить, что неравномерность осевого градиента в выращенной части слитка также отрицательно влияет на плотность дислокаций. Борьба с этим явлением осуществляется путем оптимизации условий остывания – вокруг слитка размещается тепловой экран, размеры и положение которого влияют на режим остывания и, соответственно, на осевой градиент температуры в слитке. Поэтому одной из важных задач является оптимизация режима остывания слитка путем подбора соответствующих тепловых условий.

Задача оптимизации тепловых условий может быть решена путем оптимизации размеров и положения теплового экрана, окружающего остывающий слиток. В силу отсутствия масштабной инвариантности эта задача решается заново для слитка каждого нового типоразмера.

В соответствии с концепцией, изложенной в разделе 2, информационная технология оптимизации параметров теплового экрана должна базироваться на модели и алгоритме расчета температурного поля, модели и алгоритме расчета граничных условий, модели задачи оптимизации, методе и алгоритме её решения. В первую очередь необходимо построить модель, которая аналитически связывает геометрические параметры теплового узла с уравнениями тепловых потоков излучения, циркулирующих между слитком и элементами теплового узла. Такая модель позволяет построить замкнутую схему вычислений тепловых потоков, необходимую для оптимизационных расчетов.

4.2. Разработка математической модели связи между геометрическими параметрами элементов теплового узла и тепловыми потоками излучения

Для автоматизированного расчета оптимальных параметров теплового узла необходимо установить закономерности влияния геометрии теплового эк-

рана (или системы экранов) на распределение температур в рабочей зоне ростовой установки и в слитке. Для установления таких закономерностей требуется найти аналитические зависимости между геометрическими параметрами тепловых экранов и параметрами тепловых потоков в тепловом узле.

Искомая математическая модель должна связывать координаты относительного взаимного расположения поверхностей слитка, экрана, тигля и флюса (герметизатора) с угловыми коэффициентами, определяющими потоки теплового излучения и отражения от слитка и других упомянутых элементов теплового узла.

Из теории теплопередачи известно, что элементарный угловой коэффициент, определяющий долю теплового потока от элементарной площадки dF_1 к элементарной площадке dF_2 равен [186]:

$$\varphi_{dF_1-dF_2} = \frac{\cos\psi_1\cos\psi_2}{\pi r^2} dF_2, \quad (4.1)$$

где ψ_i, ψ_j – углы между нормальными к элементарным площадкам dF_i и dF_j и линией, соединяющей центры площадок, r – расстояние между центрами площадок.

На основании (4.1), переходя к конечным величинам, запишем локальный угловой коэффициент, определяющий долю теплового потока, идущего от элементарной площадки ΔF_1 к поверхности с площадью F_2 :

$$\varphi_{\Delta F_1-F_2} = \sum_{j=1}^{L_2} \frac{\cos\psi_1\cos\psi_j}{\pi r^2} \Delta F_j, \quad j=\overline{1, L_2}, \quad (4.2)$$

где L_2 – число элементарных площадок на поверхности F_2 .

Для рассматриваемого случая теплового взаимодействия цилиндрического слитка и цилиндрического экрана имеем элементарную цилиндрическую площадку на поверхности слитка и элементарную цилиндрическую площадку на внутренней поверхности экрана. Примем высоту данных элементарных

площадок одинаковой и обозначим её $-h$.

Выразим величину локального углового коэффициента между элементарной площадкой слитка и экраном, опираясь на геометрические соображения. На рис. 4.2 схематически показан разрез фрагмента теплового узла, включающего слиток и экран. Радиус экрана в данном варианте модели есть постоянная величина [205].

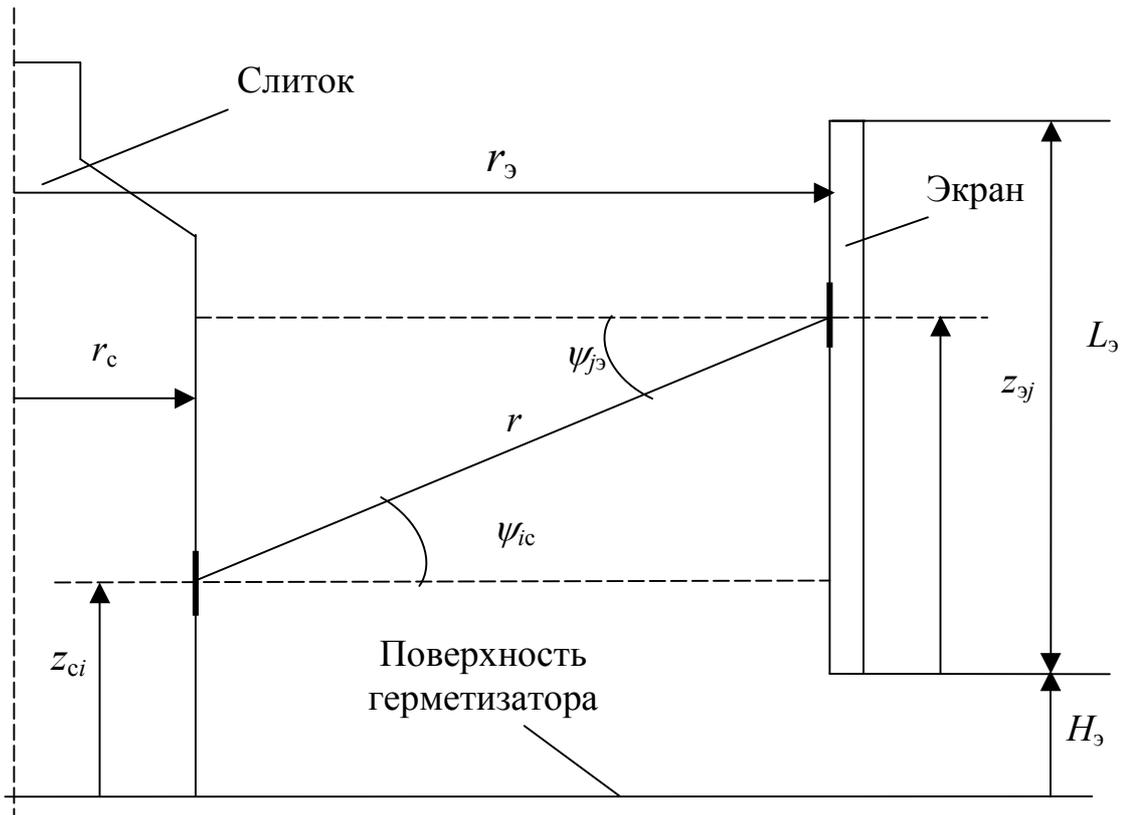


Рисунок 4.2 – Геометрические параметры поверхностей:
 z_{ci} – дискретная осевая координата слитка; $z_{эj}$ – дискретная осевая координата экрана; $H_э$ – высота расположения экрана над расплавом в дискретных единицах; $L_э$ – длина экрана в дискретных единицах.

Осевая координата i -той элементарной площадки слитка обозначена z_{ci} . Нулевым уровнем координаты z_c является поверхность расплава или герметизатора (флюса). Осевая координата j -той элементарной площадки экрана обозначена $z_{эj}$. Нулевым уровнем этой координаты является нижняя кромка экрана, приподнятая над флюсом на высоту $H_э$. Таким образом, в системе отсчета, привязанной к слитку, можно учесть вместе с координатой $z_{эj}$ высоту расположения экрана $H_э$.

Анализируя рис. 4.2, можно отметить, что $\psi_i = \psi_j$, откуда $\text{Cos } \psi_i = \text{Cos } \psi_j$, а кратчайшее расстояние между поверхностью слитка и поверхностью экрана $R = r_3 - r_c$.

Следовательно, длина луча, соединяющего элементарные площадки слитка и экрана, может быть рассчитана, как

$$s_{ij} = \sqrt{(r_3 - r_c)^2 + (z_{3j} + H_3 - z_{ci})^2}. \quad (4.3)$$

Тогда косинусы углов падения-отражения луча можно выразить через величины r_c , r_3 , H_3 :

$$\text{Cos } \psi_i = \text{Cos } \psi_j = \frac{r_3 - r_c}{\sqrt{(r_3 - r_c)^2 + (z_{3j} + H_3 - z_{ci})^2}}. \quad (4.4)$$

Отсюда

$$\varphi_{\Delta F_i - F_3} = \frac{\Delta F_j}{\pi} \sum_{j=1}^{L_3} \frac{(r_3 - r_c)^2}{\left[(r_3 - r_c)^2 + (z_{3j} + H - z_{ci})^2 \right]^{\frac{3}{2}}}, \quad j = \overline{1, L_3}. \quad (4.5)$$

Учитывая, что площадь элементарной поверхности экрана равна $\Delta F_3 = 2\pi r_3 h$, запишем:

$$\varphi_{\Delta F_i - F_3} = 2r_3 h \sum_{j=1}^{L_3} \frac{(r_3 - r_c)^2}{\left[(r_3 - r_c)^2 + (z_{3j} + H - z_{ci})^2 \right]^{\frac{3}{2}}}, \quad j = \overline{1, L_3}. \quad (4.6)$$

Используя аналогичные рассуждения, запишем выражение для локального углового коэффициента между элементарной площадкой экрана и поверхностью слитка:

$$\varphi_{\Delta F_j - F_c} = 2r_c h \sum_{i=1}^{L_c} \frac{(r_3 - r_c)^2}{\left[(r_3 - r_c)^2 + (z_{3j} + H - z_{ci})^2 \right]^{\frac{3}{2}}}, \quad i = \overline{1, L_c}. \quad (4.7)$$

где L_c – количество элементарных площадок на поверхности слитка.

Для пары поверхностей «слиток-тигель» можно записать аналогичные выражения [205]:

$$\varphi_{\Delta F_i - F_T} = 2r_T h \sum_{j=1}^{L_T} \frac{(r_T - r_c)^2}{\left[(r_T - r_c)^2 + (z_{Tj} - z_{ci})^2 \right]^{\frac{3}{2}}}, \quad (4.8)$$

$$j = \overline{1, L_T},$$

$$\varphi_{\Delta F_{jT} - F_c} = 2r_c h \sum_{i=1}^{L_c} \frac{(r_T - r_c)^2}{\left[(r_T - r_c)^2 + (z_{Tj} - z_{ci})^2 \right]^{\frac{3}{2}}}, \quad (4.9)$$

$$i = \overline{1, L_c}.$$

где r_T – радиус тигля, L_T – количество элементарных площадок на поверхности тигля.

Однако, здесь необходимо учесть тот факт, что экран в нижних положениях частично затеняет излучение тигля и при вычислении угловых коэффициентов следует проверять условия:

1) Угол падения луча из точки z_{jT} должен быть меньше, чем угол падения луча из точки $z_{j3} = H_3$, если $z_{jT} > H_3$.

2) Угол падения луча из точки z_{jT} должен быть больше, чем угол падения луча из точки $z_{j3} = H_3$, если $z_{jT} < H_3$.

Обозначив предикат условия прохождения луча от точки на поверхности тигля к точке на поверхности слитка P_{TC} , запишем условия 1) и 2) в виде выражения (4.10):

$$\begin{aligned}
 P_{TC} = & \left(\arccos \frac{r_3 - r_c}{\sqrt{(r_3 - r_c)^2 + z_{jT}^2}} < \arccos \frac{r_3 - r_c}{\sqrt{(r_3 - r_c)^2 + H_3^2}} \right) \cap \\
 & \cap (z_{jT} > H_3) \cup \\
 & \cup \left(\arccos \frac{r_3 - r_c}{\sqrt{(r_3 - r_c)^2 + z_{jT}^2}} > \arccos \frac{r_3 - r_c}{\sqrt{(r_3 - r_c)^2 + H_3^2}} \right) \cap \\
 & \cap (z_{jT} < H_3) .
 \end{aligned} \tag{4.10}$$

Рассмотрим пару поверхностей «слиток-герметизатор». Рис. 4.3 поясняет связь между углами ψ_{ic} , $\psi_{j\phi}$ и координатами рабочих точек на поверхностях.

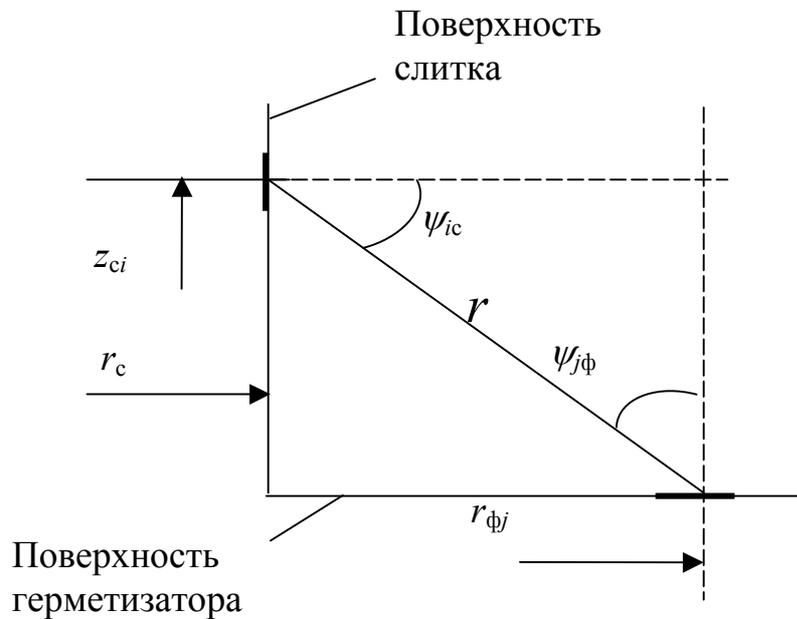


Рисунок 4.3 – Геометрические параметры пары поверхностей «слиток-герметизатор».

Выражения для косинусов данных углов имеют следующий вид:

$$\cos \psi_{ci} = \frac{r_{\phi j} - r_c}{\sqrt{(r_{\phi j} - r_c)^2 + z_{ci}^2}} \tag{4.11}$$

$$\cos \psi_{\phi j} = \frac{z_i}{\sqrt{(r_{\phi j} - r_c)^2 + z_{ci}^2}} . \tag{4.12}$$

Тогда выражения для локальных угловых коэффициентов можно записать следующим образом:

От элементарной поверхности слитка к поверхности герметизатора:

$$\varphi_{\Delta F_i - F_\Phi} = 2d \sum_{j=1}^{L_\Phi} \frac{\Delta F_{\Phi j} z_i (r_{\Phi j} - r_c)}{z_i^2 + (r_{\Phi j} - r_c)^2}, \quad j = \overline{1, L_\Phi}, \quad (4.13)$$

От элементарной поверхности герметизатора к поверхности слитка:

$$\varphi_{\Delta F_{\Phi j} - F_c} = 2r_c h \sum_{j=1}^{L_\Phi} \frac{z_{ci} (r_{\Phi j} - r_c)}{z_{ci}^2 + (r_{\Phi j} - r_c)^2}, \quad j = \overline{1, L_c}, \quad (4.14)$$

где $\Delta F_{\Phi j} = 2\pi r_{\Phi j} d$ – площадь элементарной кольцевой площадки на поверхности флюса, d – принятая ширина площадки.

Здесь также необходимо учесть частичное затенение излучения флюса экраном и при вычислении угловых коэффициентов следует проверять условие: угол падения луча из точки $z_{\Phi j}$ должен быть больше, чем угол падения луча из точки $z_3 = H_3$, то есть

$$P_{\Phi c} = \arctg \frac{z_{ic}}{r_{\Phi j} - r_c} > \arctg \frac{z_{ic} - H_3}{r_3 - r_c}, \quad (4.15)$$

где $P_{\Phi c}$ – предикат условия прохождения луча от точки на поверхности флюса к точке на поверхности слитка.

Отметим, что непрерывные координаты $z_c, z_3, z_T, r_c, r_3, r_T$ связаны с соответствующими дискретными индексированными координатами соотношением $z_{ij} = k_j z_j$, где j – номер конструктивного элемента теплового узла, k_j – шаг дискретизации на данной поверхности.

Если используется экран с переменным радиусом, то математическая модель связи между геометрическими параметрами экрана и тепловыми потоками должна учесть изменение радиуса по координате z [206]. На рис. 4.4 схематиче-

ски показан разрез фрагмента теплового узла, включающего слиток и экран с дискретно изменяющимся радиусом.

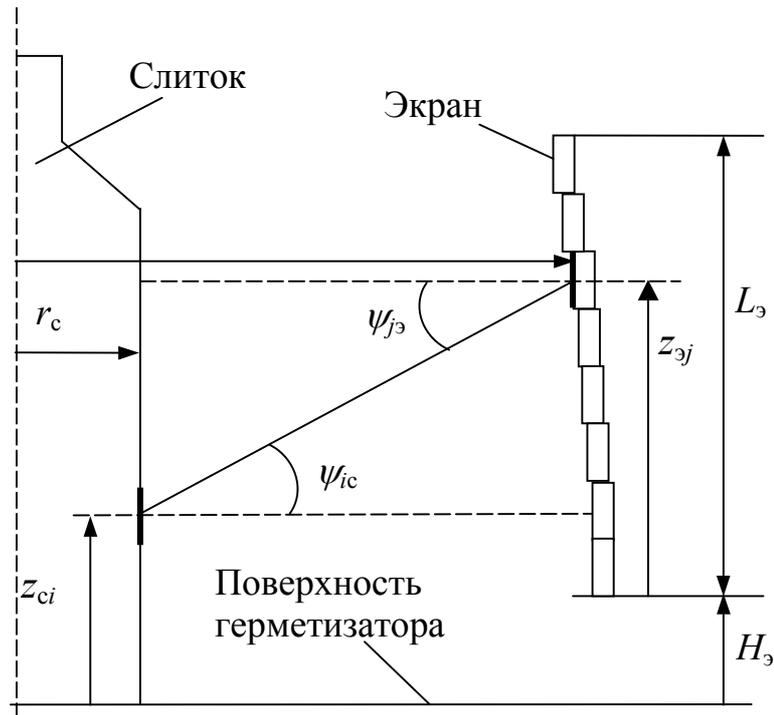


Рисунок 4.4 – Геометрические параметры поверхностей:

z_{ci} - дискретная осевая координата слитка; $z_{эj}$ - дискретная осевая координата экрана; $H_э$ - высота расположения экрана над расплавом в дискретных единицах; $L_э$ - длина экрана в дискретных единицах.

Обозначим $r_{эj}$ - радиус экрана на дискретном уровне с индексом j . Тогда, как и в случае, рассмотренном выше, длина луча s_{ij} , соединяющего элементарные площадки слитка и экрана может быть рассчитана, как

$$s_{ij} = \sqrt{(r_{эj} - r_c)^2 + (z_{эj} + H_э - z_{ci})^2}. \quad (4.16)$$

Тогда косинусы углов падения-отражения луча можно выразить через величины r_c , $r_{эj}$, $H_э$:

$$\text{Cos}\psi_i = \text{Cos}\psi_j = \frac{r_{эj} - r_c}{\sqrt{(r_{эj} - r_c)^2 + (z_{эj} + H_э - z_{ci})^2}}. \quad (4.17)$$

Отсюда

$$\varphi_{\Delta F_i - F_3} = \frac{\Delta F_j}{\pi} \sum_{j=1}^{L_3} \frac{(r_{эj} - r_c)^2}{\left[(r_{эj} - r_c)^2 + (z_{эj} + H - z_{ci})^2 \right]^{\frac{3}{2}}}, \quad j = \overline{1, L_3}. \quad (4.18)$$

Учитывая, что площадь элементарной поверхности экрана равна $\Delta F_3 = 2\pi r_3 h$, запишем:

$$\varphi_{\Delta F_i - F_3} = 2h \sum_{j=1}^{L_3} \frac{r_{эj} (r_{эj} - r_c)^2}{\left[(r_{эj} - r_c)^2 + (z_{эj} + H - z_{ci})^2 \right]^{\frac{3}{2}}}, \quad j = \overline{1, L_3}. \quad (4.19)$$

Используя аналогичные рассуждения, запишем выражение для локального углового коэффициента между элементарной площадкой экрана и поверхностью слитка:

$$\varphi_{\Delta F_j - F_c} = 2r_c h \sum_{i=1}^{L_c} \frac{(r_{эj} - r_c)^2}{\left[(r_{эj} - r_c)^2 + (z_{эj} + H - z_{ci})^2 \right]^{\frac{3}{2}}}, \quad i = \overline{1, L_c}. \quad (4.20)$$

где L_c – количество элементарных площадок на поверхности слитка.

Аналитические выражения для пары поверхностей «слиток-тигель» приведены выше.

Выражения (4.19) и (4.20) позволяют описать тепловое взаимодействие излучением между поверхностью слитка и поверхностью экрана кусочно-цилиндрической формы с произвольно изменяющимся по высоте радиусом. Это в свою очередь даёт возможность рассчитывать температуру на поверхности слитка, задавая граничные условия на других поверхностях ростовой камеры, и оптимизировать форму экрана с учетом заданного критерия.

Выражения (4.6)-(4.10) и (4.13)-(4.20) составляют математическую модель связи между геометрическими параметрами элементов теплового узла и

тепловыми потоками излучения [205, 206].

Для использования полученной математической модели в тепловых расчетах необходимо встроить её в уравнения тепловых потоков излучения для поверхностей элементов теплового узла. Другими словами в этих уравнениях должны присутствовать выражения (4.6)-(4.10) и (4.13)-(4.20). Покажем связь между полученными выражениями для угловых коэффициентов и уравнениями тепловых потоков излучения при постоянном радиусе экрана.

Полный тепловой поток излучения между элементарной поверхностью слитка с площадью ΔF_i и температурой T_i на всю поверхность экрана составляет:

$$q_{iэ} = \sigma_0 \varepsilon_{пэ} \left(\Delta F_c T_i^4 \sum_{j=1}^{Lэ} \varphi_{ij}^э - \Delta F_э \sum_{j=1}^{Lэ} \varphi_{ji}^э T_{jэ}^4 \right), \quad (4.21)$$

где σ_0 – постоянная Стефана-Больцмана, $\varepsilon_{пэ} = \frac{1}{\varepsilon_c} + \frac{1}{\varepsilon_э} - 1$ – приведённая (с учетом переотражений) степень черноты слитка и экрана, $\varphi_{ij}^э$ – элементарный угловой коэффициент между i -й элементарной поверхностью слитка и j -й элементарной поверхностью экрана, $\varphi_{ji}^э$ – элементарный угловой коэффициент между j -й элементарной поверхностью экрана и i -й элементарной поверхностью слитка, T_j – температура j -й элементарной поверхности экрана. Тогда с учетом выражений (4.17)-(4.20) полный тепловой поток $q_{iэ}$ запишем в виде:

$$q_{iэ} = 2h\sigma_0\varepsilon_{пэ} \left(r_c T_i^4 \sum_{j=1}^{Lэ} \frac{(r_{эj} - r_c)^2}{\left[(r_{эj} - r_c)^2 + (z_{эj} + H - z_{ci})^2 \right]^{\frac{3}{2}}} - r_э \sum_{j=1}^{Lэ} \frac{(r_{эj} - r_c)^2 T_j^4}{\left[(r_{эj} - r_c)^2 + (z_{эj} + H - z_{ci})^2 \right]^{\frac{3}{2}}} \right). \quad (4.22)$$

С учетом выражений (4.8), (4.9) и (4.13), (4.14) аналогично можно записать и уравнения полных тепловых потоков между парами «слиток-тигель» и «слиток-герметизатор»:

$$q_{i\Gamma} = 2\sigma_0 \varepsilon_{\text{пт}} \left[T_i^4 d \sum_{j=1}^{L_\Gamma} \frac{\Delta F_{\Gamma j} z_i (r_{\Gamma j} - r_c)}{z_i^2 + (r_{\Gamma j} - r_c)^2} - r_c h \sum_{j=1}^{L_\Gamma} \frac{T_{j\Gamma}^4 z_{ci} (r_{\Gamma j} - r_c)}{z_{ci}^2 + (r_{\Gamma j} - r_c)^2} \right], \quad (4.23)$$

$$q_{i\Gamma} = 2\sigma_0 \varepsilon_{\text{пт}} \left[T_i^4 r_\Gamma h \sum_{j=1}^{L_\Gamma} \frac{(r_\Gamma - r_c)^2}{\left[(r_\Gamma - r_c)^2 + (z_{\Gamma j} - z_{ci})^2 \right]^{\frac{3}{2}}} - r_c h \sum_{j=1}^{L_\Gamma} \frac{T_{j\Gamma}^4 (r_\Gamma - r_c)^2}{\left[(r_\Gamma - r_c)^2 + (z_{\Gamma j} - z_{ci})^2 \right]^{\frac{3}{2}}} \right], \quad (4.24)$$

Для соблюдения теплового баланса необходимо учесть конвективный перенос тепла от элементарной поверхности слитка в окружающую его среду [186]:

$$q_{\text{конв}} = \alpha_{\text{к}} (T_{\text{к}} - T_{\text{ср}})^{\frac{3}{4}}, \quad (4.25)$$

где $\alpha_{\text{к}}$ – коэффициент конвективной теплоотдачи, $T_{\text{к}}$ – температура кристалла, $T_{\text{ср}}$ – температура среды.

Для любой элементарной площадки боковой поверхности слитка должно выполняться условие баланса входящих и исходящих тепловых потоков:

$$q_{ic} = q_{i\text{э}} + q_{i\Gamma} + q_{i\Gamma} + q_{\text{конв}}. \quad (4.26)$$

Выражения (4.22)–(4.26) составляют основу для расчета температуры элементарного участка боковой поверхности слитка при условии, что распределения температуры на остальных поверхностях известны и тем или иным образом входят в граничные условия [189, 207].

Таким образом, созданы предпосылки для разработки модели расчета тепловых условий выращивания монокристаллов, что в свою очередь необходимо для построения модели оптимизации размеров и положения теплового экрана.

4.3. Разработка модели расчета температурных полей расплава и слитка

В качестве граничных условий использовались априори заданное распределение температур на поверхности герметизатора, заданная температура

внутренней открытой поверхности тигля и распределение температур на поверхности экрана. Для учета распределения температуры на стенке тигля используется функциональная зависимость, полученная аппроксимацией экспериментальных данных. В табл. 4.1 представлены усредненные данные эксперимента. На рис. 4.5 показана кривая распределения температуры на стенке тигля и её уравнение.

Таблица 4.1 – Распределение температуры на стенке тигля

Дискретная координата	0	1	2	3	4
T, °C	0,7	8,0	25,5	39,8	45,4

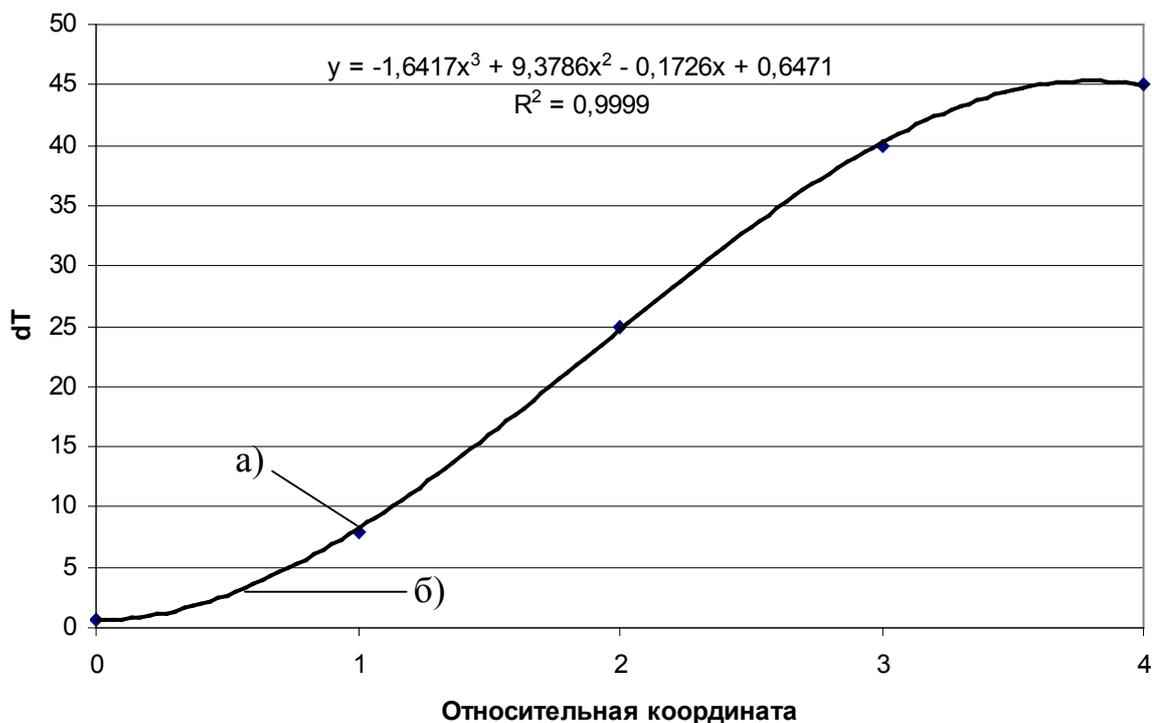


Рисунок. 4.5 – Кривая распределения температуры на стенке тигля:
 а) – эксперимент, б) – аппроксимация.

Распределение температуры на поверхности герметизатора получено и аппроксимировано экспериментально, так же, как и распределение температуры на стенке тигля. В табл. 4.2 представлены усредненные данные эксперимента. На рис. 4.6 показана аппроксимирующая кривая и её уравнение.

Таблица 4.2 – Распределение температуры на поверхности герметизатора

Относительная координата	0,43	0,57	0,71	0,86	1,0
T, °C	1071	1067	1066	1074	1092

Температура на поверхности экрана была измерена при помощи термомпар и зафиксирована в виде таблицы экспериментальных данных. В таблице 4.3 показаны усредненные значения температур, измеренные в процессе эксперимента.

Таблица 4.3 – Распределение температур на поверхности экрана

№ Тп	1	2	3	4	5	6	7
T, °C	903	869	832	793	741	681	623
№ Тп	8	9	10	11	-	-	-
T, °C	563	502	444	376	-	-	-

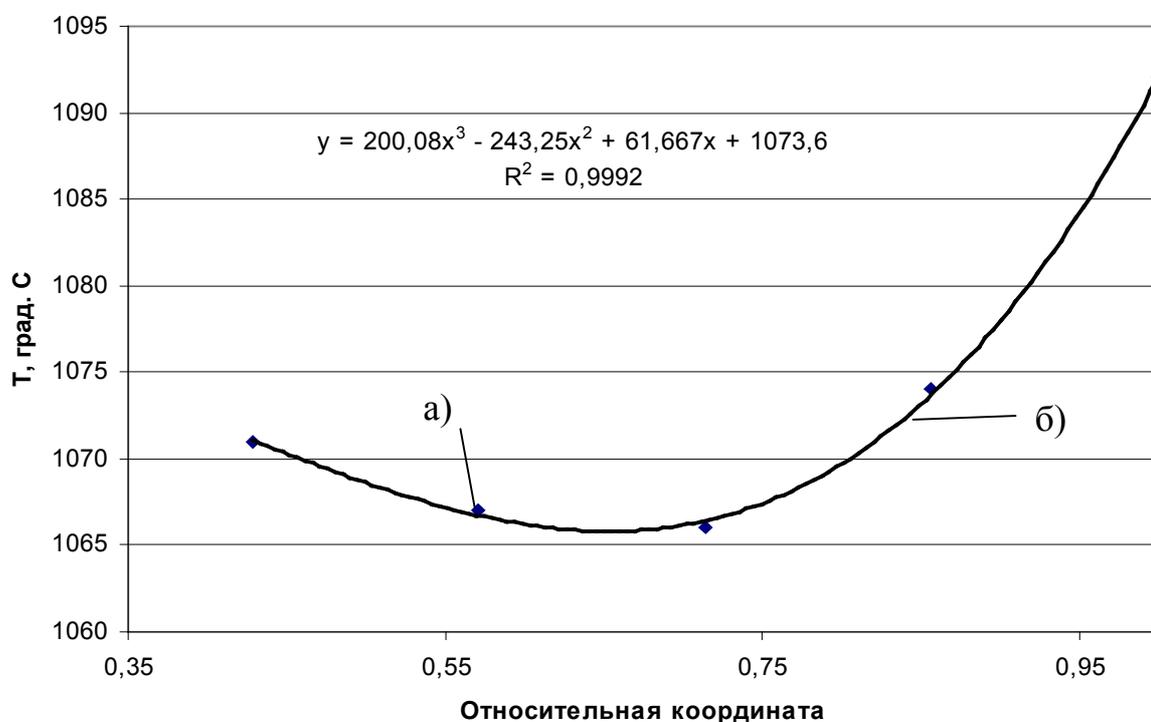


Рисунок 4.6 – Кривая распределения температуры на поверхности герметизатора: а) – эксперимент, б) – аппроксимация.

Основной тепловой расчет включает в себя три взаимосвязанные задачи:

- расчет теплового поля и градиентов температуры в слитке;
- расчет лучевого теплообмена между слитком и поверхностями экрана, тигля и герметизатора;
- расчет теплового поля в расплаве и герметизаторе.

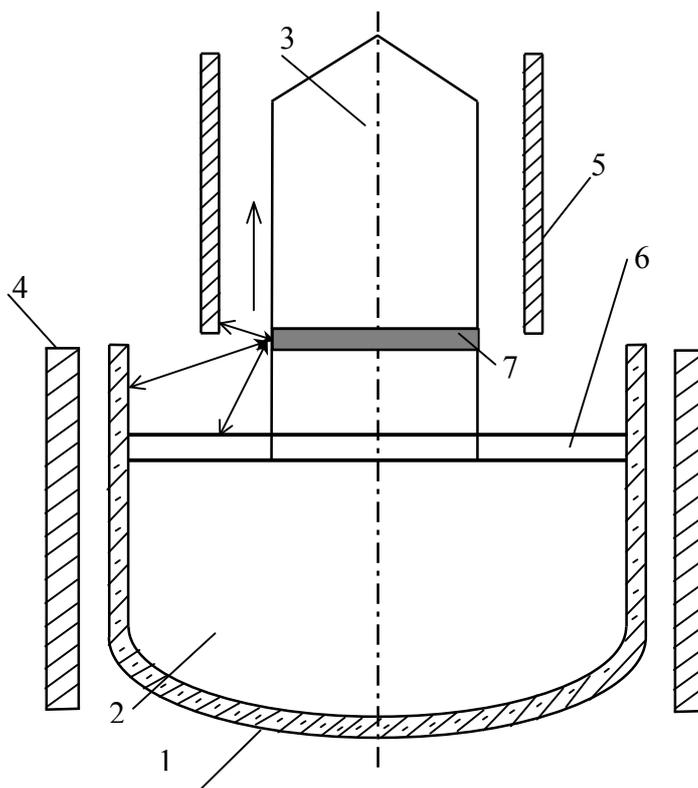


Рисунок 4.7 – Геометрическая схема теплового узла. Стрелками показаны тепловые потоки излучения и конвекции. 1 – тигель, 2 – расплав, 3 – слиток, 4 – нагреватель, 5 – экран, 6 – жидкий герметизатор (B_2O_3), 7 – элементарный участок поверхности слитка.

Первая из задач, состоит в решении стационарного уравнения теплопроводности Фурье-Кирхгофа [186]:

$$\frac{d\Gamma}{d\tau} = a \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + \frac{q_V}{c\rho}, \quad (4.27)$$

где $a = \lambda / c\rho$, m^2/c – коэффициент температуропроводности, который характеризует скорость распространения тепла в теле.

Задача решается методом конечных разностей (МКР), основанном на замене истинных значений производных, входящих в дифференциальное уравнение, при-

ближёнными значениями в узлах сетки [80, 81]. Расчетная схема построена с помощью метода переменных направлений [81].

Решение второй задачи основывается на принципе теплового баланса: для любой элементарной площадки боковой поверхности слитка должно выполняться условие баланса входящих и исходящих тепловых потоков (4.26).

Построение тепловой модели поясняет рис. 4.7. Расчет тепловых потоков проводится относительно элементарной кольцевой площадки 7 на цилиндрической поверхности слитка 3. Площадь элементарной площадки – ΔF_c . Стрелками показаны тепловые потоки излучения и конвекции, привязанные к элементарной площадке.

Запишем тепловой поток излучения между двумя поверхностями с площадями ΔF_i и ΔF_j :

$$q_{ij} = \sigma_0 \varepsilon_{\text{пр}} \left(\Delta F_i \varphi_{ij} T_i^4 - \Delta F_j \varphi_{ji} T_j^4 \right) \quad , \quad (4.29)$$

где σ_0 – постоянная Стефана-Больцмана, $\varepsilon_{\text{пр}}$ – приведенная степень черноты двух поверхностей с учетом переотражений, $\varepsilon_{\text{пр}} = \frac{1}{\varepsilon_i} + \frac{1}{\varepsilon_j} - 1$, T_i , T_j – температура поверхностей ΔF_i и ΔF_j соответственно.

Учитывая, что в теплообмене излучением с поверхностью слитка участвуют пары поверхностей «слиток-экран», «слиток-стенка тигля», «слиток-поверхность герметизатора», выделим на каждой поверхности элементарный участок с площадью ΔF . Получим наборы элементарных участков ΔF_{ci} , $\Delta F_{эj}$, $\Delta F_{тj}$, $\Delta F_{гj}$. Запишем результирующий тепловой поток между элементарной поверхностью слитка ΔF_{ci} и всеми элементарными поверхностями экрана $\Delta F_{эj}$ в виде

$$q_{iэ} = \sigma_0 \varepsilon_{\text{пэ}} \left(\Delta F_c T_i^4 \sum_{j=1}^{Lэ} \varphi_{ij}^э - \Delta F_э \sum_{j=1}^{Lэ} \varphi_{ji}^э T_{jэ}^4 \right) \quad , \quad (4.30)$$

где $\varepsilon_{\text{пэ}}$ – приведенная степень черноты поверхностей слитка и экрана с уче-

том переотражений; T_j - температура j -го участка поверхности экрана, L_ε - количество элементарных участков экрана, φ_{ij} - элементарные угловые коэффициенты.

Аналогично запишем тепловые потоки для пар «слиток-тигель» и «слиток-герметизатор»:

$$q_{iT} = \sigma_0 \varepsilon_{\text{пт}} \left(\Delta F_c T_i^4 \sum_{j=1}^{L_T} \varphi_{ij}^\tau - \Delta F_\tau \sum_{j=1}^{L_T} \varphi_{ji}^\tau T_{j\tau}^4 \right) ; \quad (4.31)$$

$$q_{i\Gamma} = \sigma_0 \varepsilon_{\text{пф}} \left(\Delta F_c T_i^4 \sum_{j=1}^{L_\Gamma} \varphi_{ij}^\Gamma - \Delta F_\Gamma \sum_{j=1}^{L_\Gamma} \varphi_{ji}^\Gamma T_{j\Gamma}^4 \right) . \quad (4.32)$$

Обозначим: $\sum_{j=1}^{L_\varepsilon} \varphi_{ij}^\varepsilon = A_{ij}^\varepsilon$; $\sum_{j=1}^{L_\varepsilon} \varphi_{ji}^\varepsilon = A_{ji}^\varepsilon$; $\sum_{j=1}^{L_T} \varphi_{ij}^\tau = A_{ij}^\tau$ $\sum_{j=1}^{L_T} \varphi_{ji}^\tau = A_{ji}^\tau$;

$$\sum_{j=1}^{L_\Gamma} \varphi_{ij}^\Gamma = A_{ij}^\Gamma; \sum_{j=1}^{L_\Gamma} \varphi_{ji}^\Gamma = A_{ji}^\Gamma.$$

Тогда выражения (4.30) – (4.31) примут вид:

$$q_{i\varepsilon} = \sigma_0 \varepsilon_{\text{пэ}} \left(\Delta F_c T_i^4 A_{ij}^\varepsilon - \Delta F_\varepsilon A_{ji}^\varepsilon T_{j\varepsilon}^4 \right) , \quad (4.33)$$

$$q_{iT} = \sigma_0 \varepsilon_{\text{пт}} \left(\Delta F_c T_i^4 A_{ij}^\tau - \Delta F_\tau A_{ji}^\tau T_{j\tau}^4 \right) , \quad (4.34)$$

$$q_{i\Gamma} = \sigma_0 \varepsilon_{\text{пф}} \left(\Delta F_c T_i^4 A_{ij}^\Gamma - \Delta F_\Gamma A_{ji}^\Gamma T_{j\Gamma}^4 \right) . \quad (4.35)$$

Учтем конвективный перенос тепла от элементарной поверхности слитка в окружающую его среду (выражение (4.25) и условие баланса входящих и исходящих тепловых потоков (4.26), которое должно выполняться для любой элементарной площадки боковой поверхности слитка. Модель расчета температурных полей расплава и слитка при выращивании монокристаллов состав-

ляют, таким образом, выражения (4.27), (4.28) и (4.33)–(4.35). Наличие в уравнениях (4.32)–(4.34) элементарных угловых коэффициентов, которые явно зависят от координат взаимного расположения слитка, экрана, тигля и поверхности герметизатора, позволяет аналитически связать геометрические параметры теплового узла с моделью вычисления параметров температурного поля в слитке [205]. Расчет температурного поля расплава производится также методом конечных разностей.

На рисунке 4.8 показан график распределения температуры на цилиндрической поверхности слитка, полученный расчетом на предлагаемой модели, а также график распределения температуры на внутренней поверхности экрана. Результаты расчета адекватны результатам, полученным другими авторами на численных локальных тепловых моделях [96].

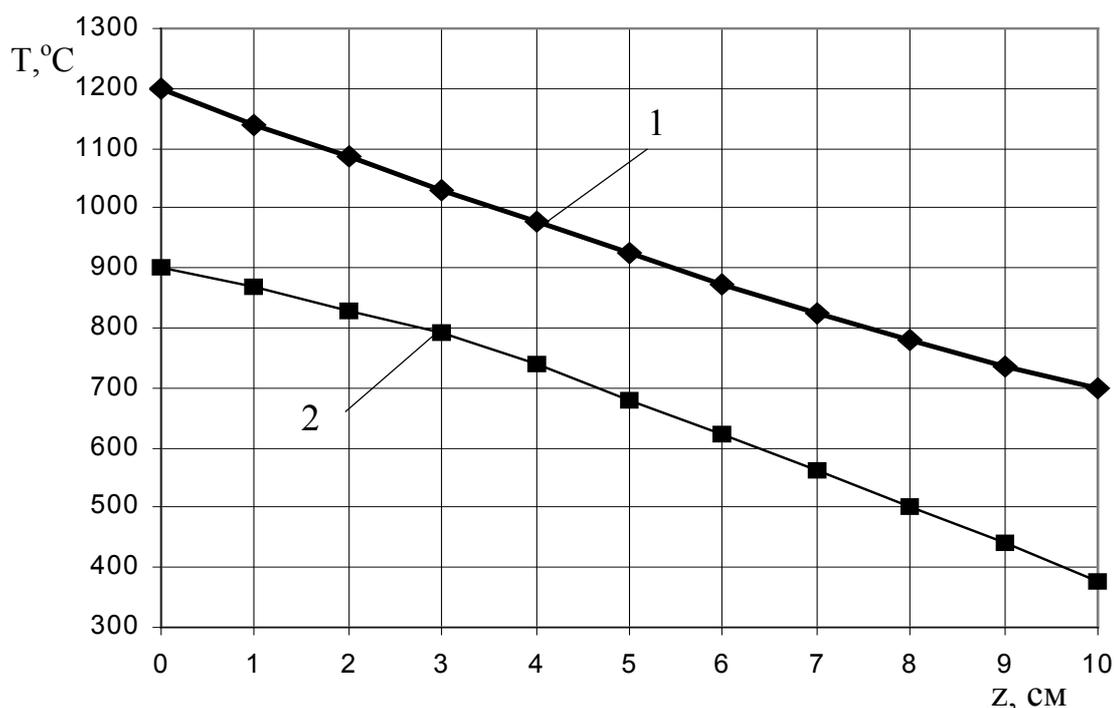


Рисунок 4.8 – Результаты расчета температуры на боковой поверхности слитка (1) и измеренные значения температуры вдоль стенки экрана, приподнятого на 20 мм относительно расплава (2).

Таким образом, получена базовая модель расчета тепловых условий выращивания монокристаллов. Данная модель используется в расчетах по оптимизации размеров и положения теплового экрана на стадии технологической подготовки производства. Тем самым решается задача оптимизации условий

остывания слитка в тепловом узле. Метод и модель оптимизации описаны в подразделе 4.4.

4.4. Разработка метода и модели оптимизации конфигурации и положения теплового экрана ростовой установки

Тепловые узлы существующих в настоящее время ростовых установок по методу Чохральского включают экраны, которые должны обеспечить оптимальный тепловой режим для растущего слитка в зоне, примыкающей к фронту кристаллизации и, соответственно, минимизацию неравномерности температурных градиентов. Однако, несмотря на большое количество исследований, в настоящее время не найдено оптимальных конфигураций экрана для различных сочетаний геометрических параметров теплового узла.

Цель данного подраздела работы состоит в разработке модели и метода автоматизированного решения задачи оптимизации размеров и положения теплового экрана ростовой установки для выращивания монокристаллов методом Чохральского.

Для автоматизированного расчета оптимальных геометрических параметров теплового узла необходим другой подход, который заключается в установлении закономерностей влияния геометрии теплового экрана (или системы экранов) на распределение температур в рабочей зоне ростовой установки и в слитке. Для установления таких закономерностей была сформирована математическая модель, отражающая связь между геометрическими параметрами тепловых экранов и параметрами тепловых потоков в тепловом узле, а также разработаны модель и метод оптимизации конфигурации теплового экрана, форма и положение которого оказывают критическое влияние на режим охлаждения слитка в процессе выращивания [209–211].

Рассмотрим математическую модель задачи оптимизации конфигурации и положения теплового экрана. Оптимизация параметров теплового экрана проводится по критерию минимизации неравномерности осевого и радиального

градиентов температуры в слитке.

При математической постановке данной задачи необходимо учесть два важных фактора, связанных с физическими условиями роста монокристалла. Во первых, рост монокристалла возможен только при наличии некоторого минимального осевого градиента температуры на фронте кристаллизации. Во вторых, для минимизации радиальных температурных напряжений в зоне слитка, примыкающей к фронту кристаллизации, необходимо минимизировать радиальный градиент температуры в этой зоне.

В работе [210] разработана математическая модель задачи оптимизации конфигурации теплового экрана по критерию минимизации неравномерности осевого температурного градиента в остывающем слитке. В работе [211] предлагается усовершенствованная модель, позволяющая решить две взаимосвязанные задачи – стабилизировать на минимальном уровне радиальный температурный градиент в зоне, примыкающей к фронту кристаллизации и минимизировать неравномерность осевого температурного градиента в зоне остывания слитка.

Аналитическая связь между скоростью v_s роста кристалла и тепловыми условиями выражается формулой [208]:

$$v_s L \rho_s = \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial z} - \alpha (T_L - T_{nl}) \quad , \quad (4.37)$$

где T_{nl} – температура плавления (кристаллизации); α – коэффициент теплопередачи на фазовой границе, λ_s – коэффициент теплопроводности в твердом состоянии, ρ_s – плотность монокристалла, L – скрытая теплота кристаллизации. Отсюда

$$\frac{\partial T_s}{\partial z} = \frac{v_s L \rho_s + \alpha (T_L - T_{nl})}{\lambda_s} \quad . \quad (4.38)$$

В свою очередь, величина скорости выращивания непосредственно

влияет на объем выращиваемого кристалла:

$$V_s = v_s \pi R_k^2 t \quad , \quad (4.39)$$

где t – время протекания процесса выращивания.

Таким образом, заранее определив параметры процесса выращивания и параметры материала, можно получить константу, устанавливающую заданное усредненное значение осевого градиента температуры в области фронта кристаллизации:

$$\frac{\partial \bar{T}_s}{\partial z} = G_0 \quad . \quad (4.40)$$

Меньшие значения градиента приведут к резкому замедлению роста монокристалла, а большие значения могут вызвать нежелательные изменения структуры.

Поскольку температурные напряжения в основном являются следствием неравномерного изменения градиента температуры GZ вдоль оси z слитка, локальным критерием оптимизации должен служить минимум величины квадрата отклонения значений усредненного по радиусу слитка градиента GZ от константы GZ_0 , то есть

$$F(R_s, L_s, H_s) = \sum_{i=1}^N (GZ_i - GZ_0)^2 \rightarrow \min, \quad i = \overline{1, N} \quad , \quad (4.41)$$

где N – количество дискретных цилиндрических областей слитка вдоль оси z , R_s – радиус экрана, L_s – высота экрана, H_s – высота экрана над уровнем расплава (герметизатора).

Вторым локальным критерием оптимизации служит критерий стабилизации на минимальном уровне радиального температурного градиента GR :

$$F(R_3, L_3, H_3) = \left[\sum_{j=1}^M (GR_j - GR_0)^2 \right] \rightarrow \min, \quad j = \overline{1, M}, \quad (4.42)$$

где GR_0 – пороговое значение градиента, превышение которого приводит к недопустимому риску увеличения плотности дислокаций в слитке.

Целевую функцию модели оптимизации получим, объединяя выражения (4.41) и (4.42) [211]:

$$F(R_3, L_3, H_3) = \left[\alpha(i) \sum_{i=1}^N (GZ_i - GZ_0)^2 + \beta(i) \sum_{j=1}^M (GR_j - GR_0)^2 \right] \rightarrow \min, \quad (4.43)$$

где весовые коэффициенты $\alpha(i)$ и $\beta(i)$ изменяются следующим образом:

$$\alpha(i) = \begin{cases} 1 & \text{if } 0 \leq i < 2 \\ 0,5 & \text{if } i = 2 \\ 0 & \text{if } i > 2 \end{cases}, \quad \beta(i) = \begin{cases} 1 & \text{if } i \in [0, 2] \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}. \quad (4.44)$$

Ограничениями в модели оптимизации служат граничные условия по температуре, задаваемые на рабочих поверхностях тигля, на поверхности расплава и закон распределения температуры по поверхности экрана вдоль оси z с учетом изменения радиуса экрана:

$$T_{\text{фк}} = T_{\text{фк}}(r), \quad (4.45)$$

$$T_{\text{р}} = T_{\text{р}}(r), \quad (4.46)$$

$$T_{\text{т}} = T_{\text{т}}(h), \quad (4.47)$$

$$T_3 = T_3(z, r_3). \quad (4.48)$$

Итак, задачу оптимизации размеров и положения экрана можно поставить следующим образом: найти оптимальные геометрические параметры экрана L_3, R_3, H_3 при заданных значениях R_c, R_r , граничных условиях (4.45) – (4.48) и минимизации целевой функции (4.43).

Решение задачи оптимизации производится эволюционным методом.

Исходные положения метода можно представить следующим образом:

а) Оптимизация размеров и положения теплового экрана происходит по интегральному критерию, учитывающему два важных показателя – неравномерность осевых градиентов температуры в слитке и минимум радиальных градиентов в зоне, примыкающей к фронту кристаллизации.

б) В качестве исходных данных используются значения радиуса слитка и тигля. Оптимизируются закон изменения радиуса экрана $R_э = k \cdot z + c$, высота экрана $L_э$, высота расположения экрана над расплавом $H_э$. Задаются допустимые диапазоны изменения параметров $R_{э\min}$, $R_{э\max}$, $L_э$ и $H_э$. Задаётся также текущая высота слитка Z_t .

Метод реализуется в виде следующих этапов:

1. Для численного решения задачи расчета теплового поля в слитке задаются граничные условия (распределение температуры на стенке тигля, распределение температуры по поверхности экрана, распределение температуры по поверхности расплава, температура окружающей среды).

2. При помощи эволюционного алгоритма, изложенного ниже, генерируется популяция допустимых решений в виде четверок $(k_э, c_э, L_эk, H_эk)$, $k=1...P$, где P – число членов популяции.

3. Каждая четверка $(k_э, c_э, L_эk, H_эk)$ используется в модели конфигурации теплового узла и, соответственно, для вычисления градиентов температуры по оси и по радиусу слитка.

4. Для каждой четверки $(k_э, c_э, L_эk, H_эk)$ вычисляется значение критерия (4.43).

5. При помощи эволюционных процедур, описанных ниже, отбирается наилучшее решение по критерию (4.43).

Разработка эволюционного алгоритма для решения задачи оптимизации.

Предварительные исследования показали, что критерий (4.43) является мультимодальной функцией. С учетом этого факта для решения поставленной задачи целесообразно использовать адаптивные методы случайного поиска, развитием которых являются эволюционные алгоритмы [212–215]. Основная

продуктивная идея эволюционных алгоритмов состоит в том, что поиск ведется по всей области допустимых значений и в процессе его выполнения изменяются условия генерации вектора рабочих параметров. Обычно на начальных этапах распределение точек является равномерным, а потом количество точек увеличивается в тех областях, где предположительно находятся локальные экстремумы целевой функции. Уточнение значений локальных экстремумов можно производить с помощью случайного поиска в узкой области, которая предположительно содержит локальный экстремум. Вероятность быстрого схождения алгоритма при этом значительно возрастает и, тем самым, ускоряется весь процесс поиска оптимального решения. Таким образом, эволюционные алгоритмы используют информацию о рельефе поверхности функции цели. С учетом изложенного сформулируем основные правила, которые должен использовать алгоритм поиска оптимального решения [211]:

- обеспечение равномерного поиска во всей области определения функции цели.
- обеспечение сужения границ случайного поиска в отдельных областях, которые предположительно содержат локальные экстремумы.
- узкие границы локального поиска адаптивно смещаются по мере уточнения значения локального экстремума.
- выбор для локального анализа не только элитарных точек, но и нескольких случайных точек.

Ниже приведены шаги алгоритма для реализации разработанного метода:

ШАГ 1. Генерация исходной популяции. Синтезируется P точек \bar{X}_k ($k = 1, \dots, P$), в которых определяется значение целевой функции.

ШАГ 2. Сортировка наборов \bar{X}_k (особей) по возрастанию значений (посколько в решаемой задаче ищется минимум целевой функции).

ШАГ 3. Из всех P точек отбирается η первых точек – претендентов на лидерство.

ШАГ 4. Из оставшихся $P - \eta$ точек случайным образом выбираются еще η точек.

ШАГ 5. Вычисляются границы поиска уточненного значения экстремума для каждой из 2η выбранных точек:

$$a' = x^* - A(b-a)/2, \quad b' = x^* + A(b-a)/2,$$

где a', b' – суженные границы поиска; a, b – начальные границы поиска; x^* – координата выбранного решения; A – размер границы для уточненного поиска экстремума.

ШАГ 6. Генерируется M точек в границах a', b' .

ШАГ 7. Для каждой точки $X_l, l \in M$ вычисляется значение целевой функции. Если новое значение меньше предшествующего, соответственно изменяются значения x^* .

Как результат в массиве популяции для выбранных точек фиксируются новые значения координат и локальных экстремумов.

ШАГ 8. Массив популяции сортируется по возрастанию значения целевой функции.

ШАГ 9. Если количество заданных итераций не исчерпано, то для всех особей, кроме η лучших, генерируются новые случайные значения координат и происходит переход к шагу 3. Иначе переход к шагу 10.

ШАГ 10. Первый элемент в списке особей является найденным оптимальным решением. Конец.

Алгоритм имеет следующие параметры настройки:

- 1) P – количество членов популяции.
- 2) η – количество претендентов в элиту и количество особей, которые случайно добавляются к элите.
- 3) A – коэффициент уменьшения границ для уточненного поиска экстремума.
- 4) M – количество пробных точек в узких границах уточненного поиска.

Таким образом, разработаны усовершенствованная модель и метод оптимизации конфигурации и положения теплового экрана, что дает возможность заранее выбрать наилучшие условия остывания слитка в процессе технологической подготовки производства слитков различных размеров. В под-

разделе 4.5 разработана информационная технология оптимизации тепловых условий остывания слитка.

4.5. Разработка информационной технологии оптимизации тепловых условий остывания слитка

Информационная технология оптимизации тепловых условий остывания слитка путем выбора геометрических параметров тепловых экранов установок для выращивания монокристаллов полупроводников включает в себя [211]:

1. Комплекс математических моделей и методов, в том числе:

- модель оптимизации геометрических параметров теплового экрана (M1);
- метод оптимизации геометрических параметров теплового экрана (MO).
- математическая модель связи между геометрическими параметрами элементов теплового узла и тепловыми потоками излучения (M2);
- модель аппроксимации закона распределения температуры на стенке тигля (M3);
- модель аппроксимации закона распределения температуры на поверхности герметизатора (M4);
- модель аппроксимации закона распределения температуры в зоне кристаллизации (M5);
- модель расчета тепловых условий (M6);

2. Набор взаимосвязанных информационных процессов.

3. Инструментальный программный модуль, реализующий процедуру оптимизации.

Исходными данными для решения задачи оптимизации являются: заданный диаметр слитка, см; высота выращенного слитка, см; диаметр тигля, см; высота тигля, см; внутренний диаметр экрана, см; высота экрана, см; высота слоя герметизатора, см; плотность GaAs (кристалл), г/см³; плотность GaAs, (расплав) г/см³; плотность герметизатора (B₂O₃), г/см³; теплопроводность GaAs (кристалл), Вт/смК; теплопроводность GaAs (расплав), Вт/смК;

теплопроводность B_2O_3 , Вт/смК; излучательная способность GaAs (кристалл); излучательная способность B_2O_3 ; температура плавления GaAs, °С; температура фонового нагревателя, °С; уровень расплава в тигле, %;

Промежуточными данными являются: массив значений температуры на поверхности герметизатора, °С; массив значений температуры на поверхности тигля, °С, теплопроводность GaAs в зоне фронта кристаллизации, Вт/смК; степень затвердевания дискретных областей в зоне фронта кристаллизации (ячеек клеточного автомата); температура в заданных точках расплава, °С; температура в заданных точках кристалла, °С; эффективный коэффициент теплоотдачи с поверхности слитка.

Конечные данные: массив распределения температур в расплаве, °С; массив распределения температур в кристалле, °С; температурные градиенты в зоне фронта кристаллизации; температурные градиенты в слитке; геометрические параметры экрана.

Основу информационной технологии оптимизации геометрических параметров теплового экрана, окружающего выращиваемый слиток, составляет совокупность взаимосвязанных информационных процессов (ИП) и моделей, перечисленных выше (рис. 4.9). Рассмотрим информационные процессы (ИП) и их взаимодействие.

Перед началом оптимизационных расчетов пользователь (технолог) задаёт исходные данные: радиус слитка R_c ; текущая высота слитка Z_i ; параметры функции изменения радиуса k , c ; высота экрана $L_э$; высота расположения экрана над расплавом $H_э$; радиус тигля R_T ; высота тигля H_T ; допустимые диапазоны изменения геометрических параметров экрана $R_{эmin}$, $R_{эmax}$, $L_э$ и $H_э$.

ИП1. Для расчета тепловых условий задаются и рассчитываются граничные условия (распределение температуры на фронте кристаллизации, начальное распределение температуры по поверхности экрана, распределение температуры по поверхности расплава, температура окружающей среды и температура стенки тигля). Задействованы модели М3, М4, М5.

Для учета распределения температуры на стенке тигля (модель М3) используется функциональная зависимость, полученная аппроксимацией данных, полученных в ходе экспериментов.

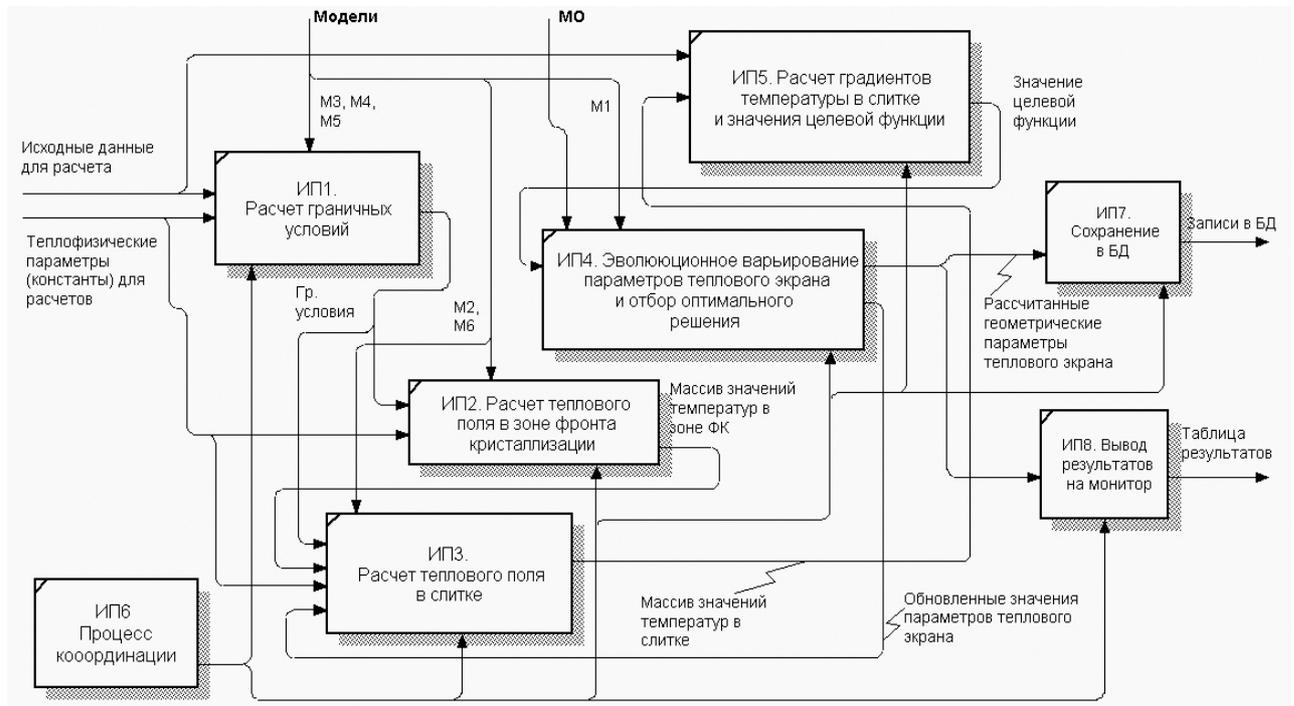


Рисунок 4.9 – Общая схема информационной технологии оптимизации тепловых условий остывания слитка

ИП2. Производится расчет (аппроксимация) температурного поля в зоне кристаллизации. Задействована модель М5, представляющая собой нейросетевую аппроксимацию температурного поля, подобную описанной в работе [187].

ИП3. Производится расчет температурного поля в слитке с учетом граничных условий методом конечных разностей на двумерной сетке. Задействована модель М2 – модель конфигурации теплового узла (угловые коэффициенты и уравнения тепловых потоков излучения). По результатам расчета определяются градиенты температуры по оси и радиусу слитка. Задействована модель М6.

ИП4. При помощи эволюционного алгоритма оптимизации генерируется популяция допустимых решений $P(k_{эj}, c_{эj}, L_{эj}, H_{эj})$ в виде четверок $(k_{эj}, c_{эj},$

$L_{эj}, H_{эj}), j=1...N.$, где N – число членов популяции. Каждая четверка $(k_{эj}, c_{эj}, L_{эj}, H_{эj})$ используется для изменения конфигурации теплового узла в модели. При помощи эволюционных процедур, описанных выше, отбирается наилучшее решение по критерию (4.43). Задействована модель решения задачи оптимизации М1 и метод оптимизации МО.

ИП5. Координация выполнения информационных процессов и коррекция содержимого базы данных.

ИП6. Сохранение рассчитанных параметров в базе данных.

ИП7. Формирование и вывод результатов оптимизации.

Разработанная информационная технология позволяет на стадии технической подготовки производства оптимизировать условия остывания слитка произвольного типоразмера.

Для решения описанной выше задачи оптимизации было разработано специальное программное обеспечение (подсистема «Экран»), которое обеспечивает ввод исходных данных через пользовательский интерфейс, решение тепловых уравнений методом конечных разностей, нейросетевую аппроксимацию решения в зоне фронта кристаллизации, выбор оптимальных размеров и положения экрана и вывод результатов решения в табличном виде. Результаты расчета экспортируются в электронную таблицу Microsoft Excel для построения графиков, а также выдаются пользователю-технологу в качестве рекомендаций по изготовлению теплового экрана с оптимальными геометрическими параметрами для заданного размера слитка и тигля.

Выводы по разделу

В четвертом разделе разработаны модели, метод и информационная технология поддержки задачи оптимизации тепловых условий остывания слитка в ростовой установке за счет выбора конструктивных параметров тепловых экранов, прямо влияющих на режим остывания выращенной части слитка, а, следовательно, и на его качество.

1. Разработана математическая модель связи между геометрическими

параметрами элементов теплового узла и тепловыми потоками излучения, которая, в отличие от известных, позволяет описать тепловое взаимодействие излучением между поверхностью слитка и поверхностью экрана кусочно-цилиндрической формы с произвольно изменяющимся по высоте радиусом, что даёт возможность рассчитывать температуру на поверхности слитка, задавая граничные условия на других поверхностях ростовой камеры, и оптимизировать форму экрана с учетом заданного критерия.

2. Усовершенствована математическая модель задачи оптимизации геометрических параметров теплового экрана, в которой, в отличие от известных, используется составной критерий оптимизации, который учитывает неравномерность осевого градиента в слитке и уровень радиального градиента температуры в зоне, примыкающей к фронту кристаллизации, что позволяет с учётом этих факторов выбрать оптимальную конфигурацию теплового экрана и, тем самым, оптимизировать условия остывания слитка в ростовой камере.

3. Усовершенствован метод решения задачи оптимизации геометрических параметров теплового экрана, который, в отличие от известных, содержит математическую модель оптимизации с составным критерием и использует эволюционную процедуру оптимизационных расчетов, что позволяет ускорить и удешевить процесс технологической подготовки производства под заданный диаметр слитка.

4. Разработана информационная технология поддержки автоматизированного решения задачи оптимизации тепловых условий остывания слитка на стадии технологической подготовки производства путем выбора конфигурации теплового экрана ростовой установки для выращивания монокристаллов методом Чохральского. Информационная технология, реализованная в рамках ИАС УКПВ, позволяет провести расчеты по оптимизации положения теплового экрана и выбрать его конфигурацию и высоту расположения над уровнем расплава для конкретной ростовой установки. Оптимальная конфигурация теплового экрана позволяет снизить неравномерность осевых температурных градиентов и обеспечить эффективное ограничение радиального

градиента температуры в зоне, примыкающей к фронту кристаллизации, что снижает вероятность возникновения повышенной плотности дислокаций в монокристалле.

Результаты расчета конфигурации экрана выдаются пользователю-технологу в качестве рекомендаций по изготовлению теплового экрана с оптимальными геометрическими параметрами для заданного размера слитка и тигля. Оптимальная конфигурация теплового экрана способствует минимизации плотности структурных дефектов в слитке и тем самым улучшает качество конечного продукта.

Основные результаты раздела опубликованы в научных трудах автора [189, 205, 206, 207, 210].

РАЗДЕЛ 5.
РАЗРАБОТКА МОДЕЛЕЙ, АЛГОРИТМОВ
И ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ПОДДЕРЖКИ ПРИНЯТИЯ
ОПЕРАТИВНЫХ РЕШЕНИЙ И УПРАВЛЕНИЯ КАЧЕСТВОМ
ПРОЦЕССА ВЫРАЩИВАНИЯ

Модели, алгоритмы и информационные технологии, которые разрабатываются в данном разделе, реализованы в подсистеме "Советчик" (*SAD* – функциональная подсистема поддержки принятия оперативных решений по изменению режима процесса выращивания, подраздел 2.3). Эта подсистема представляет собой специализированную СППР, модель которой представлена в подразделе 2.6.

К данной СППР предъявляются следующие требования:

- использование временных зависимостей в базе знаний и учет временного фактора при поиске решения;
- получение достоверного результата при возможной неполноте исходных данных;
- выбор наиболее существенных событий, имеющих место в динамике технологического процесса;
- распознавание неблагоприятных (критических) ситуаций (КС) и корректный выход из таких ситуаций.

Под неблагоприятной ситуацией будем понимать такую ситуацию, которая возникает в ходе технологического процесса и не разрешается без вмешательства оператора, так как связана с необходимостью выбора конкретной альтернативы управления в условиях дефицита времени при наличии информации о состоянии процесса, критериев оценки ситуации и решающих правил.

Настройка процедуры оценивания состояния технологического процесса (при сформированном дереве оценок и фиксированном наборе исходных показателей) включает ряд задач, в том числе [216]:

- определение вида и параметров частных функций оценки;
- выбор оценочных шкал и нормирующих преобразований;
- выбор типа функций агрегирования и настройка их параметров;
- выбор методов перехода от непрерывных шкал к дискретным.

К числу наиболее распространенных методов перехода к дискретным шкалам относятся пороговые методы, позволяющие преобразовать непрерывные величины в дискретные или (путем использования методов нечеткой логики) в лингвистические оценки.

5.1. Анализ факторов и условий, непосредственно влияющих на качество процесса выращивания

В настоящее время методом Чохральского выращивают более 70% всех монокристаллов кремния и германия и около 90% арсенидов и фосфидов галлия. Полупроводниковые соединения выращивают в атмосфере сжатого инертного газа, создаваемого над расплавом разлагающегося полупроводникового соединения, покрытого слоем герметизирующей жидкости, которая препятствует испарению летучего компонента. Такой вариант осуществления процесса Чохральского получил название метода жидкостной герметизации (ЛЕС) [106]. Все современные установки общего назначения для выращивания монокристаллов методом Чохральского имеют резистивный нагрев, осуществляемый с помощью разрезных графитовых нагревателей.

На стадии роста монокристалла постоянного сечения (диаметра) ведущую роль в формировании монокристаллической структуры играют тепловые условия процесса. Они определяют осевые и радиальные градиенты температуры в кристалле и расплаве, от которых зависят форма фронта кристаллизации и термические напряжения в монокристалле, а также размеры переохлажденной области расплава вблизи фронта кристаллизации [109].

Рассмотрим влияние тепловых условий и режимов выращивания на структуру монокристаллов и образование дислокаций.

Поток тепла Q_H , поступающий к тиглю от нагревателя, равен сумме потоков тепла, отводимых излучением от расплава $Q_{И.Р.}$, теплопроводностью $Q_{Т.К.}$ и излучением $Q_{И.К.}$ от кристалла. Соотношение этих потоков определяет характер градиентов температуры в выращиваемом монокристалле. Массив значений радиальных градиентов температуры (G_r , град/см) определяется по выражению

$$G_{Ri} = \Delta T_{Ri} / \Delta r, \quad (5.1a)$$

где ΔT_{Ri} – перепад температуры на дискретном отрезке Δr вдоль радиуса слитка.

Можно также определить усреднённый радиальный градиент:

$G_R = (T_{ц} - T_{п}) / R$, где R – радиус слитка, $T_{ц}$ – температура в центре слитка, $T_{п}$ – температура на поверхности слитка.

Массив значений осевых градиентов температуры (G_z , град/см) определяется по выражению

$$G_{Zi} = \Delta T_{Zi} / \Delta z, \quad (5.16)$$

где ΔT_{Zi} – перепад температуры на дискретном отрезке Δz вдоль оси слитка.

Радиальный градиент температуры зависит в основном от величины тепловых потерь с поверхности кристалла $Q_{И.К.}$ и возрастает с их увеличением. Поэтому на величину радиального градиента можно влиять, экранируя растущий кристалл или регулируя температуру отдельных нагревателей.

Осевой градиент зависит от распределения температуры по длине кристалла, т. е. в конечном счете, от тех же факторов, которые управляют радиальным градиентом. Таким образом, осевой и радиальный градиенты взаимосвязаны. Помимо этого, осевой градиент зависит и от скорости кристаллизации. С увеличением её осевой градиент увеличивается, что является следствием выделения повышенного количества тепла (скрытой теплоты плавления) на фронте кристаллизации [109].

Проведение процесса выращивания монокристалла в атмосфере компрессируемого газа, обладающего большой теплопроводностью, а также наличие на поверхности расплава слоя герметизатора с теплоизолирующими свойствами существенно изменяют тепловые условия роста монокристалла по сравнению с обычными условиями. Резко возрастают осевые градиенты температуры в кристалле вблизи фронта кристаллизации, что может привести к критической ситуации и срыву нормального роста.

Повышение температуры монокристалла, выходящего из-под слоя герметизатора приводит к потере летучего компонента. В результате вблизи поверхности монокристалла генерируются недопустимые дислокации (нарушения целостности кристаллической решетки) и тем интенсивнее, чем больше осевой перепад температур по длине монокристалла. Высокие осевые перепады температур и их неравномерность вызывают напряжения в кристаллической решетке, что также приводит к образованию дислокаций. Поэтому для снижения уровня напряжений и количества дислокаций в монокристаллах полупроводниковых соединений, выращиваемых методом жидкостной герметизации, необходимо создавать малые градиенты температуры в монокристалле в области герметизатора и непосредственно над ним.

Таким образом, существует комплекс взаимосвязанных факторов, влияющих на качество растущего монокристалла. Одной из задач разработки эффективной подсистемы поддержки принятия оперативных решений (ППОР) является установление причинно-следственных связей между этими факторами с целью создания базы знаний для распознавания критических ситуаций и генерации рекомендаций по недопущению срыва нормального режима процесса выращивания.

Анализ и обобщение информации, собранной в литературе и при работе с экспертами позволяет сформулировать перечень факторов, влияющих на качество процесса выращивания и подлежащих мониторингу.

Факторы, влияющие на диаметр слитка. Текущее значение диаметра слитка зависит от температуры основного и фонового нагревателя и от скоро-

сти вытягивания [217]:

$$D = \frac{k_s T_n}{\rho L V_p} = A \frac{T_n}{V_p}, \quad A = \frac{k_s}{\rho L}, \quad (5.2)$$

где k_s – теплопроводность слитка, T_n – температура нагревателя, ρ – плотность, L – скрытая теплота кристаллизации, V_p – скорость вытягивания.

Таким образом, при увеличении температуры нагревателей диаметр слитка уменьшается, а при уменьшении температуры нагревателя – увеличивается. Скорость вытягивания цилиндрической части постоянна, если подсистемы стабилизации скорости и температуры функционируют в штатном режиме. Однако, из выражения (5.2) следует, что требуемый диаметр слитка можно обеспечить при различных значениях T_n и V_p . Риск выхода на критическую ситуацию часто увеличивается из-за того, что выбранные оператором значения T_n и V_p не обеспечивают стабильный процесс выращивания, хотя их соотношение и удовлетворяет условию (5.2) для заданного значения D .

Факторы, влияющие на величину плотности дислокаций. К увеличению плотности дислокаций приводит:

- повышенная неравномерность осевого градиента температуры;
- превышение осевого градиента выше определённого порога.
- превышение усреднённого радиального градиента выше определённого порога.

Кроме того, увеличение длины слитка приводит к увеличению осевого градиента, что в свою очередь увеличивает риск увеличения плотности дислокаций

Изменение диаметра слитка как фактор, учитываемый при диагностике работы АСУ ТП процесса выращивания. Тенденция увеличения (уменьшения) диаметра на фоне стабильных показаний температуры основного нагревателя ($T_{он}$) и показаний температуры фонового нагревателя ($T_{фн}$)

показывает, что возникла неисправность в системе измерения температуры или происходит неконтролируемое изменение скорости вытягивания.

Тенденция увеличения (уменьшения) диаметра на фоне уменьшения (уменьшения) Тон и Тфн и стабильной величины скорости вытягивания говорит о штатном режиме работы установки.

Мониторинг тенденции изменения диаметра слитка. Обеспечение постоянства диаметра растущего кристалла по всей длине его цилиндрической части – самая актуальная задача управления процессом выращивания. Колебания диаметра во время выращивания приводят к неоднородности кристаллической решетки, что сказывается на качестве будущего полупроводникового прибора. Поэтому необходимо разработать и использовать модель, позволяющую отслеживать тенденцию изменения диаметра слитка на нескольких интервалах времени Δt и прогнозировать ситуацию с целью недопущения срыва процесса по причине выхода диаметра за пределы допустимых значений.

Разделяя ситуации на критические и нештатные, следует отметить, что вопросы выхода из нештатных ситуаций – способы прекращения процесса выращивания и кардинального изменения режима работы тепловой установки по критерию экономической целесообразности были достаточно подробно рассмотрены в работе [218]. В настоящей работе рассматривается проблема недопущения нештатных ситуаций.

5.2. Разработка моделей распознавания ситуаций и выдачи рекомендаций по коррекции режима процесса выращивания

Предлагаемая методика построения комплекса моделей и алгоритмов диагностирования ситуаций и выдачи рекомендаций по коррекции режима технологического процесса включает в себя следующие этапы:

1. Структурирование состояний процесса и составление словаря ситуаций.
2. Отбор (группировка) информативных параметров для каждой ситуации.
3. Формирование словаря признаков ситуаций.

4. Разработка моделей и процедур, преобразующих первичные параметры процесса в признаки ситуаций.

5. Формулировка вербальных правил распознавания возможных критических и нештатных ситуаций относительно групп признаков. Кластеризация признаков.

6. Разработка модели распознавания и баз знаний для диагностики и выработки рекомендаций.

7. Разработка алгоритмов распознавания и алгоритмов коррекции баз знаний.

Структурирование состояний процесса и составление словаря ситуаций. В основу структурирования оперативной технологической информации положим выделение режимов и ситуаций. Режим, как понятие технологическое, определяется вектором значений технологических параметров в данный момент времени. Ситуация с точки зрения управления – объективная или субъективная оценка некоторого подмножества параметров процесса (эндогенных факторов), некоторого подмножества параметров внешней среды (экзогенных факторов) и связей между ними, имеющих место в настоящее время и являющихся результатом развития управляемого процесса во времени и пространстве. Анализ и классификация ситуаций основывается на анализе технологических режимов.

Выделим два основных режима протекания технологического процесса:

1) Нормальный режим (штатная ситуация), когда процесс протекает в рамках технологических уставок и переменные состояния находятся в интервале $[(X_i)_0 ; (X_i)_{кр}]$, где $(X_i)_0$ – номинальные значения переменных, $(X_i)_{кр}$ – критические значения переменных, при которых возможно возникновение критического режима.

2) Критический режим (критическая ситуация), когда требуется принятие незамедлительных мер по недопущению перехода в нештатную ситуацию, переменные состояния находятся в интервале $[(X_i)_{кр}; (X_i)_{нс}]$, где $(X_i)_{нс}$ – значения переменных, при которых практически неизбежно возникновение

нештатных ситуаций.

Анализ истории процессов выращивания и работа с экспертами позволили составить перечень (словарь) классов ситуаций, подлежащих диагностике:

1. Ситуация нормальная (штатная).
2. Растет вероятность отклонения диаметра слитка за пределы допуска (критическая ситуация).
3. Отклонение диаметра за пределы допуска (срыв процесса, нештатная ситуация).
4. Растет вероятность увеличения плотности дислокаций (критическая ситуация).
5. Вероятность недопустимого увеличения плотности дислокаций превысила заданный порог (срыв процесса, нештатная ситуация).
6. Растет вероятность замедления или остановки процесса кристаллизации (критическая ситуация).
7. Процесс кристаллизации сорван (нештатная ситуация).
8. Растет вероятность повышения нестабильности значения радиуса слитка, риск разложения кристалла (критическая ситуация).
9. Произошло разложение кристалла (нештатная ситуация).
10. Неисправность в АСУ ТП или возникновение более двух критических ситуаций одновременно (нештатная ситуация).

На основании анализа процесса выращивания был сформирован первичный набор параметров, необходимых для диагностирования критических режимов и нештатных ситуаций и принятия оперативных решений в технологических процессах выращивания монокристаллов арсенида галлия и кремния.

Перечень технических параметров:

1. Масса загрузки, кг;
2. Заданный диаметр цилиндрической части слитка, мм;
3. Средняя длина извлекаемого слитка, мм;
4. Среднее время плавления загрузки, час;

5. Среднее время выдержки расплава, час;
6. Среднее время подбора условий затравления, час;
7. Среднее время формирования верхнего конуса, час;
8. Среднее время, затрачиваемое на вытягивание цилиндрической части слитка длиной l_k (в мм) , час;
9. Средняя потребляемая мощность основного нагревателя на всех стадиях процесса, кВт;
10. Средняя потребляемая мощность фоновго нагревателя на всех стадиях процесса, кВт;
11. Максимальное допустимое время, в течении которого тигель может выдерживать воздействие высокой температуры без выделения вредных примесей в расплав, час;
12. Текущая измеренная масса слитка, кг;
13. Текущее значение уставки температуры основного нагревателя °С;
14. Текущее значение температуры основного нагревателя, °С;
15. Текущее значение уставки температуры фоновго нагревателя °С;
16. Текущее значение температуры фоновго нагревателя, °С;
17. Номинальная скорость перемещения штока затравки, мм/мин;
18. Текущее значение уставки диаметра слитка;
19. Текущее значение диаметра слитка, мм;
20. Массив значений распределения температур в расплаве, °С;
21. Массив значений распределения температур в слитке, °С;
22. Массив значений температурных градиентов в зоне фронта кристаллизации;
23. Массив значений температурных градиентов в слитке;
24. Текущий уровень расплава в тигле, %.

Перечень технико-экономических параметров:

1. Средняя цена готовой продукции (ГП), грн/кг;
2. Средняя цена материала, идущего на повторную переплавку, грн/кг;

3. Цена электроэнергии, грн/кВт час;
4. Средняя стоимость ресурсов (кроме электроэнергии, потребляемой нагревателями), расходуемых в единицу времени в процессе выращивания, грн/час.

Приведенные перечни параметров наглядно иллюстрируют сложность и взаимосвязанность процессов, происходящих при выращивании монокристаллов. Это не позволяет иметь единое, полное и формализованное описание технологического процесса в целом. Целесообразно произвести декомпозицию пространства параметров и пространства состояний с тем, чтобы минимизировать неопределенность при распознавании, упростить и унифицировать структуру моделей, отображающих различные аспекты процесса выращивания.

Из приведенного перечня можно выделить группу параметров, непосредственно относящихся к режиму процесса выращивания и прямо или косвенно влияющих на появление критической ситуации (13...23). Остальные величины учитываются при принятии решения по выходу из нештатных ситуаций [6].

Следующим этапом является группировка параметров по отношению к ситуациям. Под группировкой мы понимаем разделение однородной совокупности наблюдений на группы по какому-либо диагностическому признаку. Группировка позволяет устранить аномальные наблюдения, выделить интервалы значений параметров и использовать экспертные оценки влияния признаков на распознавание классов.

Первоначально исходный набор параметров был рассмотрен экспертами на качественном уровне. Каждый параметр, выделенный на этапе качественного анализа, рассматривается экспертами с применением метода парных сравнений на предмет его значимости при диагностике ситуаций. Матрица парных сравнений формируется по набору параметров, отобранных экспертами. Количество матриц парных сравнений соответствует количеству классов ситуаций. Результат – ранжировка параметров по их важности при оценке всех указанных в словаре ситуаций. Для реализации метода парных сравнений была разрабо-

тана программа, інтерфейс которой показан на рис. 5.1.

Программа реализует следующие функции:

- введеие експертних даних;
- вычисление результатов сравнений критериев и альтернатив;
- получение результата в виде таблицы, которая содержит весовые коэффициенты альтернатив.

Результаты группировки первичных параметров по их влиянию на ту или иную ситуацию показаны в табл. 5.1.

Метод парних порівнянь

Введіть кількість ознак-альтернатив

Введіть кількість ситуацій-критеріїв

Проведіть попарні порівняння першого критерію з іншими за 9-ти бальною шкалою Сааті::
 1- перевага відсутня;
 3- незначна перевага;
 5- суттєва перевага;
 7- значна перевага;
 9- абсолютна перевага.

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1	2	2	4	5	4	7	6

Проведіть попарні порівняння першої альтернативи з іншими за усіма критеріями, використовуючи 9-ти бальну шкалу Сааті.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1 кр	1								
2 кр	1								

Рисунок 5.1 – Інтерфейс програми обробки експертних оценок

Таблица 5.1 – Группировка первичных параметров

	Ситуация	Первичные параметры процесса
1	Штатная ситуация	13...23
2	Растет вероятность отклонения диаметра слитка за пределы допуска	18, 19
3	Отклонение диаметра за пределы допуска	18, 19
4	Растет вероятность увеличения плотности дислокаций	23
5	Вероятность недопустимого увеличения плотности дислокаций превысила заданный порог	23
6	Растет вероятность замедления или остановки процесса кристаллизации	23
7	Растет вероятность повышения нестабильности значения радиуса слитка, риск разложения кристалла	23
8	Неисправность в АСУ ТП	13...19

Номера параметров указаны в перечне (стр. 178...179). Некоторые параметры необходимо рассмотреть в совокупности и в динамике протекания процесса выращивания. Так, параметры 18 и 19 (текущее значение диаметра слитка и текущее значение уставки диаметра слитка) необходимо объединить в один параметр – “текущее значение отклонения диаметра слитка от уставки”. Параметры 13 и 14 («Текущее значение уставки температуры основного нагревателя °С» и «Текущее значение температуры основного нагревателя, °С») необходимо объединить в параметр «текущее значение отклонения температуры основного нагревателя от уставки». Параметры 15 и 16 («Текущее значение уставки температуры фоновго нагревателя °С» и «Текущее значение температуры фоновго нагревателя, °С») – в параметр «Текущее значение отклонения температуры фоновго нагревателя от уставки».

Далее, необходимо учесть, что для диагностики ситуаций важны не текущие значения некоторых параметров, а тенденции их изменения как признаки перехода в другой режим или ситуацию. К таким признакам относятся: тенденция отклонения диаметра слитка; тенденция отклонения температуры основного

и фонового нагревателей; тенденция отклонения скорости вытягивания.

Формирование словаря признаков. Разработка моделей и процедур преобразования значений первичных параметров в значения признаков. После формирования пространства первичных параметров необходимо сформировать пространство признаков (словарь признаков) и реализовать преобразование измеренных значений в значения признаков.

Ниже приведен перечень признаков ситуаций, модели и процедуры вычисления их значений, а также их градации на уровне лингвистических оценок (термов). На первом этапе осуществляется нормирование параметров к интервалу $[0,1]$ при помощи линейного преобразования $x' = (x - x_{min}) / (x_{max} - x_{min})$. При этом значения x_{min} и x_{max} по каждому параметру задает эксперт.

1. *Отклонение текущего значения диаметра слитка.* Для отслеживания тенденции изменения диаметра воспользуемся моделью скользящего среднего на предыдущих временных интервалах измерения. Модель преобразования выбрана линейной, вида:

$$X1 = (\Delta D[t-2] + \Delta D[t-1] + \Delta D[t]) / 3, \quad (5.3)$$

где $\Delta D[t-2]$, $\Delta D[t-1]$, $\Delta D[t]$ – вычисленные значения ухода на временных точках $t-2$, $t-1$ и t соответственно. Термы: “малое”, “среднее”, “большое”.

2. *Отклонение температуры основного нагревателя.* По аналогии с выражением (5.3) запишем:

$$X2 = (\Delta T_{он}[t-2] + \Delta T_{он}[t-1] + \Delta T_{он}[t]) / 3. \quad (5.4)$$

Термы: “малое”, “среднее”, “большое”.

3. *Отклонение температуры фонового нагревателя:*

$$X3 = (\Delta T_{фн}[t-2] + \Delta T_{фн}[t-1] + \Delta T_{фн}[t]) / 3. \quad (5.5)$$

Термы: “малое”, “среднее”, “большое”.

4. *Отклонение скорости вытягивания:*

$$X4 = (\Delta V[t-2] + \Delta V[t-1] + \Delta V[t])/3. \quad (5.6)$$

Термы: “малое”, “среднее”, “большое”.

5. *Радиальный градиент GR1* (на уровне +1см над уровнем расплава). Значения признака в термах: “низкий”; “пониженный”; “нормальный”; “повышенный”; “высокий”.

6. *Осевой градиент на фронте кристаллизации GZF*. Значения признака в термах: “низкий”, “нормальный”.

7. *Осевой градиент в слитке (на уровнях от 1 см до 12 см) GZM*. Для измерения выбирается максимальное значение G_{zmax} из массива градиентов, $GZ[1..12]$ и нормируется. Значения признака в термах: “нормальный”, “высокий”.

8. *Неравномерность осевого градиента в слитке U (на уровнях от 1 см до 12 см)*. Для измерения неравномерности производим следующие действия:

1. Вычисляется средний градиент на длине слитка (1...12 см) G_{z0} .

2. Максимальное значение осевого градиента соотносится со средним значением и вычисляется значение неравномерности (unevenness):

$$U = (1 - \frac{G_{z0}}{G_{zmax}}) . \quad (5.7)$$

Полученная величина интерпретируется в термах: “нормальная”, “высокая”.

Для каждого из указанных лингвистических значений должны быть определены «кластеры» – базовые диапазоны четких значений или их центры, если выбрана треугольная функция принадлежности.

С учетом предыдущих результатов составим правила <комплексы признаков> → <диагностируемые ситуации>:

1. ЕСЛИ <Отклонение диаметра малое> И <Отклонение температуры ОН малое> И <Отклонение температуры ФН малое> <Отклонение скорости вытяги-

вания *малое*>И<Радиальный градиент на уровне +1 *в норме*>И<Осевой градиент на ФК *в норме*>И<Осевой градиент в слитке *в норме*>И<Неравномерность осевого градиента в слитке *в норме*>ТО <Ситуация штатная>.

2. ЕСЛИ <Отклонение диаметра слитка *среднее*> И <Отклонение температуры ОН *среднее*> И <Отклонение температуры ФН *среднее*> И <отклонения диаметра и температуры имеют разные знаки> ТО <Растет риск ухода диаметра за пределы допуска (критическая ситуация)>.

3. ЕСЛИ <Отклонение диаметра слитка *большое*>ТО <Диаметр за пределами допуска (нештатная ситуация)>

4. ЕСЛИ <Радиальный градиент на уровне +1 *повышенный*> ИЛИ <Осевой градиент в слитке *большой*>ИЛИ <Неравномерность осевого градиента в слитке *высокая*>ТО <Растет риск увеличения плотности дислокаций (критическая ситуация)>

5. ЕСЛИ <Радиальный градиент на уровне +1 *высокий*> И <Осевой градиент в слитке *большой*>И <Неравномерность осевого градиента в слитке *высокая*>ТО <Вероятность недопустимого увеличения плотности дислокаций превысила заданный порог (срыв процесса, штатная ситуация)>.

6. ЕСЛИ <Осевой градиент на фронте кристаллизации *низкий*>ТО <Риск замедления или остановки процесса кристаллизации (критическая ситуация)>

7. ЕСЛИ <Радиальный градиент на уровне +1, *низкий*>ТО<Растет риск повышения нестабильности значения радиуса слитка, риск разложения кристалла (критическая ситуация)>.

8. ЕСЛИ <Отклонение диаметра слитка *среднее (+)*>И (<Отклонение температуры основного нагревателя *среднее (+)*>ИЛИ <Отклонение температуры фонового нагревателя *среднее (+)*>ИЛИ <Отклонение скорости вытягивания *среднее (+)*>) ИЛИ <Отклонение диаметра слитка *среднее (-)*>И (<Отклонение температуры основного нагревателя *среднее (-)*>ИЛИ <Отклонение температуры фонового нагревателя *среднее (-)*>ИЛИ <Отклонение скорости вытягивания *среднее (-)*>) ТО <Неисправность в измерительной системе АСУ

ТП (нештатная ситуация)>. (Тенденция увеличения/уменьшения диаметра на фоне стабильных или увеличивающихся/уменьшающихся показаний температуры Тон, Тфн, или скорости вытягивания говорит о неисправности АСУ ТП).

Кластеризация признаков. На следующем этапе была проведена итерационная человеко-машинная процедура одномерной кластеризации признаков с целью первичного определения границ и центров диапазонов, определяющих влияние параметра на распознавание класса ситуации. Для этого использовался метод кластеризации, описанный в работах [219, 234]. Метод обеспечивает разбиение пространства признаков на произвольное количество кластеров с учетом установленной меры плотности.

Введём следующие условные обозначения. Пусть существует n -мерное пространство признаков. Обозначим оси координат $O = \{o_1, o_2, \dots, o_i, \dots, o_n\}$, ($i = 1 \dots n$). В пространстве находится m точек, каждая из которых отображает один объект генеральной совокупности X с координатами по оси с номером i ($x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ik}, \dots, x_{im}$) ($k = 1 \dots m$).

Поскольку критерием выступает расстояние, то кластером называют группу точек Ω такую, что средний квадрат внутригруппового расстояния до центра группы меньше среднего квадрата расстояния s^2 (дисперсии) до общего центра в исходном множестве объектов мощности N [2], т.е.

$$\bar{d}_{\Omega}^2 < s^2, \quad (5.8)$$

$$\text{где } \bar{d}_{\Omega}^2 = \frac{1}{N_{\Omega}} \sum_{x_i \in \Omega} (x_i - \bar{x}_{\Omega})^2, \quad \bar{x}_{\Omega} = \frac{1}{N_{\Omega}} \sum_{x_i \in \Omega} x_i, \quad N_{\Omega} = |\Omega|. \quad (5.9)$$

Для каждой оси пространства признаков выполняются следующие действия:

1. Пользователь задает предполагаемое количество кластеров K .
2. Выполняется нормирование пространства признаков.
3. Выполняется расчет плотности расположения точек по каждой коор-

динате пространства признаков.

4. Выполняется расчет среднего расстояния r_i между двумя соседними точками на выбранной оси, где i – номер оси:

$$r_i = \frac{1}{m-1} \sum_{t=2}^m d_t \quad , \quad (5.10)$$

где $d_t = (x_t - x_{t-1})$; t – порядковый номер точки на оси i по возрастанию значения координаты, $t=1...m$.

4. Выполняется расчет степени неравномерности распределения точек на каждой i -й оси (дисперсия плотности):

$$s_i^2 = \frac{1}{m} \sum_{k=2}^m (d_{ik} - r_i)^2 \quad . \quad (5.11)$$

5. Выполняется процедура распределения точек по кластерам для каждой i -й оси. При описании данной процедуры индекс оси (i) будем опускать. Обозначим кластеры G_j , где j – порядковый номер кластера, $j=1...m$. Точку x_1 сразу отнесём к кластеру G_1 . После этого необходимо циклически выполнить $m-1$ следующих итераций:

5.1. Рассчитывается расстояние $d_t = x_t - x_{t-1}$ между точками x_t и x_{t-1} , ($t=2...m$), так как точка x_1 уже находится в кластере G_1 .

5.2. Если $d_t < \alpha_i r_i$, (α_i коэффициент, определяющий порог плотности кластеров), то точка x_t относится к той же группе G_j , что и точка x_{t-1} иначе кластер G_j считается укомплектованным. Состав этого кластера фиксируется, и точка x_t становится первой точкой в новом кластере G_{j+1} , после чего t увеличивается на 1 и выполняется следующая итерация.

6. Как результат обработки данных на оси i получаем некоторое количество кластеров, в которых плотность превышает среднюю плотность по оси. Список кластеров, их плотность и их границы по всем осям координат выводятся для пользователя в табличном виде.

После выполнения шага 6 для каждой оси координат пространства признаков получим некоторое количество K' кластеров, которые и будут предположительно являться результатом кластеризации. Если полученное число кластеров $K' \neq K$, пользователь может запустить процесс кластеризации в цикле, в котором будут изменяться коэффициенты α_i , влияющие на пороговые плотности распределения точек в кластерах.

Для окончательного уточнения границ кластеров использовалась процедура экспертного оценивания.

1. Значение границы предъявляется группе экспертов. Каждый эксперт уточняет это значение, в результате чего образуется диапазон значений $[x_{bmin}, x_{bmax}]$.

2. Для полученного диапазона $[x_{bmin}, x_{bmax}]$ производится расчет среднего значения $x_{bmin} < x_b < x_{bmax}$ в качестве новой исходной границы кластера. Если полученное значение отличается от предыдущего менее, чем на заданную величину ε , то граничная точка найдена. Иначе переход к п. 1.

Значение ε выбирается таким, чтобы границы кластеров перекрывались. Это обеспечивает непрерывность нечетких функций оценки признака. Далее по такой же методике были определены координаты центров кластеров. Результаты кластеризации (с учетом нормирования) приведены в табл. 5.2.

Выбор типа моделей распознавания. Для определения возможности применения методов статистики при решении задач диагностики процесса выращивания были проанализированы данные о процессах выращивания монокристаллов арсенида галлия и кремния за 2010–2013 годы. Эти данные представляют собой электронные таблицы фиксируемых измерительной системой значений параметров температуры (температура основного и фонового нагревателей) и значений диаметра слитка. Кроме того, имеются данные о значениях градиентов температуры по оси слитка. Данные были сгруппированы по диаметрам выращиваемых монокристаллов и по материалу (GaAs и Si).

Ретроспективный анализ имеющихся данных показал следующее:

1. Коэффициент вариации выборок составляет 34...39%.

2. Наблюдается неравномерность дисперсии остатков при попытках построения регрессионной модели. Между некоторыми признаками имеется корреляция.

3. Выборки содержат «аномальные» значения, которые с большой частотой совпадают со срывами процесса выращивания.

4. Имеются значительные пропуски данных, которые невозможно восстановить традиционными методами.

Таблица 5.2 – Границы и координаты центров кластеров

№	Наименование признака	Наименование кластера	Левая граница	Центр	Правая граница
1.	Отклонение диаметра (абс. величина)	Малое	0,0	0,14	0,33
		Среднее	0,30	0,44	0,56
		Большое	0,50	0,78	1,0
2.	Отклонение температуры основного нагревателя	Малое	0,0	0,15	0,36
		Среднее	0,32	0,51	0,66
		Большое	0,63	0,82	1,0
3.	Отклонение температуры фонового нагревателя	Малое	0,0	0,15	0,34
		Среднее	0,30	0,52	0,72
		Большое	0,68	0,87	1,0
4.	Отклонение скорости вытягивания	Малое	0,0	0,16	0,35
		Среднее	0,31	0,51	0,67
		Большое	0,62	0,76	1,0
5.	Радиальный градиент на уровне +1 см	Низкий	0,0	0,11	0,23
		Пониженный	0,20	0,31	0,43
		Нормальный	0,41	0,51	0,65
		Повышенный	0,62	0,71	0,78
		Высокий	0,69	0,88	1,0
6.	Осевой градиент на фронте кристаллизации.	Низкий	0,0	0,23	0,55
		Нормальный	0,51	0,81	1,0
7.	Осевой градиент в слитке	Нормальный	0,0	0,27	0,59
		Высокий	0,65	0,81	1,0
8.	Неравномерность осевого градиента в слитке	Нормальная	0,0	0,24	0,57
		Высокая	0,58	0,79	1,0

Таким образом, решение задач диагностирования процесса выращи-

ния наталкивается на проблему неопределенности, которая заключается в практическом отсутствии статистической устойчивости в имеющихся экспериментальных данных. Это ставит под сомнение степень доверия к моделям, построенным методами теории вероятностей и математической статистики.

Учитывая данные обстоятельства, можно сделать вывод, что для формализации соответствующей модели распознавания и прогнозирования имеет смысл использовать модульные, иерархические нечеткие или гибридные нейро-нечеткие модели [235]. Для адекватного отображения знаний необходимо определить "области компетенции" отдельных моделей, внутри которых дисперсия ошибки сравнительно стабильна. Для разработки указанных моделей необходимо подготовить базу знаний (БЗ) по ППОР на основе той информации, которой располагают разработчики.

Разработка модели распознавания и базы знаний для диагностики и выработки рекомендаций. Для решения задач распознавания и диагностики при отсутствии статистической устойчивости данных широко используются нейросетевые модели, модели нечеткой логики и гибридные модели [24, 25, 143–147]. Наиболее часто используются многослойные персептроны. Однако для их обучения необходимо иметь значительное количество примеров. В данном случае примеры могут предоставить только эксперты, поэтому количество примеров ограничено. Упростить обучение НС можно, используя экспертные оценки субъективных вероятностей, как это предложено в работе [220], или используя RBF-сеть. Выходы НС могут быть подвергнуты нечеткой интерпретации, как это предложено в работе [221]. Однако в рассматриваемом случае экспертная информация ограничена знанием определённых диапазонов рабочих параметров процесса и её интерпретация в смысле субъективных вероятностей наступления критической ситуации вызывает сомнения. Поэтому в качестве основы выбрана нечеткая модель классификации, которая хорошо зарекомендовала себя в решении задач распознавания при отсутствии свойства сепарабельности у кластеров. Кластеризация признаков и предварительная формулировка правил обеспечивают логическую прозрачность модели.

На первом этапе разработки модели распознавания построим функции принадлежности (ФП) для указанных выше лингвистических переменных. Основными условиями, которым должна удовлетворять «разумно построенная система ФП», являются [143]:

1. Условия нормальности:

$$\forall j = 1..m_i, \max_{[a_{ij}, b_{ij}]} \mu_{ij}(x_i) = 1. \quad (5.12)$$

2. Условие полноты: каждая точка шкалы строго включается хотя бы в один терм:

$$\forall x_i \in [a_i, b_i] \max_{j=1, m_i} \mu_{ij}(x_i) = 1. \quad (5.13)$$

Пример распределения функций принадлежности, отвечающих приведенным выше условиям, показан на рис. 5.2.

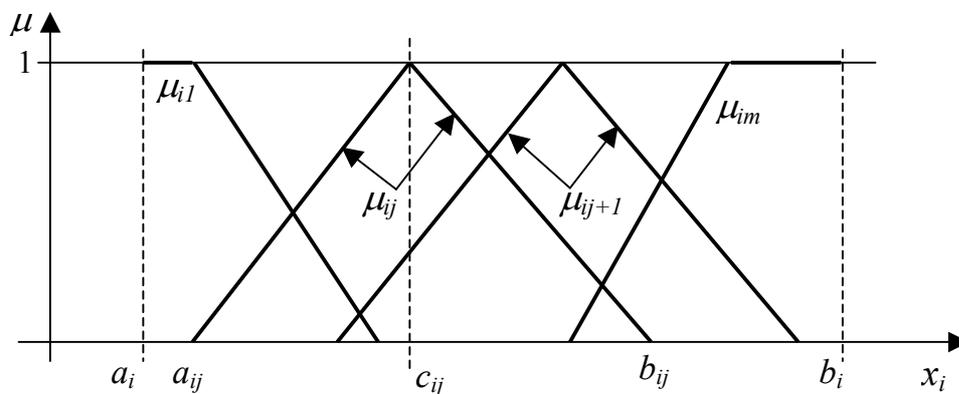


Рисунок 5.2 – Возможный вид функций принадлежности

Построение матрицы знаний для диагностики процесса выращивания.

Базу знаний для реализации нечеткой модели распознавания можно трактовать как разбиение пространства влияющих факторов на зоны с размытыми границами, внутри которых функция отклика принимает некоторое нечеткое значение. Количество таких нечетких зон равно числу правил. В процессе кластеризации было обнаружено, что плотности разных кластеров одного и того же

признака различны. Другими словами, различна информативность признаков по отношению к каждому правилу. Согласно [222] признак x_n , $1 \leq n \leq N$ полезен в совокупности с другими $N-1$ признаками, если при его исключении из набора $X(x_1 \dots x_N)$ происходит уменьшение средней вероятности ошибки распознавания [222]. На основании этого утверждения индивидуализируем значимость элементарных посылок антецедентов для каждого правила. В данном случае это не вызовет противоречий в БЗ, так как у каждого правила своя «область компетенции».

В работе [223] была предложена структура нечеткой модели, обеспечивающая возможность одновременной настройки базы правил и параметров функций принадлежности нечетких множеств, что потенциально сокращает время на обучение системы распознавания. Однако если параметры ФП были выбраны путём кластеризации и экспертных оценок, то индивидуальная настройка значимости каждой посылки антецедента каждого правила представляется более предпочтительной.

С учетом того, что базовые подмножества (кластеры), соответствующие «областям компетенции» правил, уже сформированы экспертами, введём весовые коэффициенты w^i для каждой элементарной посылки в каждом правиле. Значения коэффициентов ограничим диапазоном $[0,5 \dots 1]$. При этом единичное значение эквивалентно стопроцентной значимости посылки.

Построим структуру БЗ для распознавания ситуаций. Если количество признаков ситуаций n , а число ситуаций m , то, с учетом введения коэффициентов w^i , структура базы нечетких знаний в общем виде может быть представлена в виде таблицы 5.3.

Элемент $A_i^{j_{kj}}$, находящийся на пересечении i -го столбца и j_{kj} -й строки соответствует лингвистической оценке параметра x_i в строке матрицы знаний с номером j_{kj} . Лингвистическую оценку $A_i^{j_{kj}}$ выбираем из терм-множеств, которые соответствуют переменной x_i , описывающей состояние процесса, т.е.

$A_i^{jkj} \in T_i, i = \overline{1, n}, j = \overline{1, m}, p = \overline{1, k_j}$. Множество ситуаций S , ранжированных по степени критичности, предъявляется ЛПР вместе с соответствующими рекомендациями. ЛПР принимает окончательное решение о выборе управляющих воздействий.

Таблица 5.3 – Структура базы нечетких знаний по распознаванию ситуаций

№, п/п	Входные переменные и коэффициенты значимости элементарных посылок								Выходная переменная
	x_1		x_2		... x_i ...		x_n		
1_1	A_1^{11}	w_1^{11}	A_2^{11}	w_2^{11}	A_i^{11}	w_i^{11}	A_n^{11}	w_n^{11}	d_1
1_2	A_1^{12}	w_1^{12}	A_2^{12}	w_2^{12}	A_i^{12}	w_i^{12}	A_n^{12}	w_n^{12}	
...		
1_{kl}	$A_1^{1k_1}$	$w_1^{1k_1}$	$A_2^{1k_1}$	$w_2^{1k_1}$	$A_i^{1k_1}$	$w_i^{1k_1}$	$A_n^{1k_1}$	$w_n^{1k_1}$	
...
j_1	A_1^{j1}	w_1^{j1}	A_2^{j1}	w_2^{j1}	A_i^{j1}	w_i^{j1}	A_n^{j1}	w_n^{j1}	d_j
j_2	A_1^{j2}	w_1^{j2}	A_2^{j2}	w_2^{j2}	A_i^{j2}	w_i^{j2}	A_n^{j2}	w_n^{j2}	
...		
j_{kj}	$A_1^{jk_j}$	$w_1^{jk_j}$	$A_2^{jk_j}$	$w_2^{jk_j}$	$A_i^{jk_j}$	$w_i^{jk_j}$	$A_n^{jk_j}$	$w_n^{jk_j}$	
...
m_1	A_1^{m1}	w_1^{m1}	A_2^{m1}	w_2^{m1}	A_i^{m1}	w_i^{m1}	A_n^{m1}	w_n^{m1}	d_m
m_2	A_1^{m2}	w_1^{m2}	A_2^{m2}	w_2^{m2}	A_i^{m2}	w_i^{m2}	A_n^{m2}	w_n^{m2}	
...		
m_{km}	$A_1^{mk_m}$	$w_1^{mk_m}$	$A_2^{mk_m}$	$w_2^{mk_m}$	$A_i^{mk_m}$	$w_i^{mk_m}$	$A_n^{mk_m}$	$w_n^{mk_m}$	

Таким образом, предлагаемая адаптивная модель для распознавания ситуаций с учетом результатов фаззификации входного вектора X^* для всех значений $d_j \in D, j=1..m$ выходной переменной выглядит следующим образом [224]:

$$\bigcup_{p=1}^{k_j} \bigcap_{i=1}^n \left[(x_i = A_i^{jp}) w_i^{jk_p} \right] \rightarrow d_j, \quad (5.14)$$

где d_j – диагностический вывод по текущей ситуации.

При этом логические операции И (\wedge) и ИЛИ (\vee) над значениями функ-

ций принадлежности заменяются операциями *min* и *max*.

$$\mu(a) \wedge \mu(b) = \min[\mu(a), \mu(b)],$$

$$\mu(a) \vee \mu(b) = \max[\mu(a), \mu(b)].$$

База знаний по распознаванию ситуаций показана в табл. 5.4

Таблица 5.4 – База нечетких знаний по распознаванию ситуаций

№	Входные переменные								Ситуация
	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	
1 ₁	<i>малое</i>	<i>малое</i>	<i>малое</i>	<i>малое</i>	<i>в норме</i>	<i>в норме</i>	<i>в норме</i>	<i>в норме</i>	S1
2 ₁	<i>среднее</i>	<i>среднее</i>	<i>среднее</i>	1	1	1	1	1	S2
3 ₁	<i>большое</i>	1	1	1	1	1	1	1	S3
4 ₁	1	1	1	1	<i>повыш.</i>	1	1	1	S4
4 ₂	1	1	1	1	1	1	<i>высокий</i>	1	
4 ₃	1	1	1	1	1	1	1	<i>высокая</i>	
5 ₁	1	<i>большое</i>	1	1	<i>высокий</i>	1	1	<i>высокая</i>	S5
6 ₁	1	1	1	1	1	<i>низкий</i>	1	1	S6
7 ₁	1	1	1	1	<i>низкий</i>	1	1	1	S7
8 ₁	<i>среднее +</i>	<i>среднее +</i>	1	1	1	1	1	1	S8
8 ₂	<i>среднее +</i>	1	<i>среднее +</i>	1	1	1	1	1	
8 ₃	<i>среднее +</i>	1	1	<i>среднее +</i>	1	1	1	1	
8 ₄	<i>среднее –</i>	<i>среднее –</i>	1	1	1	1	1	1	
8 ₅	<i>среднее –</i>	1	<i>среднее –</i>	1	1	1	1	1	
8 ₆	<i>среднее –</i>	1	1	<i>среднее –</i>	1	1	1	1	

Процедура обучения модели описана в подразделе 5.3.

Определение степени критичности ситуации. Диагностика ситуации предполагает определение степени критичности. На первом этапе процедуры определения критичности для каждого признака x_i из правила, определяющего ситуацию s , фиксируется значение x_i^* как расстояние от центра кластера номинального режима до текущей рабочей точки. На втором этапе вычисляется степень критичности как взвешенная сумма значений признаков [224]:

$$K_s = \sum_{i=1}^{n_s} \alpha_i x_i^* , \quad (5.15)$$

где α_i – весовой коэффициент значимости признака с точки зрения критичности ситуации. Для оценивания значимости признаков в конкретных ситуациях использовался метод парных сравнений.

На третьем этапе для лингвистической оценки критичности ситуации используется лингвистическая переменная с тремя значениями: «Малая» (в центре кластера номинального режима); «Средняя» – в центре кластера критического режима; «Высокая» – от критической зоны и выше. Нечеткая шкала оценки степени критичности приведена на рис. 5.3.

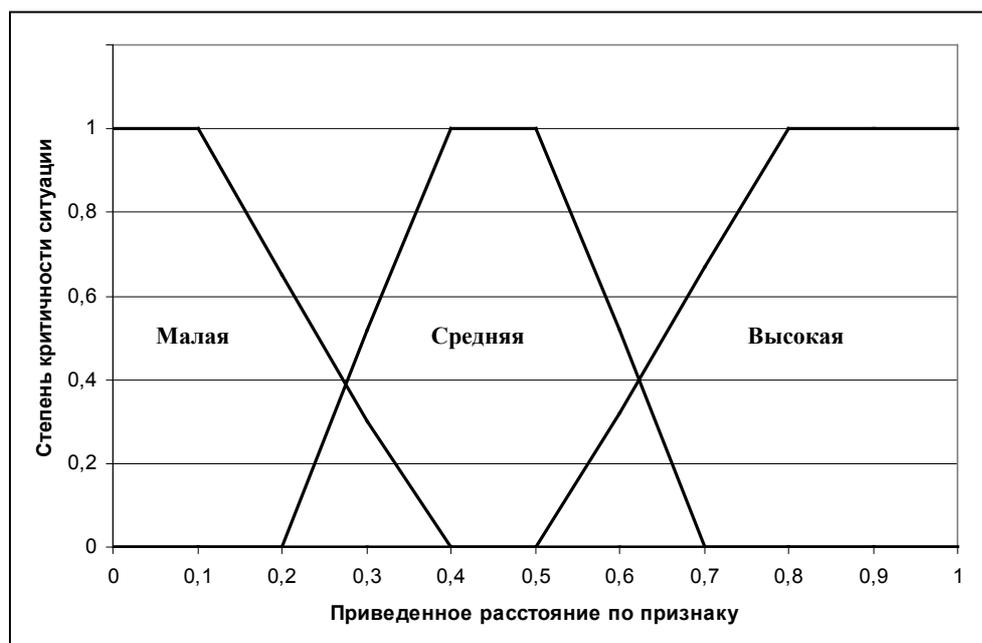


Рисунок 5.3 – Лингвистические оценки степени критичности ситуаций

После распознавания ситуации и оценки её критичности СППР должна выдать рекомендацию по коррекции режима процесса выращивания.

Построение базы знаний для поддержки принятия решений. Рассмотренные выше ситуации имеют две категории – критические и нештатные. В данной работе рассматривается коррекция критических ситуаций.

Рекомендации по выходу из нештатных ситуаций основываются на анализе множества технических и технико-экономических показателей и здесь не рассматриваются. Сформулируем рекомендации оператору в критических ситуациях.

1. Растет вероятность отклонения диаметра за пределы допуска

Как показано в [217], причины ухода диаметра связаны либо с изменением тепловых условий, либо с неконтролируемым изменением величины скорости вытягивания затравки. Если изменение диаметра вызвано отказом элементов АСУТП, силовых элементов питания нагревателя или привода подъема затравки, то ситуация быстро перейдет в нештатную. Однако даже при исправных системах контроля и управления по мере роста монокристалла и изменении уровня расплава хаотически изменяются конвекционные потоки в расплаве и это невозможно учесть в “классических” моделях и алгоритмах управления. Поэтому оператору необходимо вначале проверить стабильность температур нагревателей и скорости вытягивания и, если эти параметры в норме, скорректировать уставку температуры одного или обоих нагревателей. Коррекция уставки должна соответствовать измеренному уходу температуры за последний период измерения. Это объясняется тем, что скорость и самопроизвольного и принудительного изменения температуры зависит только от тепловой постоянной нагревателя. Таким образом, можно сформулировать рекомендацию в ситуации 2 – “Растет риск ухода диаметра за пределы допуска”: <“Проверить стабильность T_{OH} и $T_{ФН}$ и при необходимости изменить уставку T_{OH} или $T_{ФН}$ на величину ухода температуры с обратным знаком”>.

2. Растет вероятность увеличения плотности дислокаций (критическая си-

туация).

Причинами увеличения плотности дислокаций могут быть:

а). Повышенный радиальный градиент на уровне +1 см. Причиной повышения радиального градиента в слитке на уровне герметизатора может быть заниженная (в данных тепловых условиях) температуры фонового нагревателя, который находится непосредственно под слоем герметизатора. Таким образом, при сигнале “Радиальный градиент на уровне +1 *повышенный*” необходимо изменить уставку температуры ФН в сторону увеличения на 5...10%.

б). Большой осевой градиент в слитке или высокая неравномерность осевого градиента в слитке. Неблагоприятная ситуация по осевым градиентам в слитке является следствием неправильного размещения теплового экрана, окружающего остывающий слиток. Исправить ситуацию путем изменения температуры нагревателей можно примерно в 20% случаев. Кроме того, можно рекомендовать уменьшить температуру основного нагревателя на 5...10%. В любом случае подсистема ППОРП должна обеспечить регистрацию данного события, чтобы технологи произвели расчет оптимальных размеров и положения теплового экрана для данного диаметра слитка и данной конструкции теплового узла. Таким образом, сформулируем рекомендацию в ситуации 2: “Неправильная экранировка слитка. Уменьшить температуру основного нагревателя на 5...10%.”

3. Растет вероятность замедления или остановка процесса кристаллизации. Причина – низкий осевой градиент на фронте кристаллизации. Также как и в предыдущей ситуации, чаще всего причиной является неправильная экранировка слитка. Однако в данном случае рекомендуется умеренно повышать температуру основного нагревателя. Формулировка рекомендации: “Неправильная экранировка слитка. Увеличить температуру основного нагревателя на 5...10%.”

4. Растет вероятность повышения нестабильности значения радиуса слитка, риск двойникования, риск разложения кристалла. Причины – Низ-

кий радиальный градиент на уровне +1 см. Устраняется ситуация уменьшением температуры ФН.

Формулировка рекомендации: “необходимо изменить уставку температуры ФН в сторону увеличения на 5...10%.”

Для определения структуры базы знаний по выдаче рекомендаций сформулируем правила выдачи каждой рекомендации (advise). Номера рекомендаций совпадают с номерами ситуаций:

A1. Ситуация штатная (S_1). Рекомендаций нет.

A2. ЕСЛИ <Растет риск ухода диаметра за пределы допуска (S_2)>, ТО <Проверить стабильность T_{OH} и $T_{ФН}$. При необходимости изменить уставку T_{OH} на величину ухода температуры с обратным знаком>.

A4.1. ЕСЛИ <Растет риск увеличения плотности дислокаций (S_4)> И <Повышен радиальный градиент на уровне +1 см> ТО <Изменить уставку температуры ФН в сторону увеличения на 5...10%>.

A4.2. ЕСЛИ <Растет вероятность увеличения плотности дислокаций (S_4)> И (<Большой осевой градиент в слитке> ИЛИ <Высокая неравномерность осевого градиента в слитке>) ТО <Неправильная экранировка слитка. Уменьшить температуру основного нагревателя на 5...10%>.

A6. ЕСЛИ <Растет вероятность замедления или остановки процесса кристаллизации (S_6)> ТО <Неправильная экранировка слитка. Увеличить температуру основного нагревателя на 5...10%>.

A7. ЕСЛИ <Растет вероятность повышения нестабильности значения радиуса слитка, риск двойникования, риск разложения кристалла (S_7)> ТО <Необходимо изменить уставку температуры ФН в сторону увеличения на 5...10%>.

Правила A2, A6, A7 имеют элементарную структуру. Правила A4 имеют ссылки на термины из базы знаний по диагностике процесса. Следовательно, база знаний СППР должна иметь иерархическую структуру.

Оператор принимает и реализует рекомендации, если степень критичности ситуаций средняя или высокая. Если у двух ситуаций степень критичности

одинакова, то необходимо, чтобы СППР выдала рекомендации с учётом совместного появления ситуаций. Появление трех и более критических ситуаций само по себе есть нештатная ситуация и свидетельствует о полной разладке системы мониторинга и управления. Поскольку рекомендации по выходу из нештатных ситуаций здесь не рассматриваются, приведем с пояснениями матрицу попарной совместимости критических ситуаций (табл. 5.5).

Таблица 5.5 – Матрица совместимости ситуаций

	S2	S4	S6	S7
S2	–	A2.4	A2.6	0
S4	–	–	A4.6.x5	1
S6	–	–	–	1
S7	–	–	–	–

Здесь: 1 – совместное появление ситуаций вызывает эквивалентные рекомендации; 0 – при совместном появлении ситуаций необходимо выполнить рекомендации по каждой из них отдельно; A2.4 – совместное появление ситуаций S2 и S4 требует выдачи особой рекомендации; A2.6 – совместное появление ситуаций S2 и S6 требует выдачи особой рекомендации; A4.6.x5 – совместное появление ситуаций S4, S6 и признака x5 требует выдачи особой рекомендации.

A2.4: Уставку ОН не изменять. Уставку температуры ФН увеличить на 5%, если диаметр слитка стабильно растет. Уставку температуры ФН уменьшать на 5% если диаметр слитка стабильно уменьшается.

A2.6: Если $K_{S2} > K_{S6}$, то при уменьшении диаметра слитка уменьшить скорость вытягивания на 5% , а при увеличении диаметра увеличить скорость вытягивания на 5% .

Если $K_{S2} \leq K_{S6}$, то то при уменьшении диаметра слитка уменьшить скорость вытягивания на 5%, а при увеличении диаметра увеличить скорость вытягивания на 5% . В любом случае увеличить на 5% уставку температуры ОН.

A4.6.x5: Увеличить на 5% уставку температуры ФН.

База знаний по выдаче рекомендаций с учетом совместного появления ситуаций показана в табл. 5.6.

Таблица 5.6 – База нечетких знаний по выдаче рекомендаций

№, п/п	Входные переменные		Коэффициент критичности	Формулировка рекомендации
1	$S1$	I	K_{S1} = «малая»	<Ситуация штатная>
2	$S2$	I	K_{S2} = «средняя» ∨ «высокая»	<Проверить стабильность Тон и Тфн. При необходимости изменить уставку ОН или ФН на величину ухода температуры с обратным знаком>
3	$S4$	x_5 = «повышен.»	K_{S3} = «средняя» ∨ «высокая»	<Изменить уставку температуры ФН в сторону увеличения на 5...10%>
4	$S4$	x_7 = «высокий»	K_{S4} = «средняя» ∨ «высокая»	<Неправильная экранировка слитка. Уменьшить температуру основного нагревателя на 5-10%>
	$S4$	x_8 = «высокая»		
5	$S7$	I	K_{S7} = «средняя» ∨ «высокая»	<Необходимо изменить уставку температуры ФН в сторону увеличения на 5...10%>
6	$S6$	I	K_{S6} = «средняя» ∨ «высокая»	<Неправильная экранировка слитка. Увеличить температуру основного нагревателя на 5-10%>
	$S2 \wedge S4$	I	K_{S2} = «средняя» ∨ «высокая» K_{S4} = «средняя» ∨ «высокая»	<Уставку ОН не изменять. Уставку ФН увеличить на 5%, если диаметр слитка стабильно растет. Уставку ФН уменьшать на 5% если диаметр слитка стабильно уменьшается>

Продолжение табл. 5.6

8	$S2 \wedge S6$	I	$K_{S2} > K_{S6}$	<При уменьшении диаметра уменьшить на 5% скорость вытягивания, а при увеличении диаметра увеличить на 5% скорость вытягивания>
9	$S2 \wedge S6$	I	$K_{S2} \leq K_{S6}$	<При уменьшении диаметра уменьшить на 5% скорость вытягивания, а при увеличении диаметра увеличить на 5% скорость вытягивания. В любом случае увеличить на 5% уставку ОН>
10	$S4 \wedge S6$	$x_5 =$ =«повышен.»	K_{S4} =«средняя» \vee «высокая» K_{S6} =«средняя» \vee «высокая»	<Увеличить на 5% уставку ФН>

На рисунке 5.4 приведена структура иерархической базы знаний диагностики и выдачи рекомендаций.

Таким образом, построена адаптивная нечеткая модель распознавания ситуаций (5.14)–(5.15), позволяющая корректировать и пополнять базу знаний и генерировать сообщения и рекомендации по коррекции режима процесса выращивания монокристаллов. Предложенная модель составляет основу СППР по коррекции режима процесса выращивания монокристаллов. В подразделе 5.3 рассматривается задача коррекции базы знаний СППР.

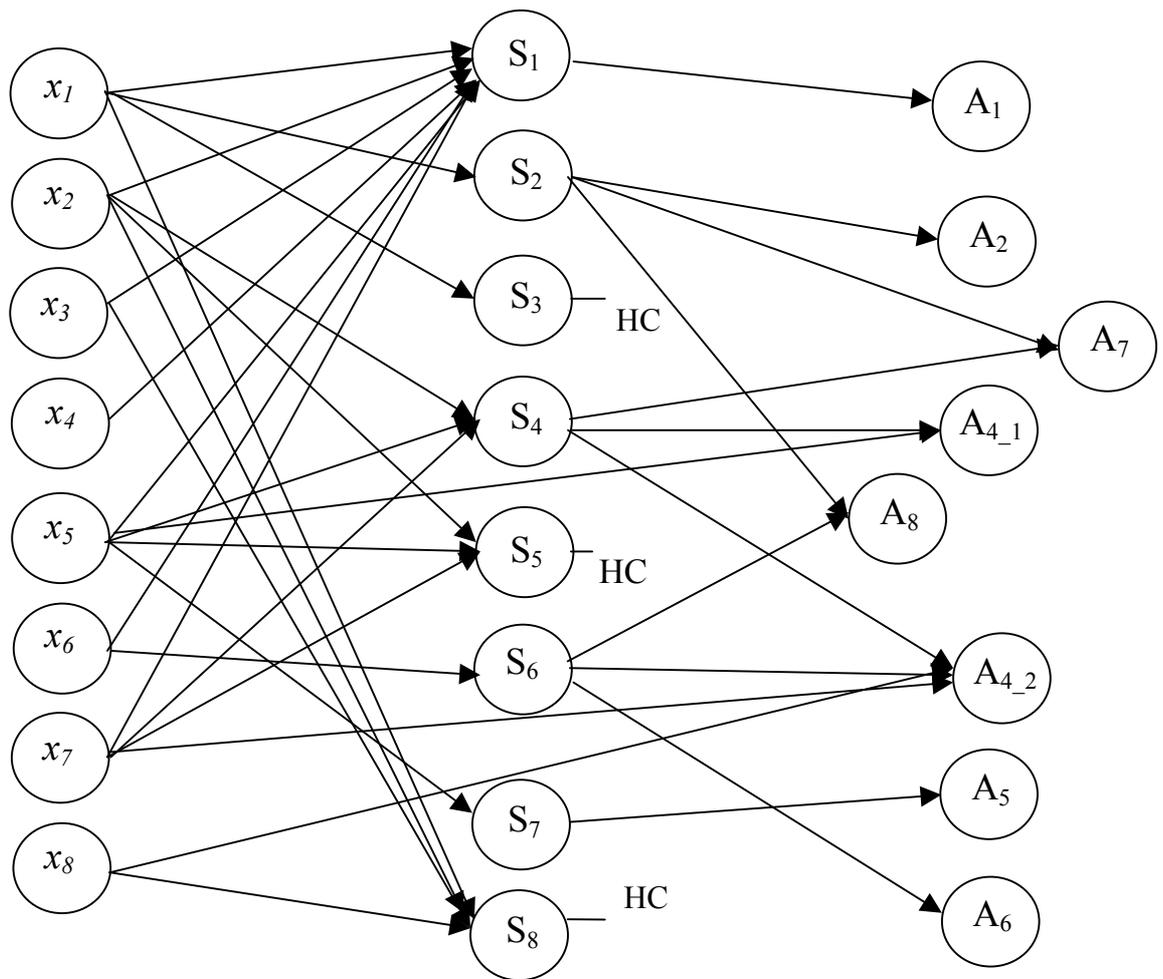


Рисунок 5.4 – Структура иерархической БЗ

5.3. Задачи коррекции базы знаний СППР

Задача обучения и дообучения СППР содержит две подзадачи – пополнения БЗ и коррекции antecedентов правил. Пополнение БЗ происходит, если оператор обнаруживает не учтённую в БЗ критическую (или нестандартную) ситуацию. В течение всего процесса выращивания данные обо всех измеряемых и контролируемых параметрах процесса сохраняются в отдельной таблице БД и после окончания процесса выращивания информация о ходе протекания процесса архивируется. По мере поступления данных о качестве выращенного слитка архив процесса снабжается дополнительным файлом, в котором сохраняется оценка результатов выращивания. По мере накопления архивной информации (по прошествии 20...40

процессов выращивания) оператор даёт команду для обработки накопленных данных. При этом выделяются векторы значений параметров техпроцесса, предшествовавшие возникновению неблагоприятной ситуации. Алгоритм коррекции БЗ приведен в п.п 5.4.

Коррекция весовых коэффициентов элементарных посылок правил осуществляется при подготовке БЗ к использованию в составе СППР, либо по получении новой подвыборки примеров. Каждый пример содержит пару «вход-выход» $\langle X^*, d^* \rangle$, то есть, вектор значений признаков ситуации и номер известной ситуации в качестве шаблона.

Обучение подсистемы ППОР производилось следующим образом. Эксперты (4 чел.), независимо друг от друга, составили таблицу ситуаций, в которую каждый из них внес по 5 примеров для каждой из восьми ситуаций. Таким образом, общая выборка составила 160 примеров. Для настройки использовалось 80 примеров и еще 80 – для последующего тестирования модели.

Подбор значений весовых коэффициентов производился при помощи эволюционного алгоритма, который генерирует популяцию решений, реализует мутацию, отбор и уточнение координат решений-лидеров. На рис. 5.5 показаны результаты испытаний модели до обучения (значения всех весовых коэффициентов равны 1) и после обучения.

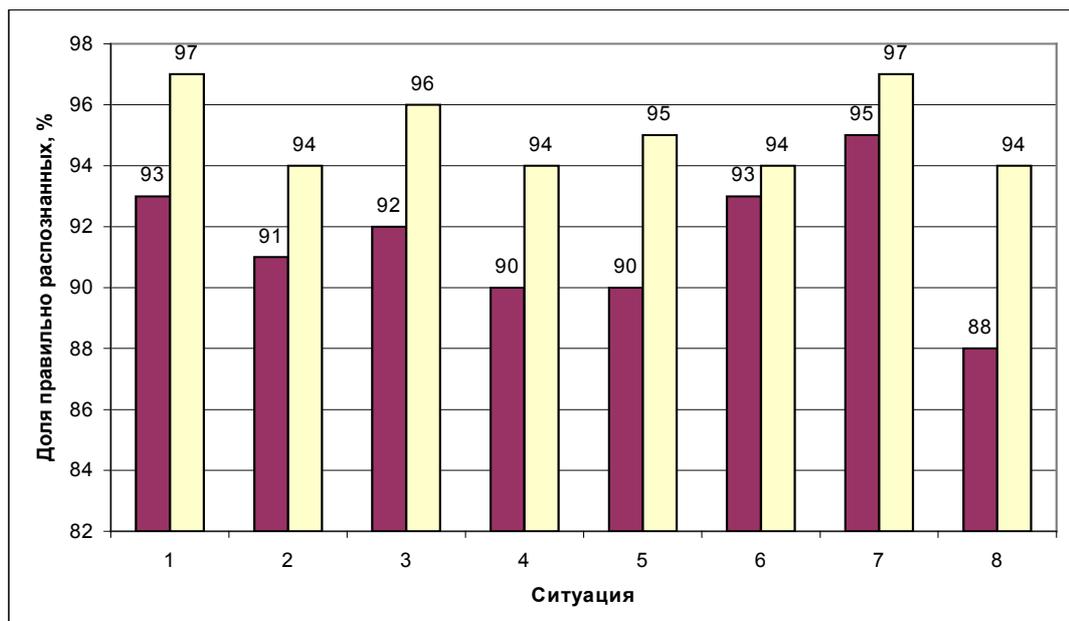


Рисунок 5.5 – Доля распознанных ситуаций до обучения модели и после обучения.

Средняя успешность распознавания ситуаций до обучения составляет 91,5% и после обучения – 95,12%. Уровень риска ошибок первого и второго рода по всем ситуациям считался одинаковым. Дообучение происходит по мере накопления новой подвыборки примеров в процессе эксплуатации подсистемы.

Таким образом, разработан механизм коррекции базы знаний СППР, позволяющий разработать алгоритмы автоматизированной коррекции БЗ.

5.4. Разработка алгоритмов решения задачи диагностики и выдачи рекомендаций

Для решения задачи диагностики ситуаций разработан алгоритм, основанный на следующих положениях. Для объекта диагностики определен центр кластера нормального протекания технологического процесса (НПТП) – наиболее предпочтительный режим ведения процесса выращивания с точки зрения его качества – по всем технологическим параметрам: $S_0 = \{s_{01}^1, s_{02}^2, \dots, s_{0n}^n\}$, где s_{0i}^i – центр кластера для i -го параметра. В процессе исследования режимов функционирования ростовой установки получен набор нечетких типовых состояний процесса $s_i \in \tilde{S}$, ($i \in 1, 2, \dots, N$). Из множества нечетких типовых состояний выделено подмножество состояний $s_{bj} \in \tilde{S}$, где состояния s_{bj} ($j \in 1, 2, \dots, K$) являются критическими с точки зрения нормального протекания процесса и не совпадают с центром кластера НПТП. Таким же образом определяются кластеры нештатных ситуаций – необратимого срыва процесса выращивания. Алгоритму распознавания предшествует алгоритм преобразования первичных параметров процесса в признаки ситуаций. Данный алгоритм состоит из следующих шагов:

ШАГ 1. Фиксация значений первичных параметров процесса – $\Delta D[t-2]$, $\Delta D[t-1]$, $\Delta D[t]$, $\Delta T_{\text{он}}[t-2]$, $\Delta T_{\text{он}}[t-1]$, $\Delta T_{\text{он}}[t]$, $\Delta T_{\text{фн}}[t-2]$, $\Delta T_{\text{фн}}[t-1]$, $\Delta T_{\text{фн}}[t]$, $\Delta V[t-2]$, $\Delta V[t-1]$, $\Delta V[t]$, $GR1$, GZF , $GZ[1..12]$.

ШАГ 2. Расчет тенденции изменения диаметра по выражению (5.3).

ШАГ 3. Расчет тенденции изменения температуры основного нагревателя по выражению (5.4).

ШАГ 4. Расчет тенденции изменения температуры фонового нагревателя по выражению (5.5).

ШАГ 5. Расчет тенденции изменения скорости вытягивания по выражению (5.6).

ШАГ 7. Выбор и фиксация максимального значения в массиве осевых градиентов $GZ[1..12]$.

ШАГ 8. Расчет неравномерности осевого градиента в слитке (на уровнях от 1 см до 12 см) по выражению (5.7).

ШАГ 9. Конец.

Алгоритм распознавания (диагностики) текущего состояния приведен ниже:

ШАГ 1. Фиксация текущих значений признаков ситуаций.

ШАГ 2. Расчет текущих значений степеней принадлежности для признаков ситуаций и фиксация результатов фаззификации в рабочей матрице логического вывода.

ШАГ 3. Вычисление степеней истинности левых частей правил в БЗ диагностики ситуаций с учетом весовых коэффициентов каждой посылки каждого правила.

ШАГ 4. Аккумуляция результатов, полученных на шаге 3. Определение правила, имеющего наибольшую степень истинности.

ШАГ 5. Вычисление числового и лингвистического значения степени критичности ситуации.

ШАГ 6. Генерация сообщения для оператора с указанием текущей ситуации и степени критичности.

ШАГ 7. Конец.

Алгоритм определения и выдачи рекомендаций основан на использовании БЗ нечетких знаний по выдаче рекомендаций (табл. 5.5). Алгоритм состоит из следующих шагов:

ШАГ 1. Фиксация результатов распознавания ситуации.

ШАГ 2. Вычисление степеней истинности левых частей правил в БЗ по выдаче рекомендаций.

ШАГ 3. Определение правила, имеющего наибольшую степень истинности.

ШАГ 4. Выдача рекомендации для оператора установки в соответствии с выбранным правилом.

ШАГ 5. Конец.

Таким образом, в подразделе 5.4 разработаны: алгоритм преобразования первичных данных в признаки ситуаций, алгоритм диагностики ситуаций, алгоритм выдачи рекомендаций. Приведенные выше алгоритмы реализованы в подсистеме «Советчик» (см. раздел 6).

5.5. Разработка алгоритма автоматизированной коррекции базы знаний

База знаний должна быть скорректирована или пополнена в двух случаях:

1. При обнаружении критической или нештатной ситуации, которая не учтена в базе знаний.

2. При обнаружении известной критической или нештатной ситуации, значения признаков которой отличаются от значений признаков, имеющих в БЗ,

Первый случай здесь не рассматривается, так как: а) его вероятность достаточно мала; б) коррекция БЗ в этом случае проводится вручную с последующим тестированием подсистемы «Советчик».

Для второго случая разработан следующий алгоритм [221]:

ШАГ 1. Фиксация нового набора лингвистических значений и значений истинности признаков. Для каждой входной переменной x_i^k отыскивается терм a_i^p , для которого функция принадлежности $\mu^{a_i^p}(x_i^l)$ имеет максимальное

значение $\mu^{a_{imax}^p}(x_i^l)$. Для выходной переменной фиксируется терм d_j^l , соответствующий обнаруженной ситуации.

ШАГ 2. Формируется правило, которое связывает лингвистические значения $a_{imax}^1, a_{imax}^2, \dots, a_{imax}^l$ входных переменных с лингвистическим значением выходной переменной d_j^l :

$$\left[\bigcap_{i=1}^n (x_i^l = a_{imax}^{jp}) \right] \longrightarrow y = d_j^l. \quad (5.16)$$

ШАГ 3. Для антецедента полученного правила вычисляется степень истинности:

$$R^l = \prod_i \mu^{a_{imax}^p}(x_i^l). \quad (5.17)$$

ШАГ 4. Если в накопленной базе знаний уже существует антецедент с номером t_j с такими же значениями $a_{imax}^1, a_{imax}^2, \dots, a_{imax}^l$ и d_j^l , и выполняется условие $R^l > R^t$, то корректируются коэффициенты $w_i^{jk_t}$ посылок данного антецедента:

$$w_i^{jk_t} = \left\{ \begin{array}{l} w_i^{jk_t} + k(1 - w_i^{jk_t}), \text{ if } w_i^{jk_t} < 1 \\ 1, \text{ otherwise} \end{array} \right\}, \quad (5.18)$$

где $0 < k \leq 0.5$.

Иначе, в случае, если антецедент с номером t_j со значениями $a_{imax}^1, a_{imax}^2, \dots, a_{imax}^l$ для правила определения ситуации S_j не существует, его добавляют в соответствующее правило со знаком дизъюнкции. Конец.

Алгоритм автоматизированной коррекции базы знаний позволяет адап-

тировать подсистему ППОР «Советчик» к различным производственным ситуациям и расширяет сферу её применения. Разработанные модели и алгоритмы легли в основу информационной технологии поддержки принятия оперативных решений, которая описана в подразделе 5.4.

5.6. Разработка информационной технологии поддержки принятия оперативных решений по коррекции режима процесса выращивания

Информационная технология поддержки принятия оперативных решений в ходе процесса выращивания монокристаллов объединяет в себе модели и алгоритмы, осуществляющие распознавание ситуации, выдачу рекомендаций, архивирование данных истории процесса и коррекцию баз данных и знаний.

В соответствии с методом построения информационной технологии, изложенным в разделе 2, опишем состав базы данных, состав комплекса математических методов и моделей, опишем информационные процессы и их взаимодействие.

База данных подсистемы диагностики процесса выращивания монокристаллов включает ряд параметров, значения которых передаются из измерительной подсистемы АСУ ТП процесса выращивания, а именно:

1. Исходные данные по физическим параметрам объекта мониторинга:

- масса загрузки;
- масса герметизатора;
- заданный диаметр слитка;
- радиус затравки;
- длина затравки;
- скорость вращения затравки;
- скорость вращения тигля;
- диаметр тигля;
- высота тигля;
- внутренний диаметр экрана, м

- высота экрана, м
- плотность полупроводникового материала в твердом состоянии;
- плотность полупроводникового материала в расплаве;
- теплопроводность полупроводникового материала в твердом состоянии;
- теплопроводность полупроводникового материала в расплаве;
- излучательная способность слитка;
- излучательная способность герметизатора (B_2O_3);
- температура плавления полупроводникового материала;
- кристаллографическое направление плоскости роста.

2. Первичные данные, полученные от физических датчиков в ходе технологического процесса:

- температура основного нагревателя;
- мощность фонового нагревателя;
- скорость перемещения штока затравки;
- скорость перемещения штока тигля;
- температура расплава под слоем герметизатора;
- текущая масса слитка.

3. Вторичные данные – результаты косвенных измерений:

- температура фонового нагревателя;
- уровень расплава в тигле;
- массив значений температуры на поверхности герметизатора;
- массив значений температуры на поверхности тигля;
- текущий диаметр слитка;
- текущая длина слитка;

4. Промежуточные данные:

- теплопроводность GaAs в зоне фронта кристаллизации;
- температура в заданных точках расплава;
- температура в заданных точках кристалла;
- эффективный коэффициент теплоотдачи с поверхности слитка;
- номер стадии процесса выращивания.

5. Выходные данные подсистемы мониторинга:

- массив распределения температур в расплаве;
- массив распределения температур в кристалле;
- радиальные температурные градиенты в зоне фронта кристаллизации;
- осевые температурные градиенты в слитке.

6. Признаки ситуаций:

- тенденция отклонения текущего значения диаметра слитка;
- тенденция отклонения температуры основного нагревателя;
- тенденция отклонения температуры фонового нагревателя;
- тенденция отклонения скорости вытягивания;
- радиальный градиент на уровне +1 см над уровнем расплава;
- осевой градиент на фронте кристаллизации;
- осевой градиент в слитке на уровнях от 1 см до 12 см;
- неравномерность осевого градиента в слитке на уровнях от 1 см до 12 см.

База знаний подсистемы диагностики процесса выращивания содержит:

1. Перечень ситуаций подлежащих распознаванию, а именно:

- штатная ситуация;
- растет риск ухода диаметра слитка за пределы допуска;
- уход диаметра за пределы допуска;
- растет риск увеличения плотности дислокаций;
- вероятность недопустимого увеличения плотности дислокаций превысила заданный порог;
- растет риск замедления или остановки процесса кристаллизации;
- растет риск повышения нестабильности значения радиуса слитка, риск разложения кристалла;
- неисправность в АСУТП.

2. Продукционные нечеткие правила распознавания ситуаций.

3. Массивы параметров функций принадлежности и весовых коэффициентов посылок для систем нечеткого логического вывода.

4. Формулировки рекомендаций по коррекции режима выращивания.

Комплекс математических методов и моделей подсистемы содержит:

1. Модель структуры СППР по коррекции режима процесса выращивания.
2. Вербальную модель проблемной ситуации в предметной области – описание ситуаций и их признаков, описание причинно-следственных связей;
3. Модель качества конечного продукта в виде совокупности показателей, характеризующих физические свойства монокристалла (технические условия);
4. Модели преобразования первичных данных в значения признаков ситуации, а именно:
 - модель тренда отклонения текущего значения диаметра слитка (5.3) (M1);
 - модель тренда отклонения температуры основного нагревателя (5.4) (M2);
 - модель тренда отклонения температуры фонового нагревателя (5.5) (M3);
 - модель тренда отклонения скорости вытягивания (5.6) (M4);
 - нечеткая модель M5 распознавания ситуаций (5.15);
 - продукционная модель M6 для выбора решений для коррекции режима процесса выращивания.

В соответствии с выражением (2.17) определим информационные процессы (ИП) и схему информационной технологии (рис. 5.6).

Исходные данные подсистема "Советчик" получает от подсистемы «Мониторинг». Производится нормирование данных и агрегирование – распределение данных по таблицам БД подсистемы "Советчик".

ИП1. Преобразование данных в признаки ситуаций – модели M1-M4. Процедуры вычисления скользящих средних с учётом трех последних замеров и знака результата.

ИП2. Распознавание ситуаций. Используется нечеткая модель распознавания M5 и база знаний по диагностике БЗ.1. Процесс выполняется по следующему алгоритму:

ШАГ 1. Фиксация текущих значений признаков ситуаций.

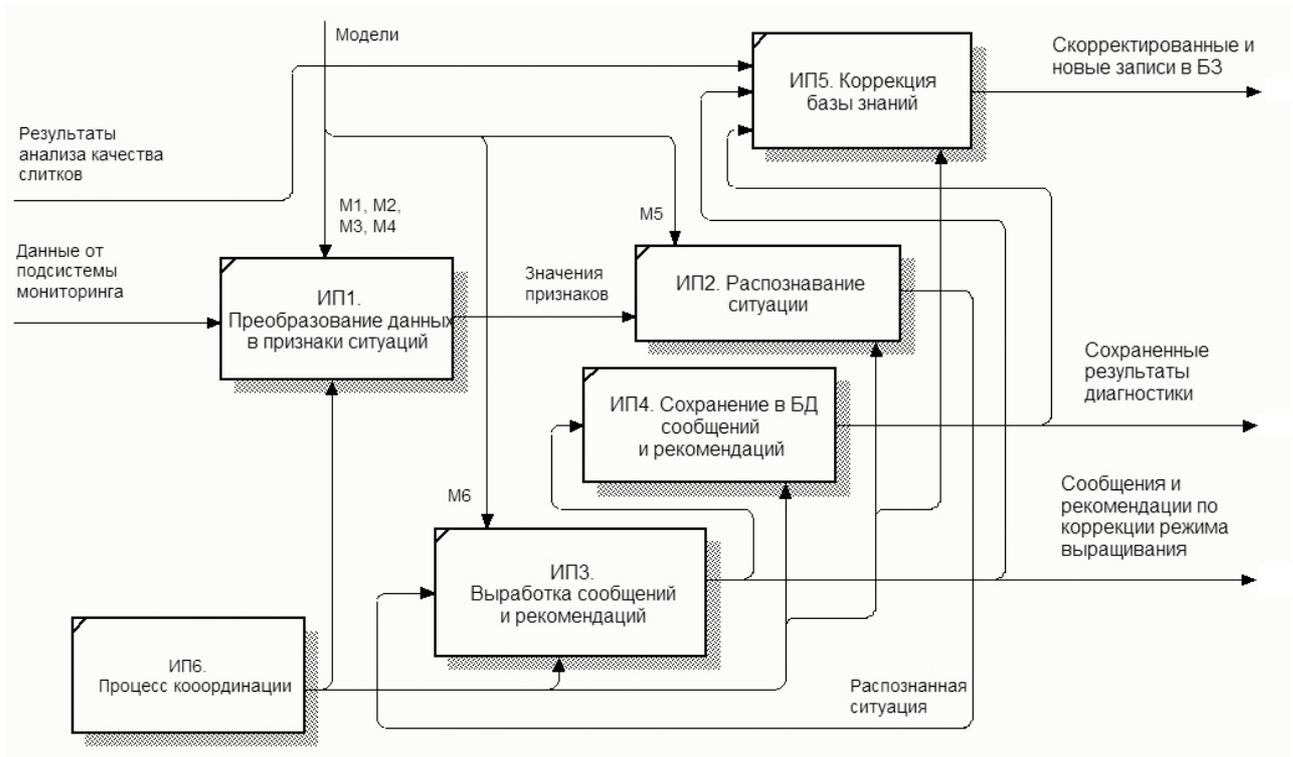


Рисунок 5.6 – Общая схема информационной технологии поддержки принятия оперативных решений

ШАГ 2. Расчет текущих значений степеней принадлежности для признаков ситуаций и фиксация результатов фаззификации в рабочей матрице логического вывода.

ШАГ 3. Вычисление степеней истинности левых частей правил в БЗ диагностики ситуаций с учетом весовых коэффициентов каждой посылки каждого правила.

ШАГ 4. Аккумуляция результатов, полученных на шаге 3. Определение правила, имеющего наибольшую степень истинности.

ШАГ 5. Вычисление числового и лингвистического значения степени критичности ситуации.

ШАГ 6. Генерация сообщения для оператора с указанием текущей ситуации и степени критичности.

ШАГ 7. Конец.

ИП3. Выработка сообщений и рекомендаций. Используется модель вывода М6. Процесс выполняется по следующему алгоритму:

ШАГ 1. Фиксация результатов распознавания ситуации.

ШАГ 2. Вычисление степеней истинности левых частей правил в БЗ по выдаче рекомендаций.

ШАГ 3. Определение правила, имеющего наибольшую степень истинности.

ШАГ 4. Выдача сообщения и рекомендации для оператора установки в соответствии с выбранным правилом.

ШАГ 5. Конец.

ИП4. Сохранение в БД сообщений и рекомендаций.

ИП5. Коррекция баз знаний. Алгоритм приведен в подразделе 5.5.

ИП6. Координация выполнения процессов ИП1–ИП7.

Таким образом, разработана информационная технология поддержки принятия оперативных решений по коррекции режима процесса выращивания монокристаллов. Технология реализована в виде подсистемы «Советчик» в рамках информационно-аналитической системы управления качеством процесса выращивания монокристаллов полупроводников.

5.7. Разработка интегрированной информационной технологии управления качеством процесса выращивания

Интегрированная информационная технология управления качеством процесса выращивания объединяет три информационные технологии, разработанные в разделах 3, 4 и 5. Информационные процессы, реализуемые в рамках подсистем мониторинга, поддержки принятия оперативных решений и оптимизации параметров тепловых экранов, подробно описаны в соответствующих разделах.

Информационная технология оптимизации геометрических параметров теплового экрана реализуется на этапе технологической подготовки производства и предшествует информационным технологиям мониторинга тепловых полей и поддержки принятия оперативных решений в ходе процесса выращивания.

Информационная технология мониторинга температурных параметров процесса выращивания (ИТМТП) предназначена для контроля температурных параметров процесса путем косвенного многоточечного измерения температуры в слитке и в подкристалльной области и выдачи результатов измерения на монитор оператора-технолога в табличном виде. Кроме того, ИТМТП обеспечивает входными данными информационную технологию поддержки принятия оперативных решений по коррекции процесса выращивания (ИТППОР).

Общая схема интегрированной информационной технологии управления качеством процесса выращивания показана на рис. 5.7 [225].

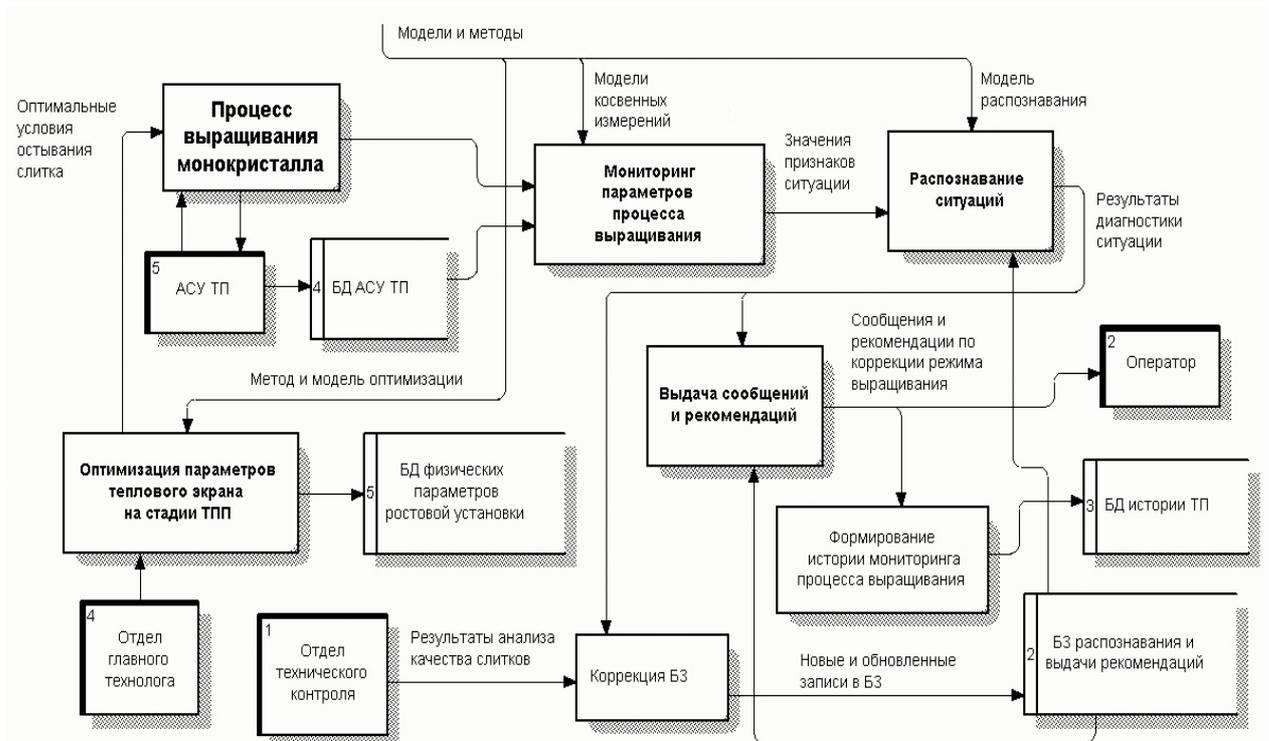


Рисунок 5.7 – Общая схема интегрированной информационной технологии управления качеством процесса выращивания монокристаллов

Входной информационный поток ИТМТП содержит:

1. Исходные данные для тепловых расчетов, в том числе заданный диаметр слитка, масса загрузки, диаметр тигля, скорости вращения затравки и тигля, значения теплотехнических характеристик материалов и т.п.
2. Первичные данные, полученные от физических датчиков, в том числе

температура основного нагревателя, мощность, потребляемая фоновым нагревателем, температура расплава под слоем герметизатора, текущая масса слитка, скорость вертикального перемещения затравки и штока тигля и др.

В ИТМТП реализованы следующие процессы:

- фиксация, первичная обработка и агрегирование данных прямых измерений;
- вычисление параметров температурных полей;
- вывод данных на монитор оператора;
- сохранение данных мониторинга в БД.

Выходной информационный поток ИТМТП содержит массивы значений температуры в заданных точках расплава и слитка, массивы осевых и радиальных градиентов температуры в подкристалльной области и в слитке. Эти данные фиксируются в БД и являются входными для ИТППОР.

ИТППОР предназначена для обеспечения оператора-технолога сообщениями и рекомендациями по ведению процесса выращивания на разных стадиях.

В ИТППОР реализованы следующие процессы:

- прием данных от подсистемы мониторинга;
- вычисление значений признаков ситуаций;
- распознавание ситуации;
- выдача сообщений и рекомендаций;
- сохранение в БД результатов диагностики;
- анализ данных и коррекция БЗ.

На этапе анализа данных используются не только результаты диагностики, но и результаты лабораторного анализа качества слитка – плотность дислокаций в разных сечениях слитка и дисперсия отклонений диаметра цилиндрической части. Общая схема взаимодействия ИАС УКПВ с процессом выращивания и конечными пользователями показана на рис. 5.9 [225].

Подсистема «Экран» реализует информационную технологию оптими-

зации геометрических параметров теплового экрана и входит в АРМ технолога. Подсистема «Мониторинг» реализует информационную технологию мониторинга температурных параметров процесса выращивания. Подсистема «Советчик» реализует информационную технологию поддержки принятия оперативных решений в ходе процесса выращивания.

Таким образом, созданы теоретические и практические предпосылки для практической реализации информационно-аналитической системы управления качеством процесса выращивания монокристаллов полупроводников (ИАС УКПВ). Тема практической реализации ИАС УКПВ раскрыта в разделе 6.

Выводы по разделу

1 Извлечены знания из полученной от экспертов информации о причинно-следственных связях явлений и ситуаций в процессе выращивания монокристаллов. Структурирована оперативная информация по процессу выращивания и сформированы перечни ситуаций и параметров, определяющих качество процесса.

2. Разработаны модели и процедуры преобразования значений параметров процесса выращивания в значения признаков ситуаций.

3. Получила дальнейшее развитие нечеткая модель распознавания ситуаций в процессе выращивания монокристаллов, в которой, в отличие от известных моделей, оценивается степень критичности ситуации, а для настройки используются индивидуальные коэффициенты значимости элементарных посылок каждого правила. Это позволяет упростить процесс обучения и дообучения модели при появлении новых ситуаций.

Значения коэффициентов значимости оптимизированы для каждого правила при помощи эволюционного алгоритма.

4. Разработана иерархическая база знаний для диагностики неблагоприятных ситуаций и выдачи рекомендаций по коррекции режима процесса вы-

ращивания монокристаллов, включающая модуль реагирования на одновременное возникновение двух или более критических ситуаций одновременно, что позволяет гибко реагировать на возникающие ситуации и принимать рациональные решения.

5. Разработаны алгоритмы решения задачи коррекции базы знаний, решения задачи распознавания и выдачи рекомендаций.

6. Разработана информационная технология поддержки принятия оперативных решений в ходе процесса выращивания монокристаллов.

7. Разработана интегрированная информационная технология управления качеством процесса выращивания монокристаллов и схема взаимодействия ИАС УКПВ с процессом выращивания и конечными пользователями.

Основные результаты раздела опубликованы в научных трудах автора [219, 221, 224, 225, 234, 235].

РАЗДЕЛ 6.

ПРАКТИЧЕСКАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ МОНИТОРИНГА И ОПТИМИЗАЦИИ ПРОЦЕССА ВЫРАЩИВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ

В разделах 2–5 разработаны математические модели, методы и информационные технологии решения задач мониторинга и оптимизации процесса выращивания монокристаллов полупроводников в рамках информационно-аналитической системы управления качеством процесса выращивания (ИАС УКПВ). Данный раздел посвящен вопросам разработки подсистем ИАС УКПВ «Мониторинг», «Советчик», «Экран» в которых реализованы модели, методы и алгоритмы решения вышеуказанных задач.

6.1. Реализация информационной технологии мониторинга процесса выращивания монокристаллов. Подсистема «Мониторинг»

Функциональная модель подсистемы «Мониторинг». Функциональная модель подсистемы «Мониторинг» изображена в нотации DFD на рис. 6.1.

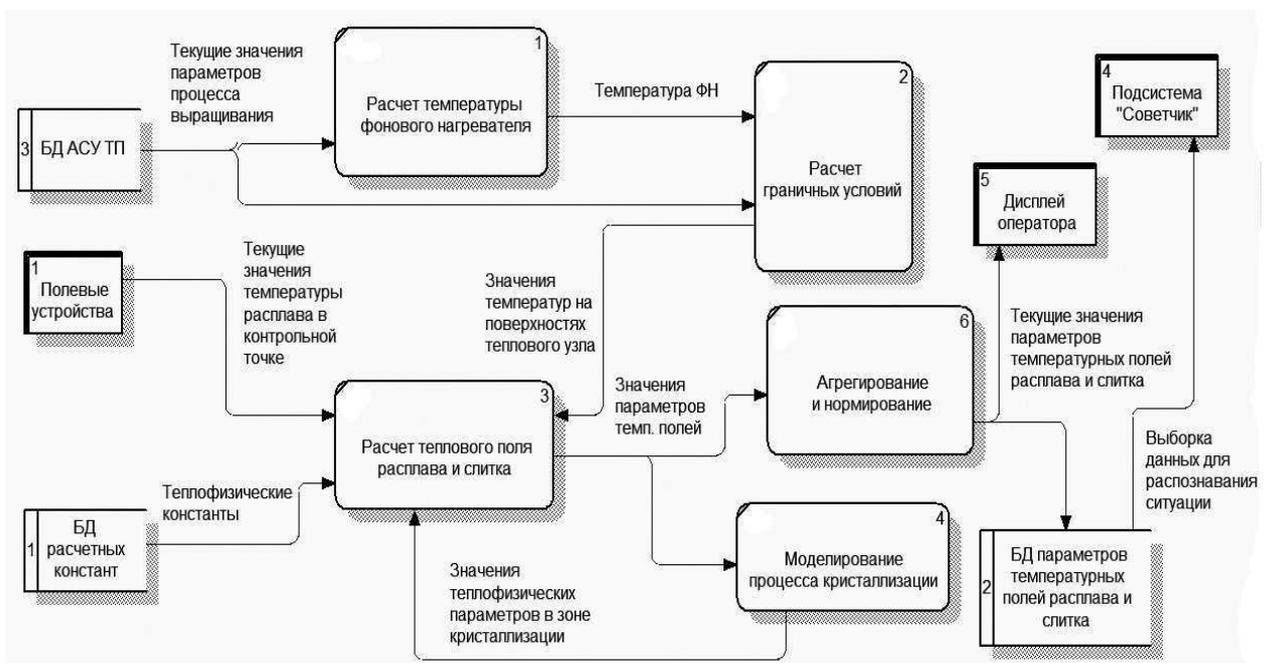


Рисунок 6.1 – Функциональная модель подсистемы «Мониторинг»

На первом этапе, после ввода данных, поступающих из БД АСУ ТП, и фиксации теплофизических констант, производится расчет температуры фонового нагревателя и граничных условий.

На втором этапе производится расчет температурных полей расплава и слитка. Формируются массивы значений температур и градиентов. Моделирование процесса кристаллизации производится только в период отладки подсистемы, для уточнения значений коэффициента теплопроводности в переходной зоне у фронта кристаллизации.

На третьем этапе производится агрегирование результатов расчета, их нормирование и сохранение в соответствующей таблице базы данных мониторинга. Данная таблица является общей для подсистем “Мониторинг” и “Советчик”.

Информационное обеспечение подсистемы “Мониторинг”. На рис. 6.2 показана логическая структура БД в виде диаграммы сущностных классов. В состав БД входят 7 таблиц, структура и содержание которых приведено ниже.

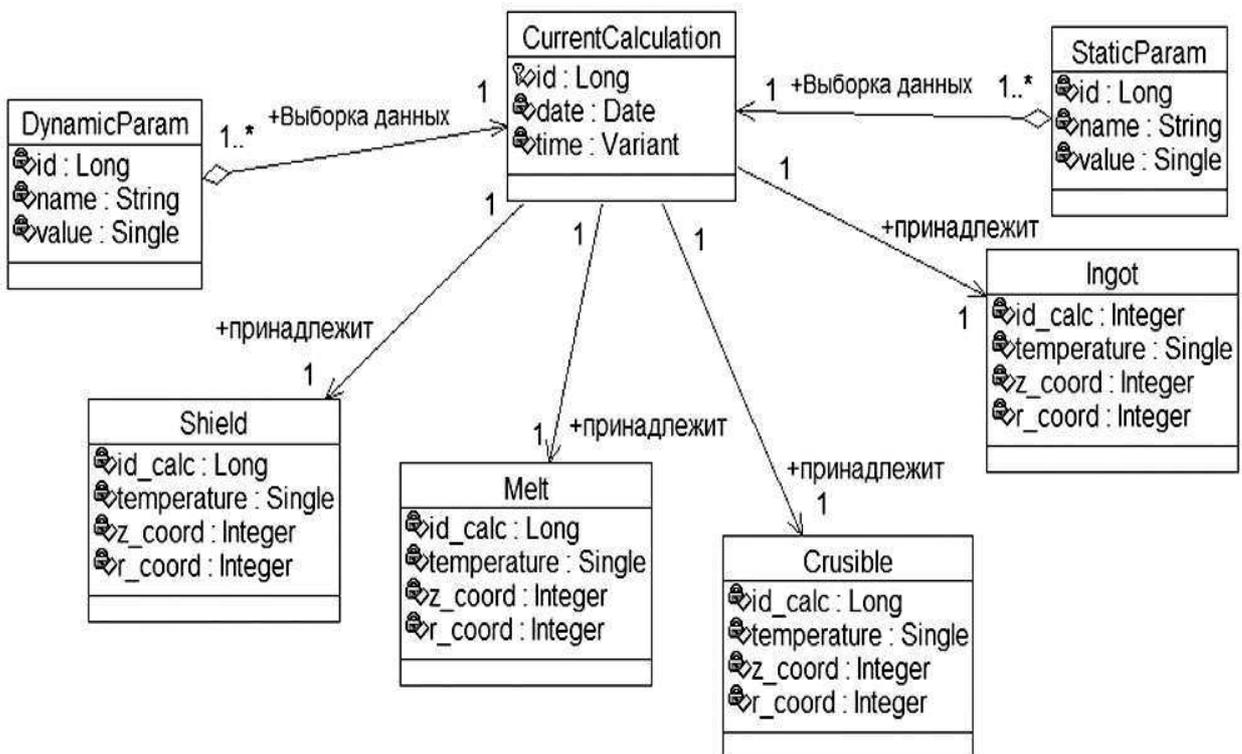


Рисунок 6.2 – Диаграмма сущностных классов подсистемы “Мониторинг”

Таблица 6.1 – StaticParam – таблица статических параметров процесса выращивания. Содержит теплофизические константы материалов, физические характеристики загрузки, слитка и т.п.

Таблица 6.2 – DynamicParam – таблица динамических параметров процесса выращивания. Содержит данные о температурных полях расплава и слитка, полученные в предыдущих временных интервалах мониторинга.

Таблица 6.3 – CurrentCalculation – таблица результатов текущего расчета и агрегации данных из таблиц Ingot, Melt.

Таблица 6.4 – Ingot – таблица результатов текущего расчета температурного поля слитка.

Таблица 6.5 – Crucible – таблица, содержащая результаты расчета значений граничных условий на стенке тигля.

Таблица 6.6 – Melt – таблица содержит результаты текущего расчета температурного поля расплава.

Таблица 6.7 – Shield – содержит данные по температуре экрана в заданных точках. Используется при расчете температурного поля слитка.

Таблица 6.1 – StaticParam – таблица статических параметров процесса выращивания

Имя поля	Тип поля	Описание поля
*id	integer	Номер параметра
name	string	Имя параметра
value	float	Значение параметра

Таблица 6.2 – DynamicParam – таблица динамических параметров процесса выращивания

Имя поля	Тип поля	Описание поля
*id	integer	Номер параметра
name	string	Имя параметра
value	float	Значение параметра

Таблица 6.3 – CurrentCalculation – ссылки на результаты текущего расчета в таблицах Ingot и Milt.

Имя поля	Тип поля	Описание поля
id	integer	Номер расчета
date	Date	Дата расчета
time	Time	Время расчета

Таблица 6.4 – Ingot – данные о температурном поле слитка в текущем расчете

Имя поля	Тип поля	Описание поля
id расчета	Longint	Поле для связывания с таблицей CurrentCalculation
r	integer	Координата R
z	integer	Координата Z
temperature	float	Температура слитка в точке
gr	float	Градиент по радиусу слитка
gz	float	Градиент по оси слитка

Таблица 6.5 – Crucible – граничные условия на стенке тигля

Имя поля	Тип поля	Описание поля
id расчета	Longint	Поле для связывания с таблицей CurrentCalculation
temperature	float	Температура на стенке тигля в точке
r	integer	Координата R
z	integer	Координата Z

Таблица 6.6 – Melt – данные по температурному полю расплава в текущем расчете

Имя поля	Тип поля	Описание поля
id расчета	Longint	Поле связывания с таблицей CurrentCalculation
temperature	float	Температура расплава в точке
r	integer	Координата R
z	integer	Координата Z

Таблица 6.7 – Shield – данные по температуре экрана в заданных точках

Имя поля	Тип поля	Описание поля
id расчета	Longint	Поле для связывания с таблицей CurrentCalculation

Продолжение табл.6.7.

temperature	float	Температура экрана в точке
r	integer	Координата R
z	integer	Координата Z

Диаграммы активности подсистемы «Мониторинг». На рис. 6.3 показана диаграмма активности «Тепловой расчет» – реализация косвенных измерений параметров температурного поля расплава и слитка.

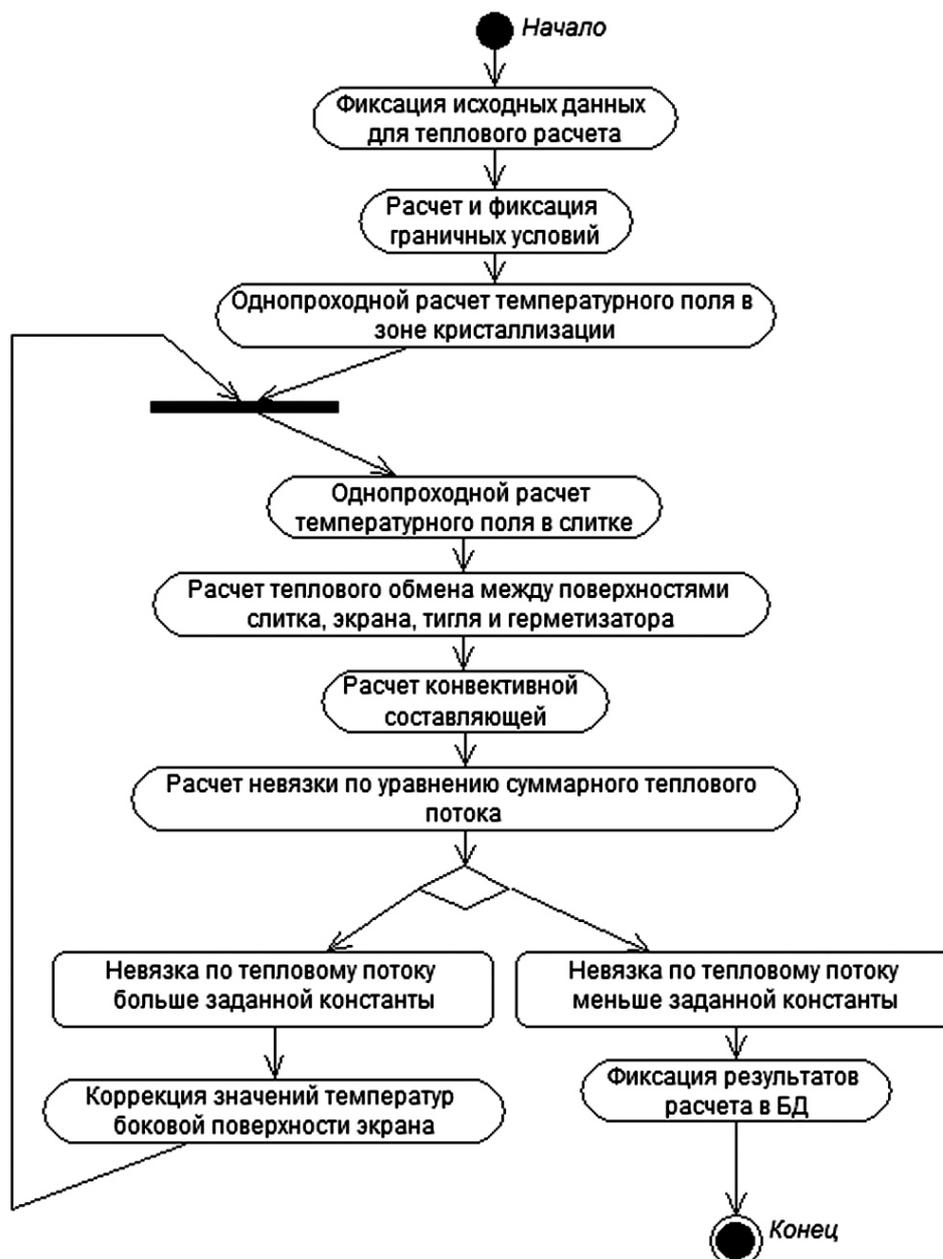


Рисунок 6.3 – Диаграмма активности «Тепловой расчет»

Алгоритм теплового расчета описан в подразделе 3.5. Особенностью алгоритма является минимально возможное число итераций на всех этапах

вычислений.

На рис. 6.4 представлена диаграмма активности «Моделирование процесса кристаллизации». Алгоритм описан в подразделе 3.3.

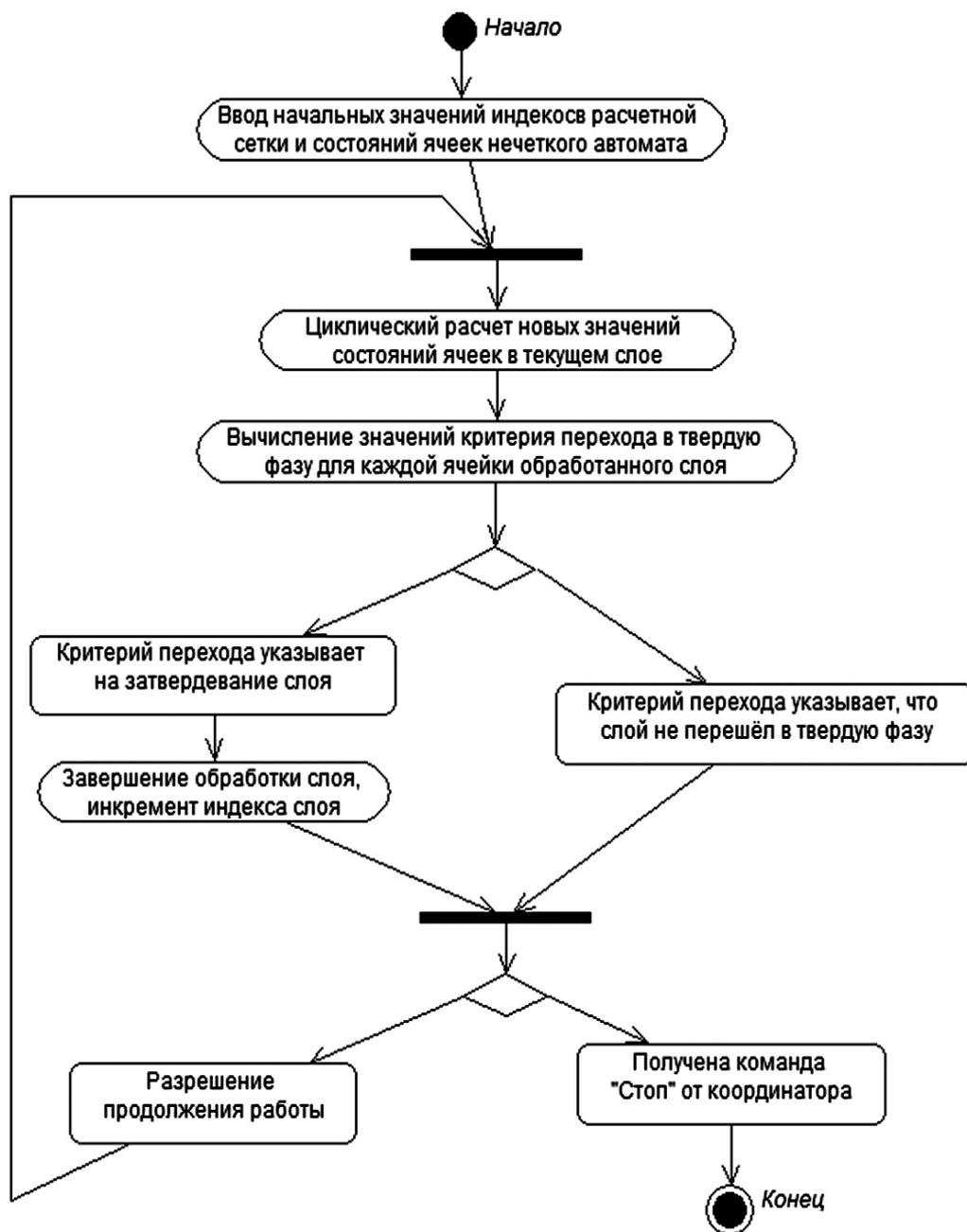


Рисунок 6.4 – Диаграмма активности «Моделирование процесса кристаллизации»

На рис. 6.5 представлена диаграмма активности «Мониторинг». Алгоритм подробно описан в подразделе 3.5.

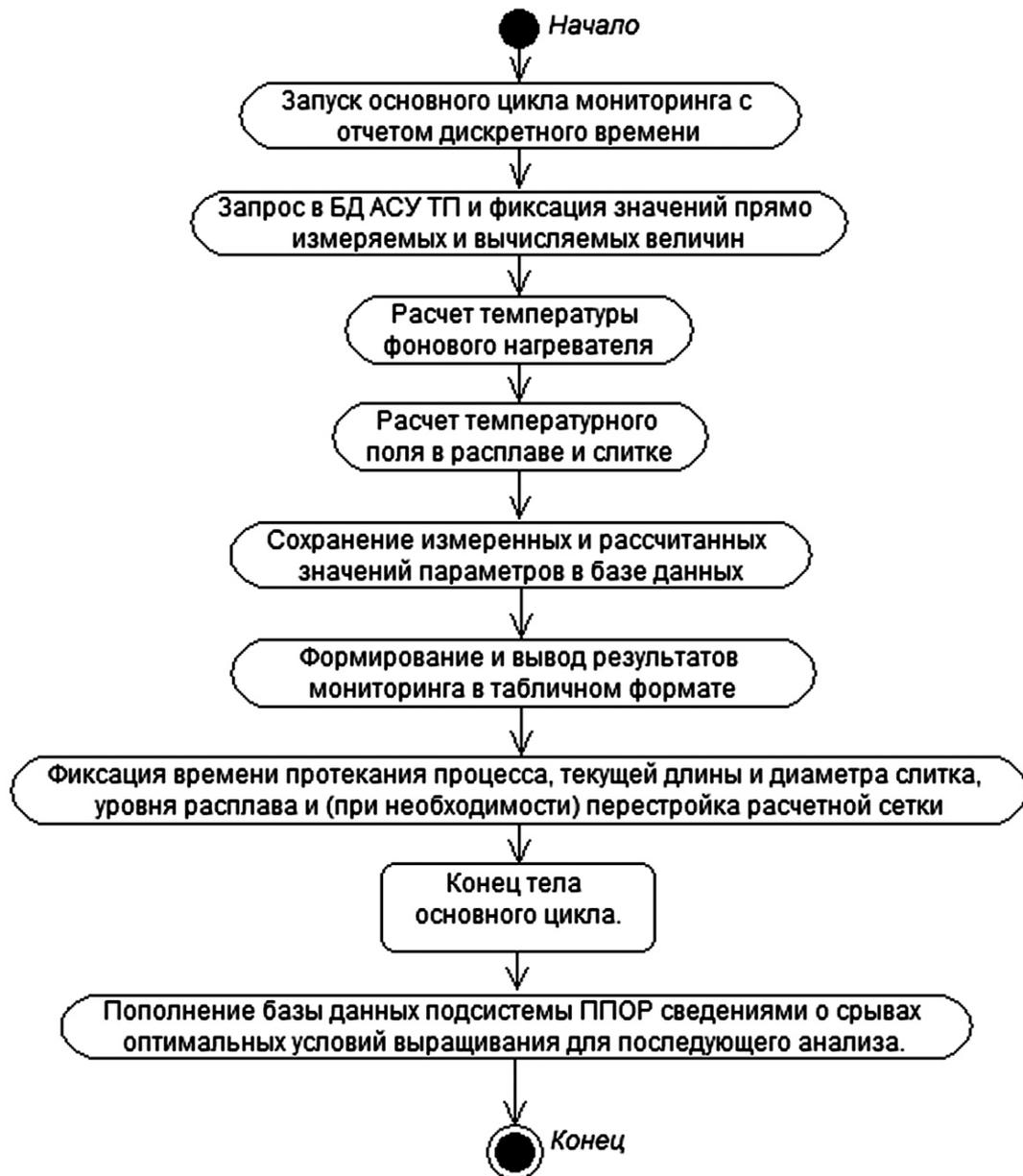


Рисунок 6.5 – Диаграмма активности «Мониторинг»

Программная реализация подсистемы «Мониторинг». Программная реализация подсистемы «Мониторинг» показана на видеодиаграммах рис. 6.6 – 6.8. На рис. 6.6 представлена видеодиаграмма модуля «Координатор». Пользователь задает геометрические параметры слитка, и, тем самым, определяет программу действий координатора при смене стадий процесса выращивания. На рис. 6.7 представлена панель отображения текущих значений параметров процесса выращивания [230]. На рис. 6.8 показано окно модуля мониторинга температурного поля в зоне фронта кристаллизации.

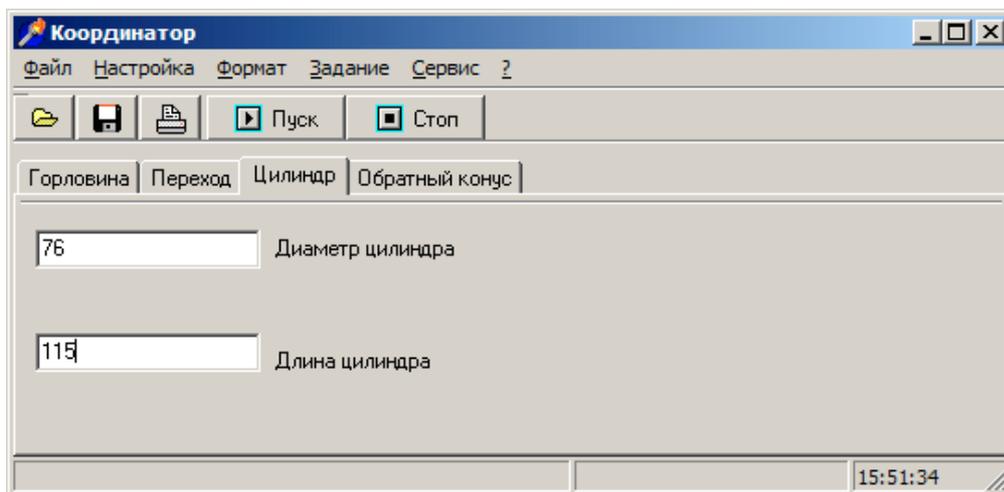


Рисунок 6.6 – Окно модуля «Координатор» подсистемы «Мониторинг»

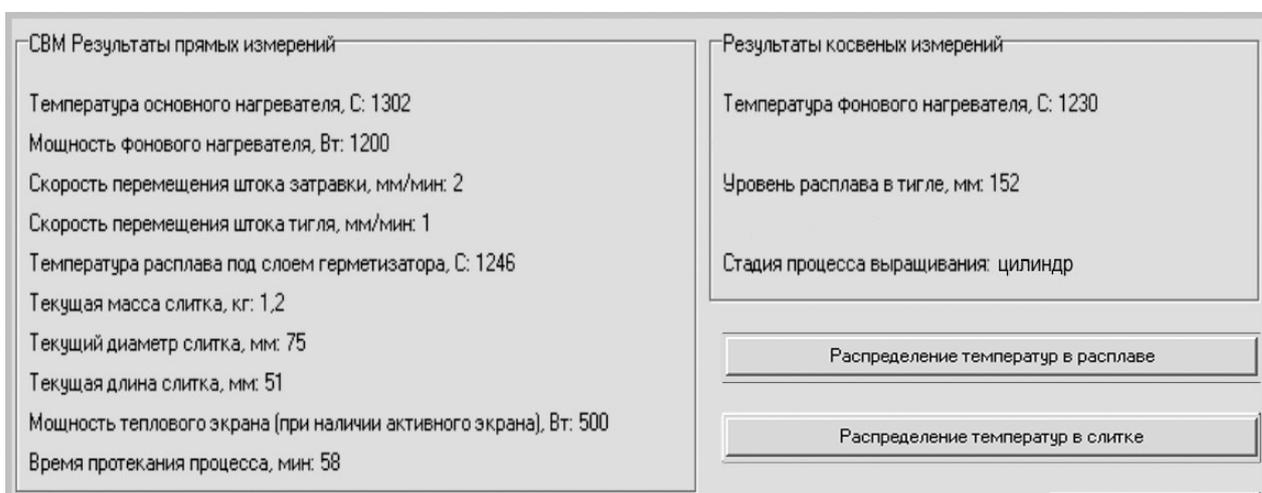


Рисунок 6.7 – Панель отображения текущих значений параметров процесса выращивания

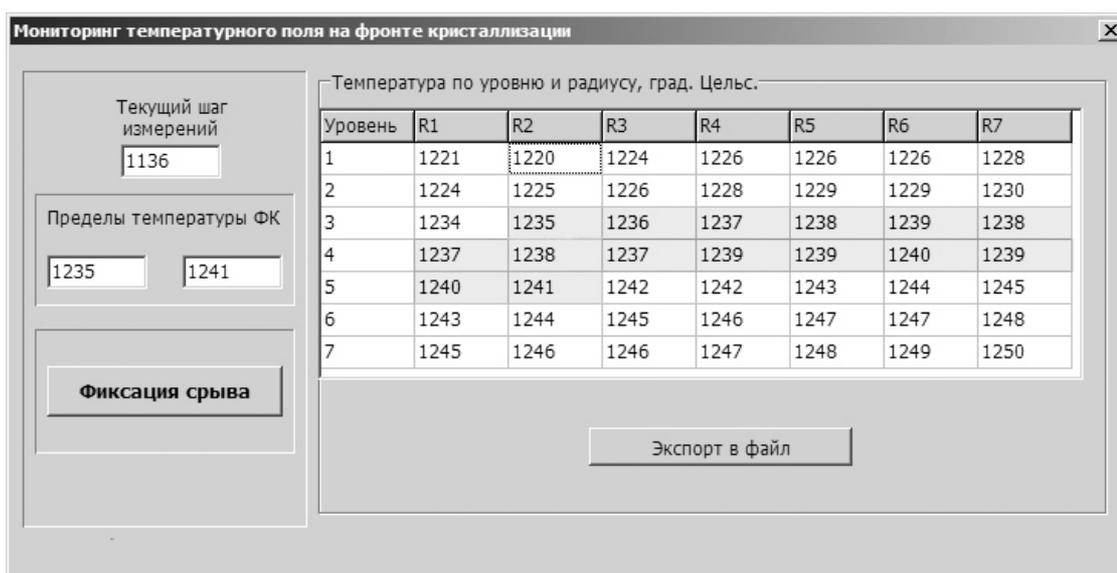


Рисунок 6.8 – Панель отображения параметров температурного поля в зоне фронта кристаллизации. Цветом выделен фронт кристаллизации.

На рис. 6.9 представлено окно модуля фиксации исходных данных для процедуры теплового расчета.

Параметр	Значение	Параметр	Значение	Параметр	Значение
Масса загрузки, кг	5	Диаметр тигля, мм	96	Теплопроводность GaAs (кристалл), Вт/смК	T=270 C, 150
Масса герметизатора, кг	0,2	Высота тигля, мм	200	Теплопроводность GaAs (расплав), Вт/смК	T=1240 C, 140
Масса затравки, кг	0,1	Внутренний диаметр экрана, мм	92	Теплопроводность B2O3, Вт/смК	T=1240 C, 20
Заданный диаметр слитка, мм	75	Высота экрана, мм	200	Излучательная способность, GaAs (кристалл)	0,5
Радиус затравки, мм	10	Плотность GaAs (кристалл), г см3	5,4	Излучательная способность B2O3	0,75
Длина затравки, мм	25	Плотность GaAs, (расплав) г см3	5,9	Кристаллографическое направление плоскости роста	111
Скорость вращения затравки, об/мин	6	Плотность B2O3, г см3	151		
Скорость вращения тигля, об/мин	4	Температура плавления GaAs, C	1238		

Рисунок 6.9 – Окно фиксации исходных данных для процедуры теплового расчета

Методика мониторинга. Разработана методика мониторинга температурных полей расплава и слитка в процессе выращивания монокристаллов GaAs по LEC-технологии. Методика включает следующие этапы:

1. После начала процесса затравливания в расплав вместе с фоновым нагревателем погружается вольфрамо-родиевая термопара в кварцевом чехле, который прикреплен к щупу фонового нагревателя (щуп используется для позиционирования ФН в слое герметизатора).

2. Производится выдержка времени, равная 20 минутам для установления переходного процесса в температурном режиме теплового узла. Оператор производит калибровку измерительных каналов и задает параметры

процесса выращивания.

3. Верифицируется виртуальный датчик температуры фонового нагревателя – регрессионная модель, описанная в подразделе 3.4. Для верификации используются данные измерений погружной термопары. Если выявлена систематическая ошибка, оператор компенсирует её, регулируя значение постоянной составляющей модели в диалоговом окне настроек.

4. Для каждой конкретной ростовой установки подсистема верифицируется на типовом процессе выращивания. Для верификации достаточно одного пробного прогона процесса с измерением температуры ФН, температуры расплава в контрольной точке, температуры основного нагревателя.

4. В течение процесса выращивания оператор визуально контролирует температурное поле расплава в зоне фронта кристаллизации и численные значения осевых и радиальных градиентов.

Методика прошла испытания в условиях производства монокристаллов GaAs диаметром 76...100 мм. Подтверждена валидность методики, то есть точность измерений температуры и повторяемость (воспроизводимость) результатов измерения. Применение методики в течение 2011-2013 г.г. показало повышение стабильности плотности дислокаций на уровне $N \leq 4 \cdot 10^3 \text{ см}^{-2}$. С 2013 г. подсистема «Мониторинг» используется совместно с подсистемой «Советчик», основная функция которой – поддержка принятия оперативных решений по коррекции параметров процесса выращивания монокристаллов GaAs. При мониторинге процесса выращивания монокристаллов кремния контролируется и прогнозируется также концентрация углерода в слитках [231].

Таким образом, в подсистеме «Мониторинг» реализована информационная технология мониторинга температурных полей и других параметров процесса выращивания монокристаллов. Описанная выше подсистема предоставляет данные для подсистемы «Советчик», реализация которой описана в подразделе 6.3.

6.2. Реализация информационной технологии поддержки принятия оперативных решений в процессе выращивания. Подсистема «Советчик».

Функциональная модель подсистемы «Советчик». Функциональная модель подсистемы «Советчик» изображена в нотации DFD на рис. 6.10.

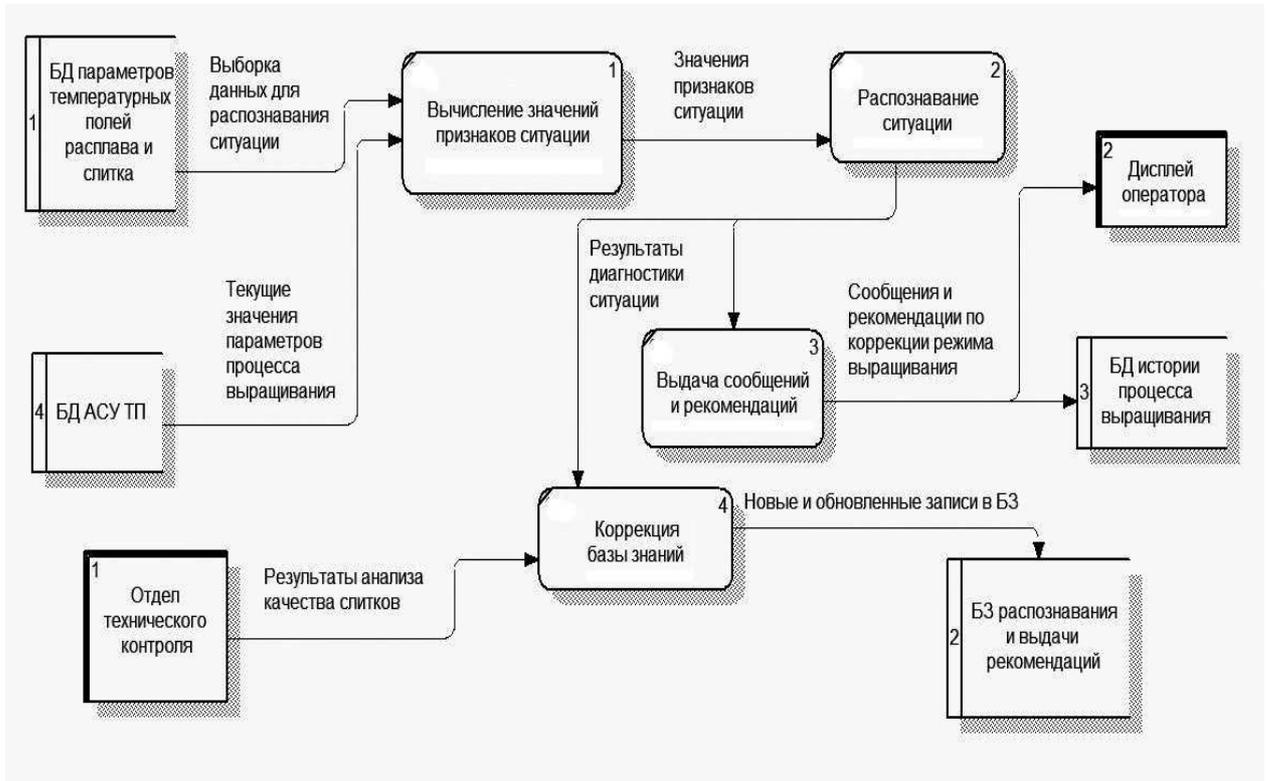


Рисунок 6.10 – Диаграмма потоков данных подсистемы «Советчик»

На первом этапе, после фиксации текущих значений параметров процесса выращивания и температурных полей в расплаве и слитке, осуществляется вычисление значений признаков ситуаций. Далее реализуется распознавание ситуации и выдача пользователю сообщений и рекомендаций. При обнаружении несовпадения значений признаков с содержимым базы знаний при наличии критической или нештатной ситуации, осуществляется коррекция или пополнение базы знаний. На эту процедуру может влиять также результат анализа качества слитка. Ведутся работы по автоматизации анализа плотности дислокаций в слитках [232, 233]. Результаты распознавания (диагностики) и выданные рекомендации сохраняются в базе данных, структура которой описана ниже.

Информационное обеспечение подсистемы «Советчик». На рис. 6.11 показана логическая структура БД подсистемы «Советчик» в виде диаграммы сущностных классов.

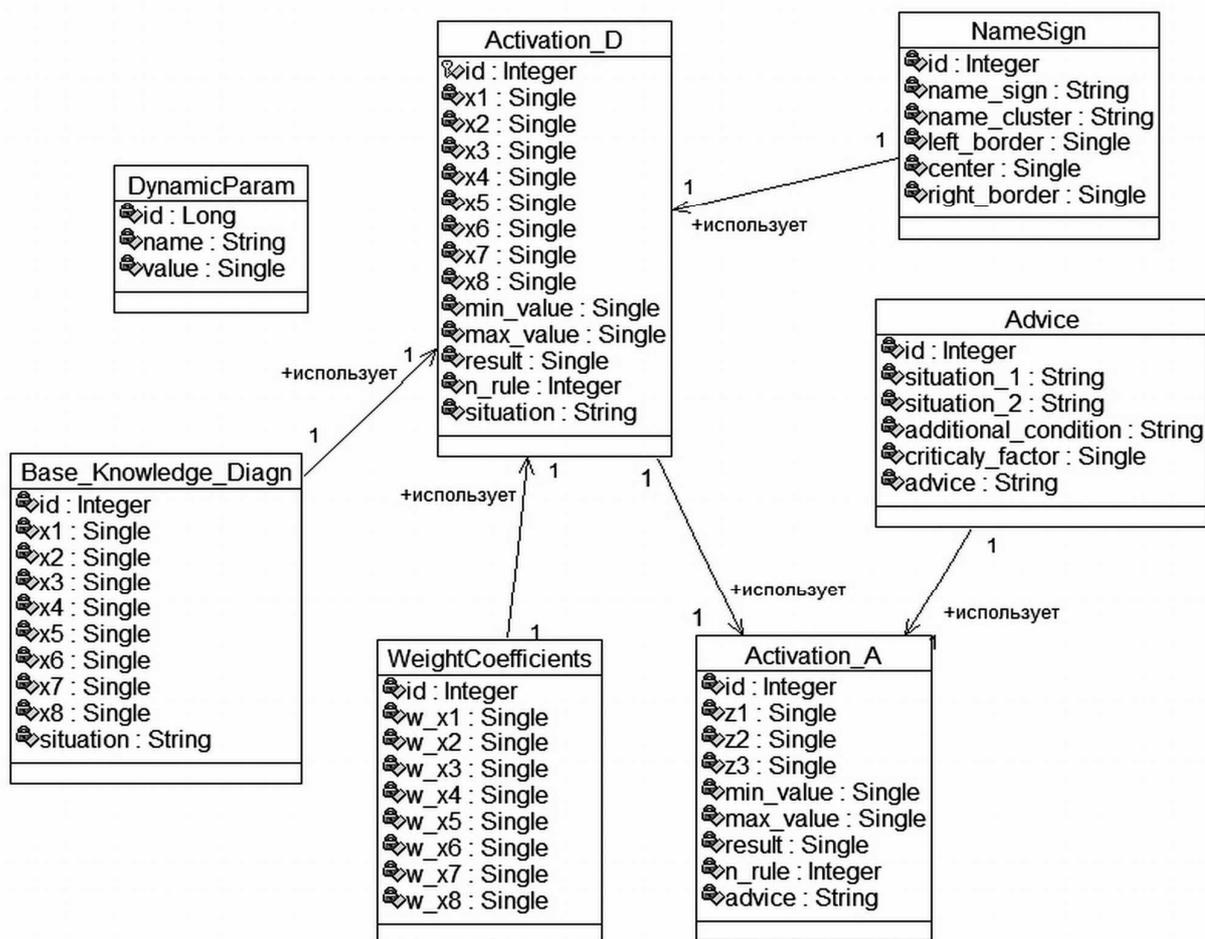


Рисунок 6.11 – Логическая структура базы данных подсистемы «Советчик»

В состав БД входят 7 таблиц. Таблица 6.8 – DynamicParam – таблица текущих параметров процесса выращивания. Также в эту таблицу помещаются технико-экономические параметры, необходимые для определения оптимального выхода из нештатной ситуации.

Таблица 6.9 – NameSign – таблица признаков ситуаций. Содержит имена признаков (имена лингвистических переменных), термины – имена кластеров, а также координаты границ и центров кластеров.

Таблица 6.10 – Base_Knowledge_Diagn – таблица базы знаний по распознаванию ситуаций. Содержит правила распознавания, включая лингвистиче-

ские значения термов, по каждому правилу и консеквенты правил – имена классов ситуаций.

Таблица 6.11 – WeightCoefficients – таблица весовых коэффициентов. Содержит коэффициенты значимости элементарных посылок для всех правил.

Таблица 6.12 – Activation_D – таблица вычисленных значений истинности термов всех лингвистических переменных. Используется для хранения результатов фаззификации, результатов перемножения с весовыми коэффициентами и результатов активизации правил. Имеет поле для фиксации номера правила, имеющего наибольшее значение истинности.

Таблица 6.13 – Recommendation – база знаний по выдаче рекомендаций. Содержит правила выбора рекомендаций по коррекции хода процесса выращивания, включая имена термов, имена ситуаций и формулировки рекомендаций.

Таблица 6.14 – Activation_A – таблица вычисленных значений истинности термов и признаков в правилах выдачи рекомендаций.

Таблица 6.8 – DynamicParam – таблица динамических параметров процесса выращивания

Имя поля	Тип поля	Описание поля
*id	integer	Номер параметра
name	string	Имя параметра
value	float	Значение параметра

Таблица 6.9 – NameSign – таблица признаков ситуаций

Имя поля	Тип поля	Описания поля
*id	integer	Номер признака
name_sign	nvarchar	Имя признака

Продолжение табл. 6.9

name_cluster	nvarchar	Имя кластера
left_border	float	Левая граница
center	float	Центр
right_border	float	Правая граница

Таблица 6.10 – Base_Knowledge_Diagn – таблица базы знаний
по распознаванию ситуаций

Имя поля	Тип поля	Описание поля
* id	integer	Номер по порядку
x1	float	Значение входной переменной x1
x2	float	Значение входной переменной x2
x3	float	Значение входной переменной x3
x4	float	Значение входной переменной x4
x5	float	Значение входной переменной x5
x6	float	Значение входной переменной x6
x7	float	Значение входной переменной x7
x8	float	Значение входной переменной x8
situation	string	Ситуация

Таблица 6.11 – WeightCoefficients – таблица весовых коэффициентов
всех элементарных посылок для всех правил

Имя поля	Тип поля	Описание поля
id	integer	Номер записи БЗ
w_x1	float	Весовой коэффициент для x1
w_x2	float	Весовой коэффициент для x2
w_x3	float	Весовой коэффициент для x3
w_x4	float	Весовой коэффициент для x4
w_x5	float	Весовой коэффициент для x5

Продолжение табл. 6.11

w_x6	float	Весовой коэффициент для x6
w_x7	float	Весовой коэффициент для x7
w_x8	float	Весовой коэффициент для x8

Таблица 6.12 – Activation_D – таблица вычисленных значений истинности термов всех лингвистических переменных

Имя поля	Тип поля	Описание поля
id	integer	Номер по порядку
x1	float	Значение истинности признака x1
x2	float	Значение истинности признака x2
x3	float	Значение истинности признака x3
x4	float	Значение истинности признака x4
x5	float	Значение истинности признака x5
x6	float	Значение истинности признака x6
x7	float	Значение истинности признака x7
x8	float	Значение истинности признака x8
min_value	float	Минимальное значение
max_value	float	Максимальное значение
result	float	Результат активации
n_rule	integer	Номер правила-победителя
situation	string	Название ситуации

Таблица 6.13 – Advice – база знаний по выдаче рекомендаций

Имя поля	Тип поля	Описание поля
id	integer	Номер записи
situation_1	float	Входная переменная

Продолжение табл. 6.13.

situation_2	float	Дополнительная входная переменная
additional_condition	float	Дополнительное условие
criticaly_factor	nvarchar	Коэффициент критичности
advice	ntext	Формулировка рекомендаций

Таблица 6.14 – Activation_A – таблица вычисленных значений истинности термов и признаков в правилах выдачи рекомендаций

Имя поля	Тип поля	Описание поля
id	int	Номер по порядку
z1	float	Значение истинности признака z1
z2	float	Значение истинности признака z2
z3	float	Значение истинности признака z3
min_value	float	Минимальное значение
max_value	float	Максимальное значение
result	float	Результат активации
n_rule	int	Номер правила-победителя
advice	string	Рекомендация

Диаграммы активности подсистемы «Советчик». На рис. 6.12 показана диаграмма активности «Вычисление значений признаков» – первой процедуры процесса распознавания ситуации. Алгоритм вычисления значений признаков описан в подразделе 5.4. На рис. 6.13 показана диаграмма активности «Распознавание ситуаций». Алгоритм распознавания описан в подразделе 5.4. На рис. 6.14 показана диаграмма активности «Выдачи рекомендаций». На рис. 6.15 показана диаграмма активности «Коррекция базы знаний». Данный алгоритм изложен в подразделе 5.5



Рисунок 6.12 – Диаграмма активности «Вычисление значений признаков»

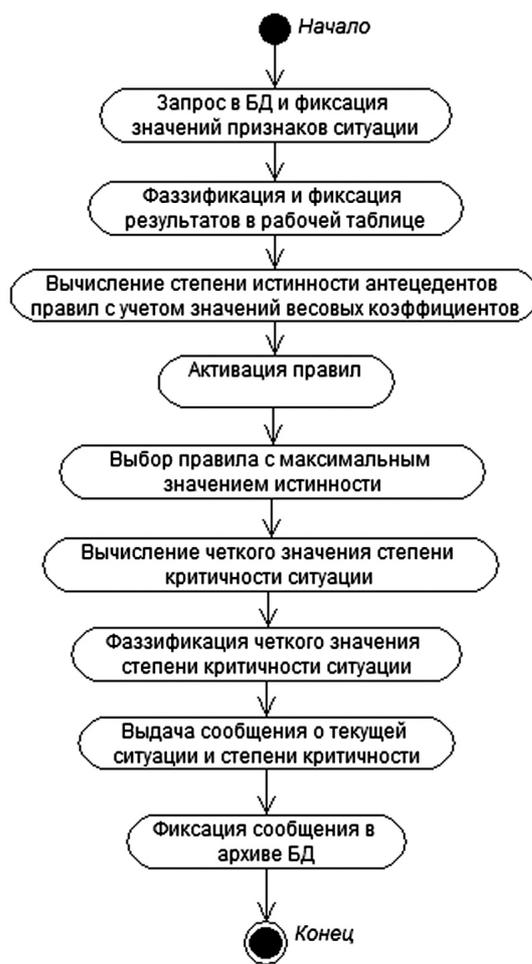


Рисунок 6.13 – Диаграмма активности «Распознавание ситуаций»



Рисунок 6.14 – Диаграмма активности «Выдача рекомендаций»

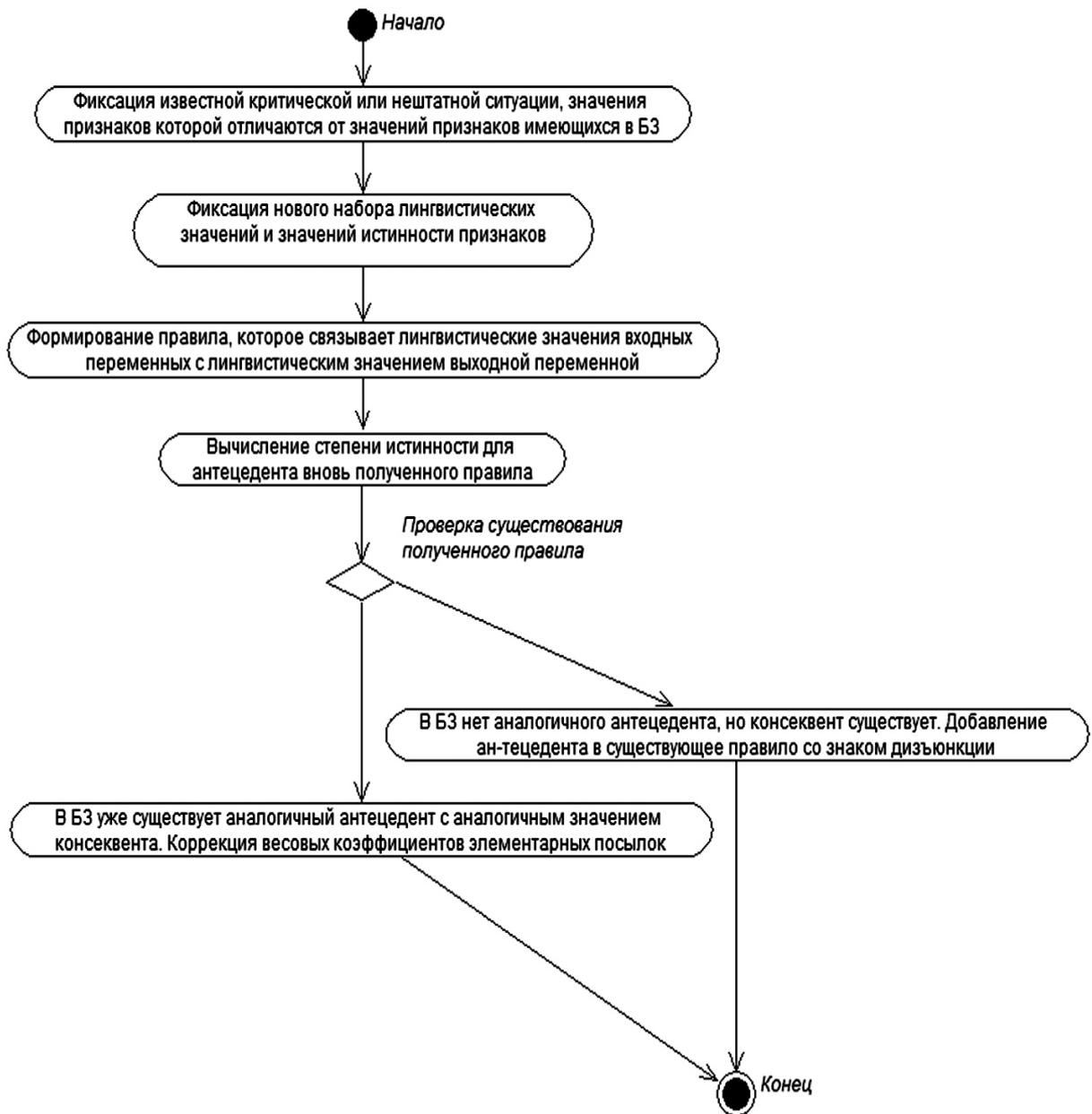


Рисунок 6.15 – Диаграмма активности «Коррекция базы знаний»

Программная реализация подсистемы «Советчик». Программная реализация подсистемы «Советчик» показана на видеодиаграммах рис. 6.16 – 6.20. На рис. 6.16 представлена видеодиаграмма основного модуля подсистемы.. Пользователь имеет возможность оценить ситуацию на ростовой установке по значениям лингвистических переменных, а также интегрально, получая сообщения о текущих событиях и степени критичности ситуации. В окне рекомендаций оператор получает советы по коррекции процесса выращивания.

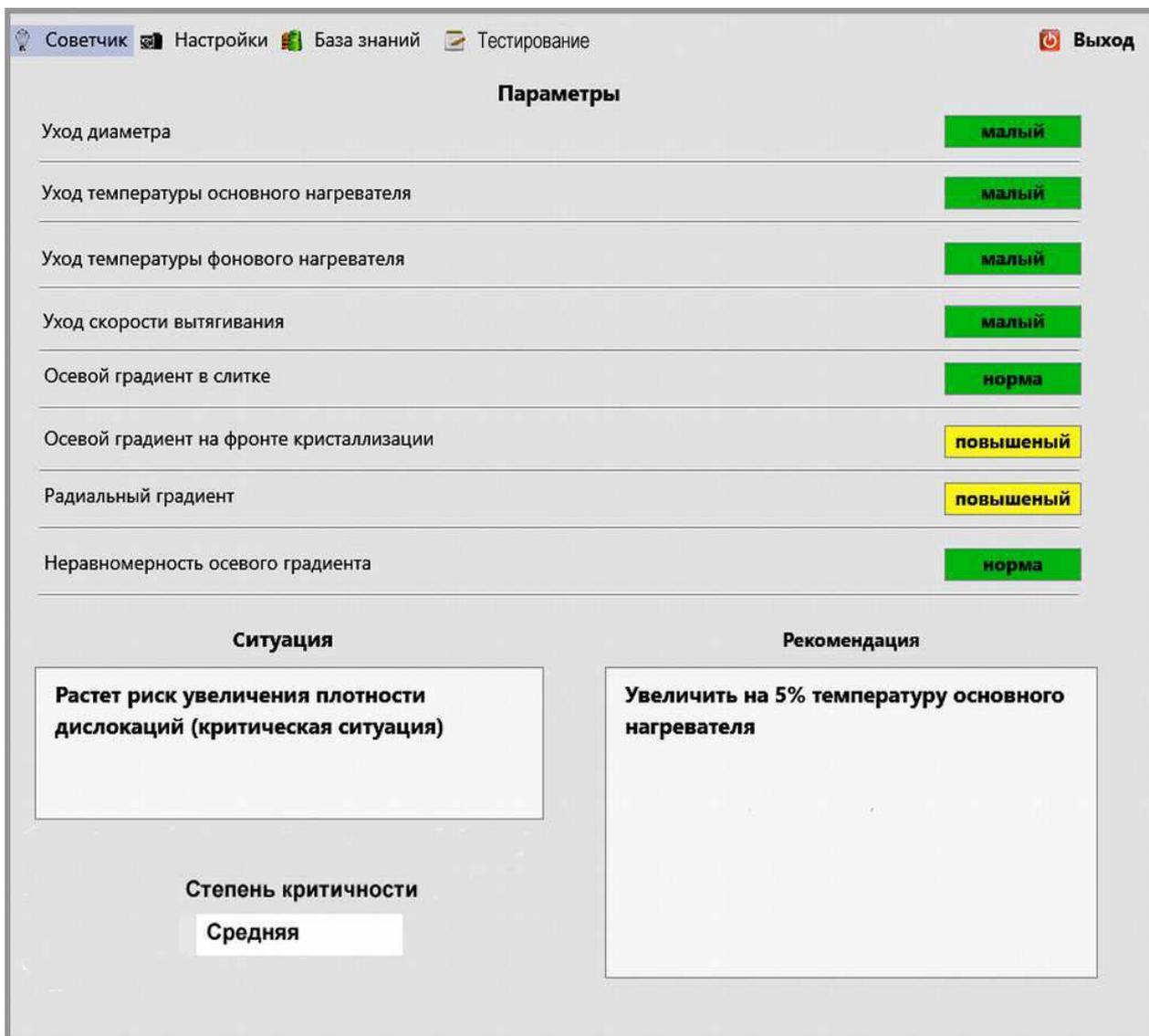


Рисунок 6.16 – Главное окно подсистемы «Советчик»

На рис. 6.17 представлена видеодиаграмма окна «Настройки». Пользователь, имеющий соответствующие права доступа, может изменить границы и координаты центров кластеров, их наименования, добавить новые кластеры и признаки.

На рис. 6.18 представлена видеодиаграмма окна модуля «База знаний». Пользователь, имеющий соответствующие права доступа, может корректировать содержание БЗ вручную, добавлять новые правила, редактировать существующие.

Настройки						Выход
Границы и координаты центров кластеров по признакам						
№, п/п	Наименование признака	Наименование кластера	Левая граница	Центр	Правая граница	
1.1	Уход диаметра (абс. величина)	Малый	0	0.14	0.33	^
1.2	Уход диаметра (абс. величина)	Средний	0.3	0.44	0.56	
1.3	Уход диаметра (абс. величина)	Большой	0.5	0.78	1	
2.1	Уход температуры ОН	Малый	0	0.15	0.36	
2.2	Уход температуры ОН	Средний	0.32	0.51	0.66	
2.3	Уход температуры ОН	Большой	0.63	0.82	1	
3.1	Уход температуры ФН	Малый	0	0.15	0.34	
3.2	Уход температуры ФН	Средний	0.3	0.52	0.72	v

Рисунок 6.17 – Модуль «Настройки» подсистемы «Советчик»

База знаний										Выход
Диагностика ситуаций										
№, п/п	Входные переменные								Ситуация	
	x1	x2	x3	x4	x5	x6	x7	x8	D	
1.1	малый	малый	малый	в норме	S1	^				
2.1	средний	средний	средний	1	1	1	1	1	S2	
3.1	большой	1	1	1	1	1	1	1	S3	
4.1	1	1	1	1	повыш.	1	1	1	S4	
4.2	1	1	1	1	1	1	большой	1	S4	
4.3	1	1	1	1	1	1	1	высокая	S4	
5.1	1	большой	1	1	высокий	1	1	высокая	S5	
6.1	1	1	1	1	1	низкий	1	1	S6	v

Выдача рекомендаций				
№, п/п	Входные переменные		Код рекомендации	Формулировка рекомендаций
1	S1	1	A0	<Ситуация штатная>
2	S2	1	A1	<Проверить стабильность Тн и Тф. При необходимости изменить уставку Тн или Тф на величину ухода температуры с обратным знаком>
3	S4	x5 = "повышенный"	A2	<Изменить уставку температуры ФН в сторону увеличения на 5...10%>
4	S4	x7 = "высокий"	A3	<Неправильная экранировка слитка.>

Рисунок 6.18 – Окно модуля «База знаний»

Таким образом, в подсистеме «Советчик» реализована информационная технология поддержки принятия оперативных решений по коррекции режима

и хода процесса выращивания монокристаллов. Оптимальные условия остывания выращенной части слитка в тепловом узле обеспечиваются на стадии технологической подготовки производства путем применения подсистемы «Экран», описание которой приведено в подразделе 6.3.

6.3. Реализация информационной технологии оптимизации условий остывания слитков в установке для выращивания монокристаллов. Подсистема «Экран».

Функциональная модель подсистемы «Экран». Функциональная модель подсистемы «Экран» изображена в нотации DFD на рис. 6.19.

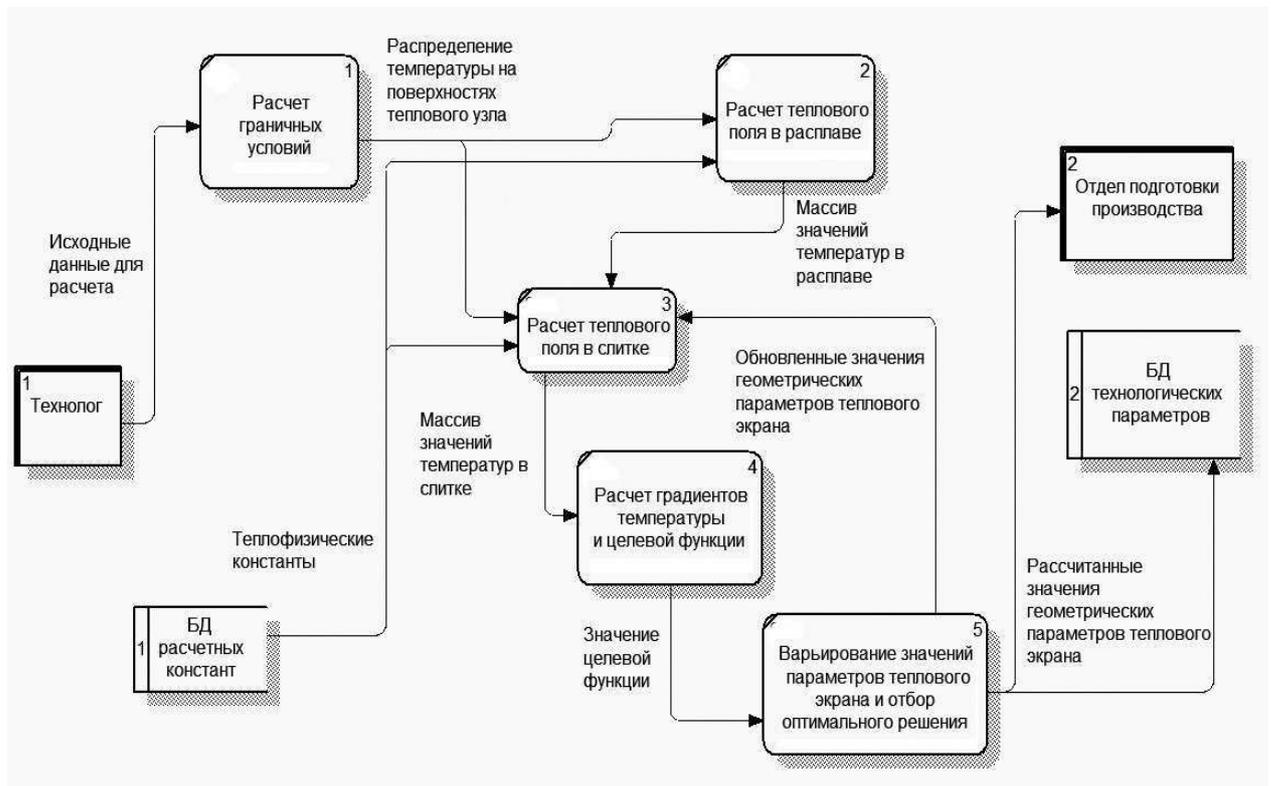


Рисунок 6.19 – Диаграмма потоков данных подсистемы «Экран»

После фиксации исходных данных производится расчет граничных условий. Далее производится расчет температурного поля расплава, что создает предпосылки для расчета температурного поля слитка с учетом влияния теплового экрана. Параметры экрана задаются в виде массива (популяции) вариантов решений. При помощи эволюционного алгоритма с уточнением координат

нат лидеров производится отбор наилучшего сочетания геометрических параметров по критерию минимизации неравномерности температурных градиентов по оси слитка и минимизации температурных градиентов по радиусу слитка на уровне выхода слитка из слоя герметизатора.

Информационное обеспечение подсистемы “Экран”. На рис. 6.20 показана логическая структура базы данных подсистемы “Экран”.

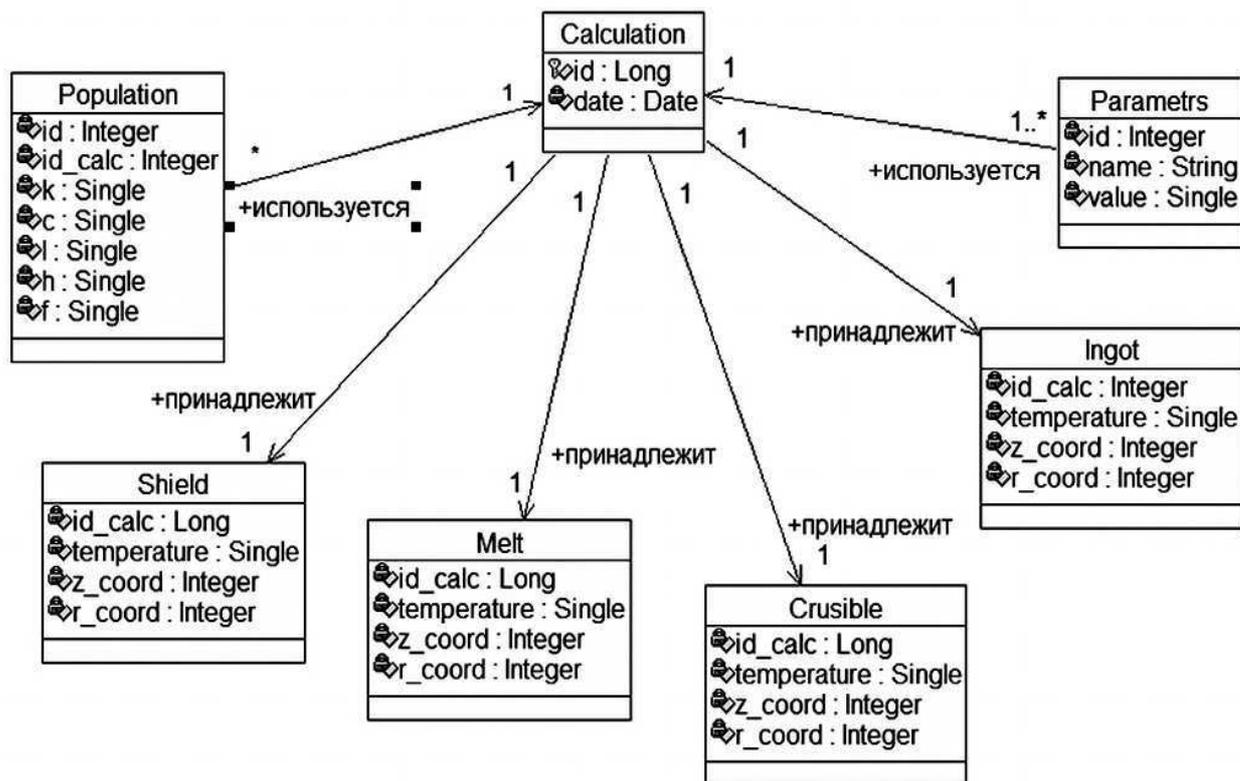


Рисунок 6.20 – Логическая структура базы данных подсистемы “Экран”

В состав БД входят 7 таблиц, структура и содержание которых приведено ниже.

Таблица 6.15 – *Parametrs* – таблица исходных данных расчета. Содержит теплофизические константы материалов, физические характеристики слитка и т.п.

Таблица 6.16 – *Population* – таблица, содержащая популяцию решений – геометрических параметров экрана, и значения целевой функции.

Таблица 6.17 – *Calculation* – таблица результатов текущего расчета и агрегации данных из таблиц *Ingot*, *Melt*.

Таблица 6.18 – *Ingot* – таблица результатов текущего расчета темпера-

турного поля слитка.

Таблица 6.19 – Crucible – таблица, содержащая результаты расчета значений граничных условий на стенке тигля.

Таблица 6.20 – Melt – таблица содержит результаты текущего расчета температурного поля расплава.

Таблица 6.21 – Shield – содержит данные по температуре экрана в заданных точках. Используется при расчете температурного поля слитка.

Таблица 6.15 – Parametrs – исходные данные расчета

Имя поля	Тип поля	Описание поля
*id	integer	Номер параметра
name	String	Имя параметра
value	float	Значение параметра

Таблица 6.16 – Population – популяция решений

Имя поля	Тип поля	Описание поля
id	integer	Номер особи
id расчета	integer	Поле для связывания с таблицей Calculation
K	float	Наклон экрана
C	float	Сдвиг экрана вдоль радиуса
L	float	Длина экрана
H	float	Высота над уровнем расплава
F	float	Целевая функция

Таблица 6.17 – Calculation – результаты текущего расчета

Имя поля	Тип поля	Описание поля
id	integer	Номер итерации
date	Date	Дата расчета

Таблица 6.18 – Ingot – результатов текущего расчета
температурного поля слитка

Имя поля	Тип поля	Описание поля
id	int	Номер параметра
id расчета	int	Поле для связывания с таблицей CurrentCalculation
температура	float	Температура слитка в точке
X	int	Координата X
Y	int	Координата Y

Таблица 6.19 – Crucible – результаты расчета значений
граничных условий на стенке тигля

Имя поля	Тип поля	Описание поля
id	int	Номер параметра
id расчета	int	Поле для связывания с таблицей CurrentCalculation
Температура	float	Температура стенки тигля в точке
z	int	Координата Z

Таблица 6.20 – Melt – результаты текущего расчета
температурного поля расплава

Имя поля	Тип поля	Описание поля
id	int	Номер параметра
id расчета	int	Поле для связывания с таблицей CurrentCalculation
Температура	float	Температура расплава в точке
r	int	Координата R
z	int	Координата Z

Таблица 6.21 – Shield – сохранение данных по температуре экрана

Имя поля	Тип поля	Описание поля
id	int	Номер параметра
id популяции	int	Поле для связывания с таблицей CurrentCalculation
Температура	float	Температура экрана в точке
r	int	Координата R
z	int	Координата Z

Диаграммы активности подсистемы «Экран». На рис. 6.21 и 6.22 показаны диаграмма активности “Тепловой расчет” и “Оптимизация”. Программное обеспечение подсистемы позволяет задать: размеры и форму тигля и слитка; размеры, форму и положение экрана и фонового нагревателя; толщину слоя герметизатора и его температуропроводность; температуропроводность кристалла и расплава и их начальные температуры; граничные условия первого, второго и третьего рода; ряд других параметров, таких как приведенные коэффициенты черноты слитка, экрана, тигля, герметизатора, коэффициент конвективного теплового потока во внешнюю среду и др. Применяемая в тепловом расчете математическая модель является плоской и осесимметричной, т.е. рассматривает тепловой узел в радиальном разрезе, секущая плоскость которого проходит через ось симметрии узла. В модель включены: слиток; система тепловых экранов, включая фоновый нагреватель, размещенный в слое герметизатора; герметизатор; расплав арсенида галлия и тигель.

В программе реализованы следующие функции:

1. Инициализация модели в соответствии с заданными параметрами.
2. Моделирование лучевого теплообмена.
3. Моделирование теплообмена за счёт температуропроводности и конвекции.
4. Оптимизация размеров и положения экрана.
5. Предоставление данных, полученных в результате оптимизации в виде таблицы.

6. Предоставление возможности экспорта полученных данных в форматах, принятых в программах MS Excel и MathCad.

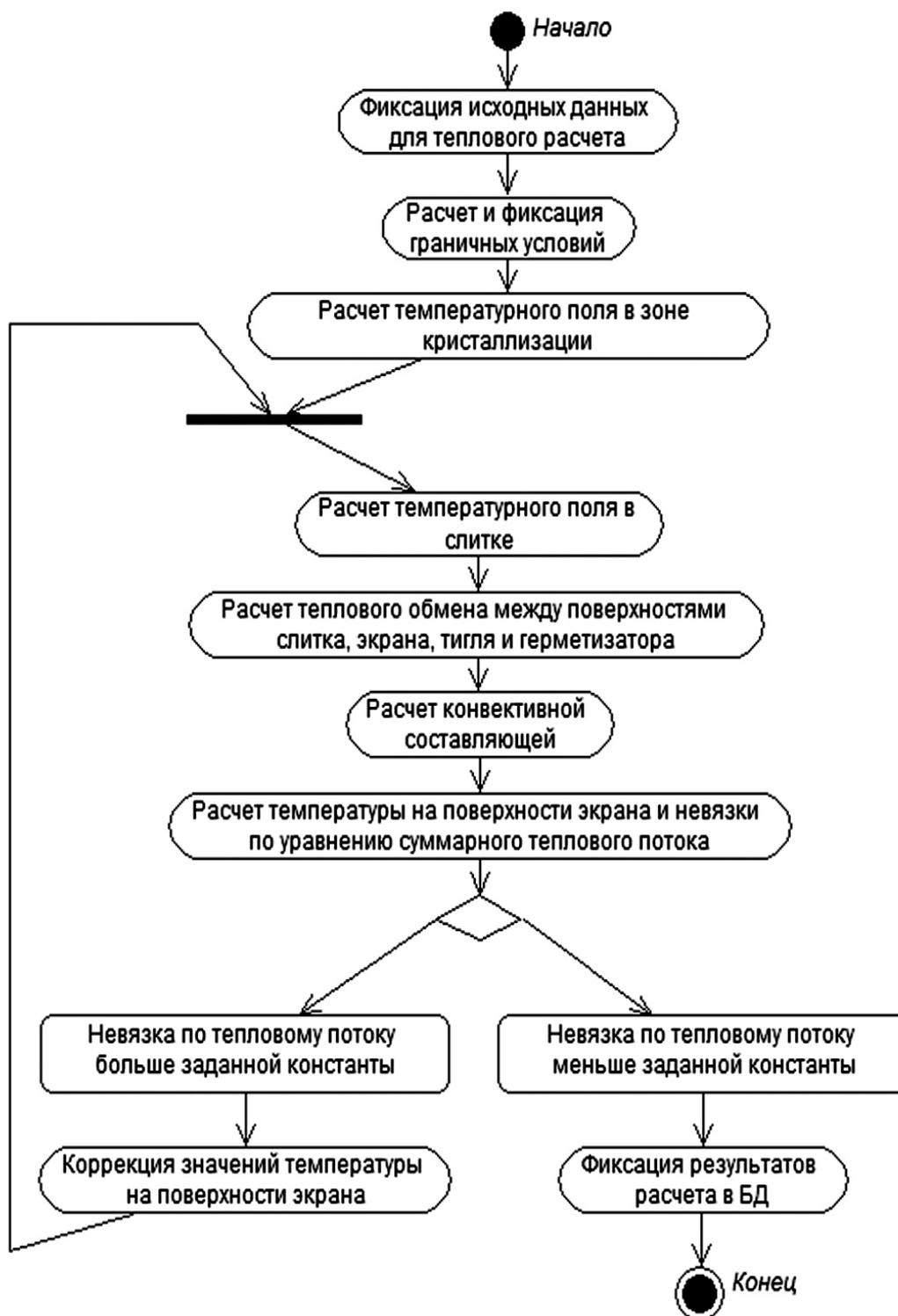


Рисунок 6.21 – Диаграмма активности “Тепловой расчет”

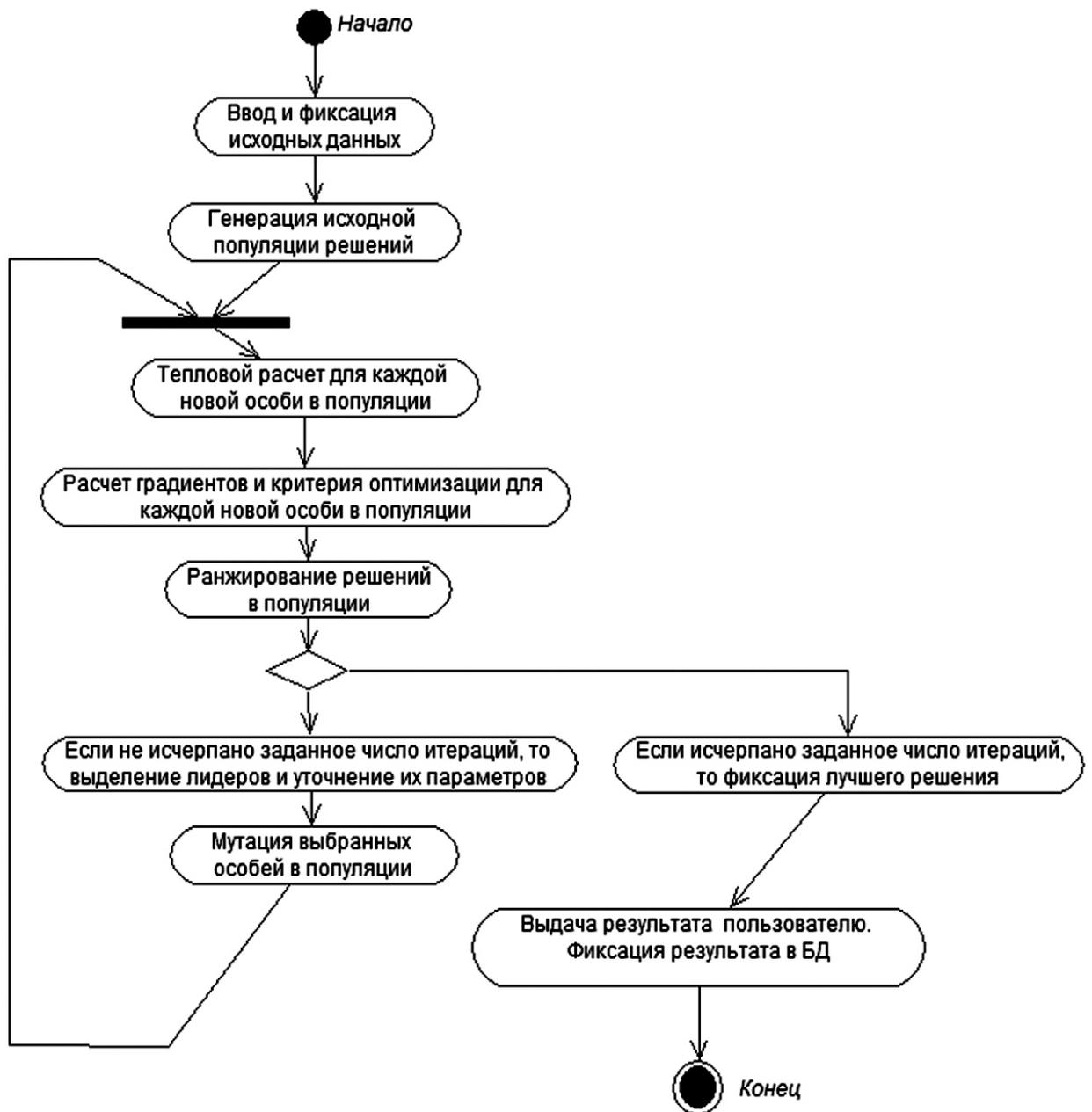


Рисунок 6.22 – Диаграмма активности “Оптимизация”

Программная реализация подсистемы «Экран». Программная реализация подсистемы «Экран» показана на видеодиаграммах рис. 6.23 – 6.26.

На рис. 6.23 представлена видеодиаграмма основной формы, на которой задаются исходные данные для теплового расчёта, показана общая схема теплового узла ростовой установки и указаны отдельные, наиболее важные геометрические параметры. В одной из версий программы радиус теплового экрана является дискретной переменной величиной. Окно ввода исходных данных

для теплового расчета практически полностью отражено на видеограмме рис. 6.12 в описании подсистемы «Мониторинг».

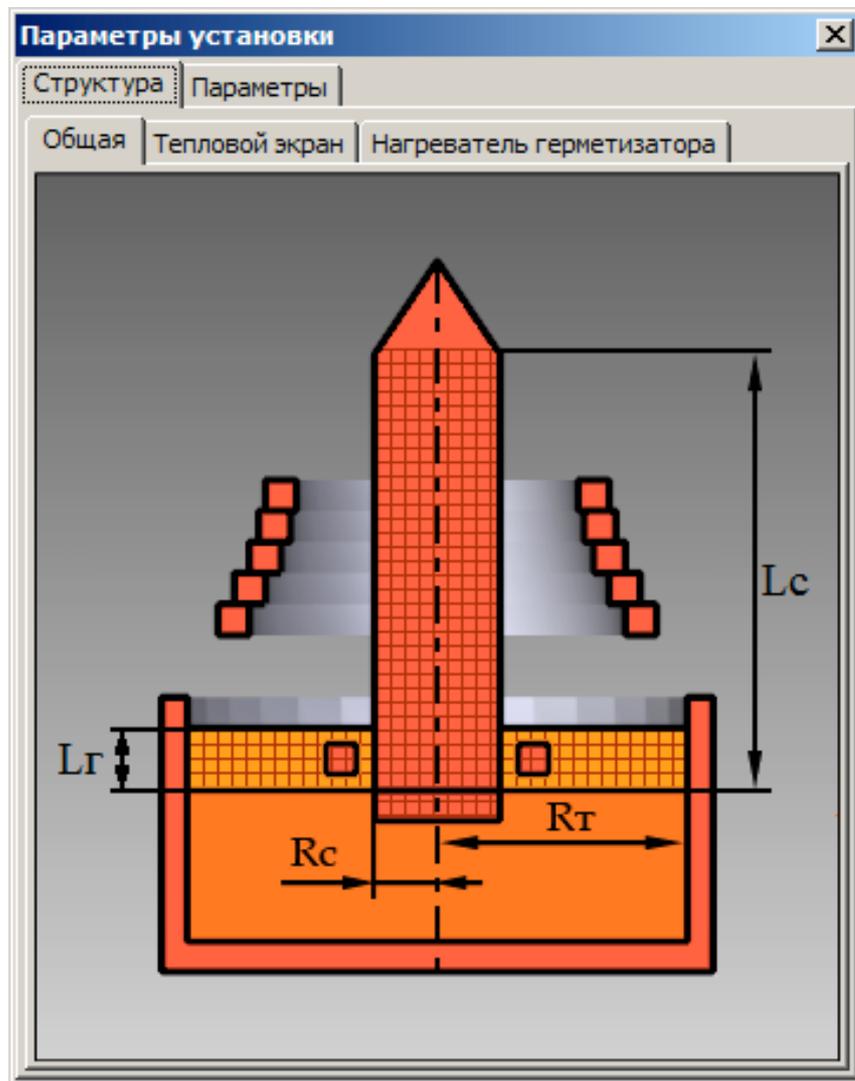


Рисунок 6.23 – Общая схема теплового узла ростовой установки для расчета параметров экрана

На рис. 6.24 показано отображение распределения температуры в слитке вдоль вертикальной оси. В программе можно задавать радиус, на котором желательно контролировать осевое распределение температуры в слитке. При $R=R_c$ отображается распределение температуры на поверхности слитка.

На рис. 6.25 показано распределение температуры в слитке по радиусу на заданной высоте над уровнем герметизатора.

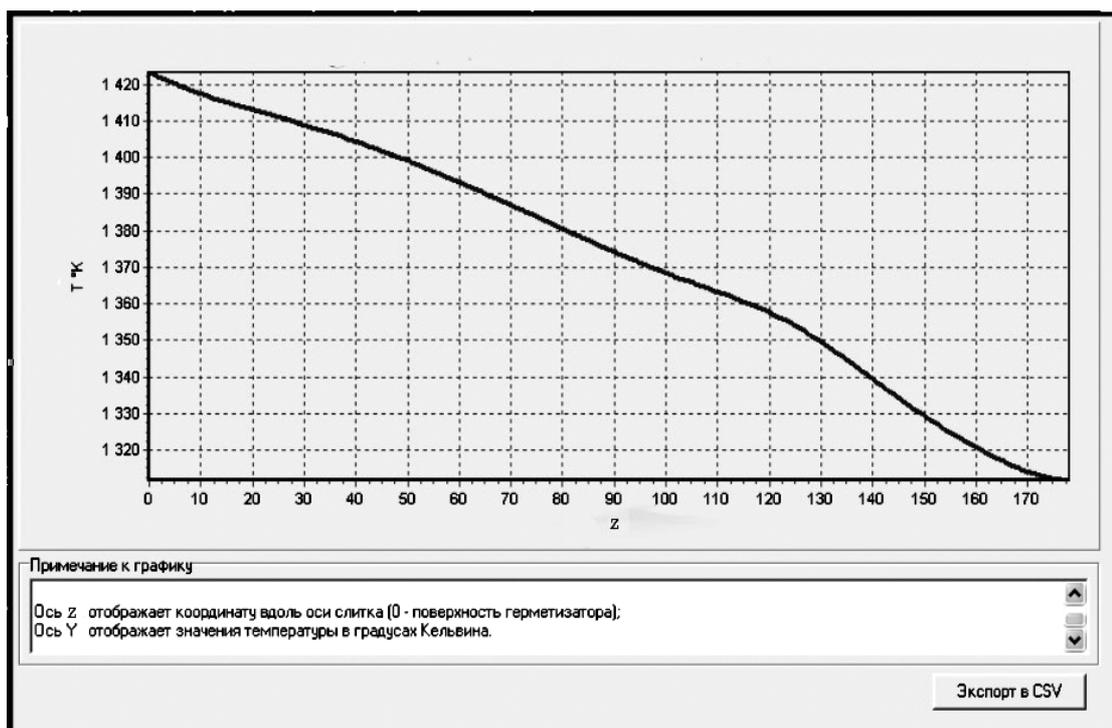


Рисунок 6.24 – График распределения температуры в осевом направлении слитка на радиусе 10 мм

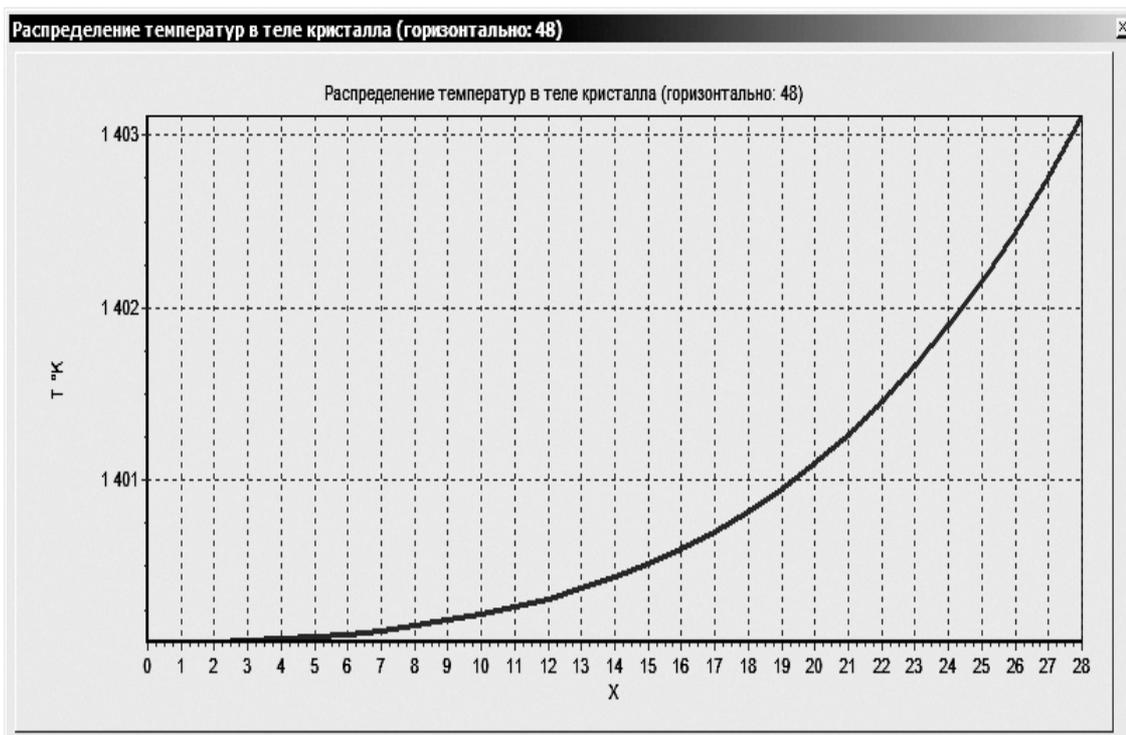


Рисунок 6.25 – Пример графика распределения температуры по радиусу слитка на высоте 48 мм над уровнем герметизатора

На рис. 6.26 показана видеогрaмма окна выдачи результатов оптимизации геометрических параметров теплового экрана.

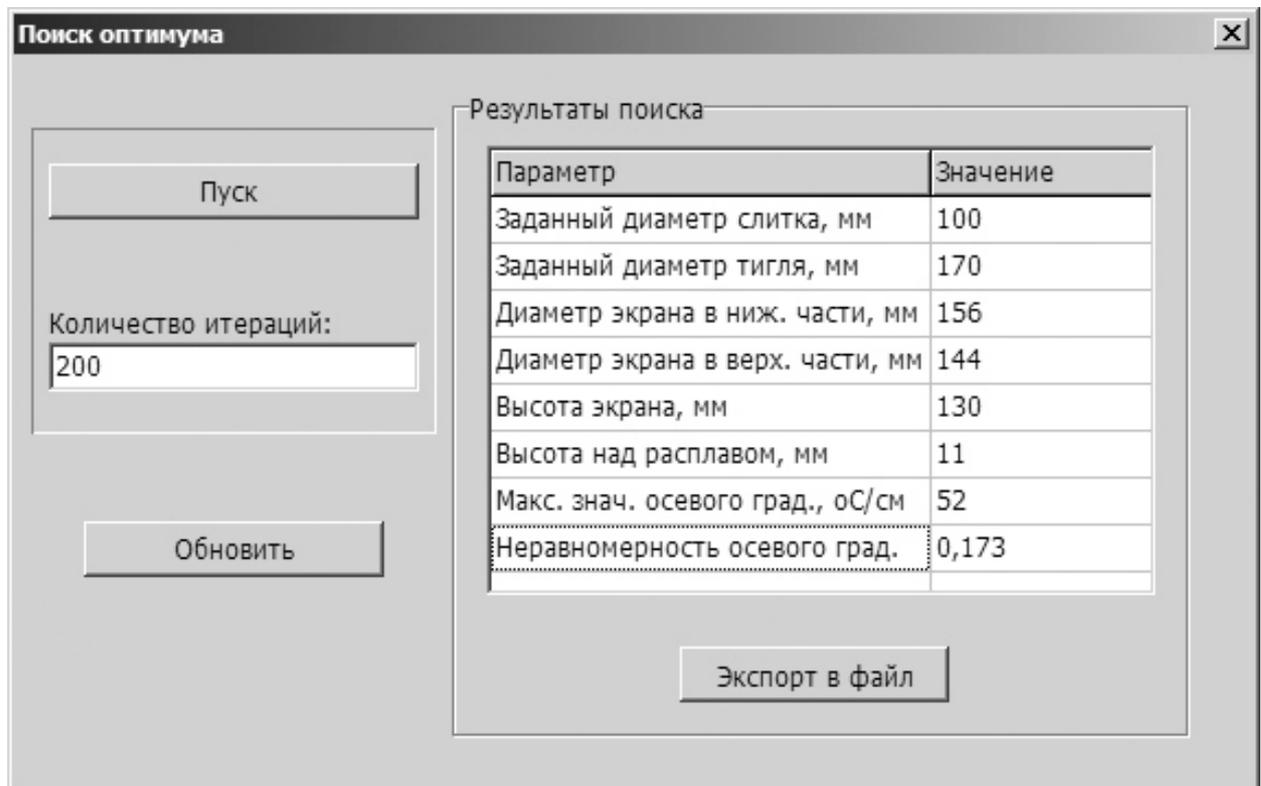


Рисунок 6.26 – Окно выдачи результатов оптимизации геометрических параметров теплового экрана

Для оценки влияния изменений в геометрии теплового узла была использована установка «Арсенид 1М», в которой установлен экран с оптимальными геометрическими параметрами. Сравнение осуществлялось со слитками, полученными на установке «Арсенид 1». Температурные профили и осевые градиенты, полученные в экспериментах, были сведены в таблицы, по которым построены графики, показанные на рис. 6.27 и 6.28. Преимущества теплового узла установки «Арсенид 1М» проявляются в большей равномерности распределения температуры вдоль оси слитка. На рисунке 6.27 показаны температурные профили вдоль оси z слитка, рассчитанные для геометрии теплового узла ростовой установки «Арсенид 1» (кривая 1) и для геометрии теплового узла установки «Арсенид 1М» с оптимальным расположением и размерами экрана (кривая 2). На рис. 6.28 показаны градиенты температуры вдоль оси z слитка для геометрии теплового узла ростовой установки «Арсенид 1» (кривая

1) и для геометрии теплового узла установки «Арсенид 1М» (кривая 2).

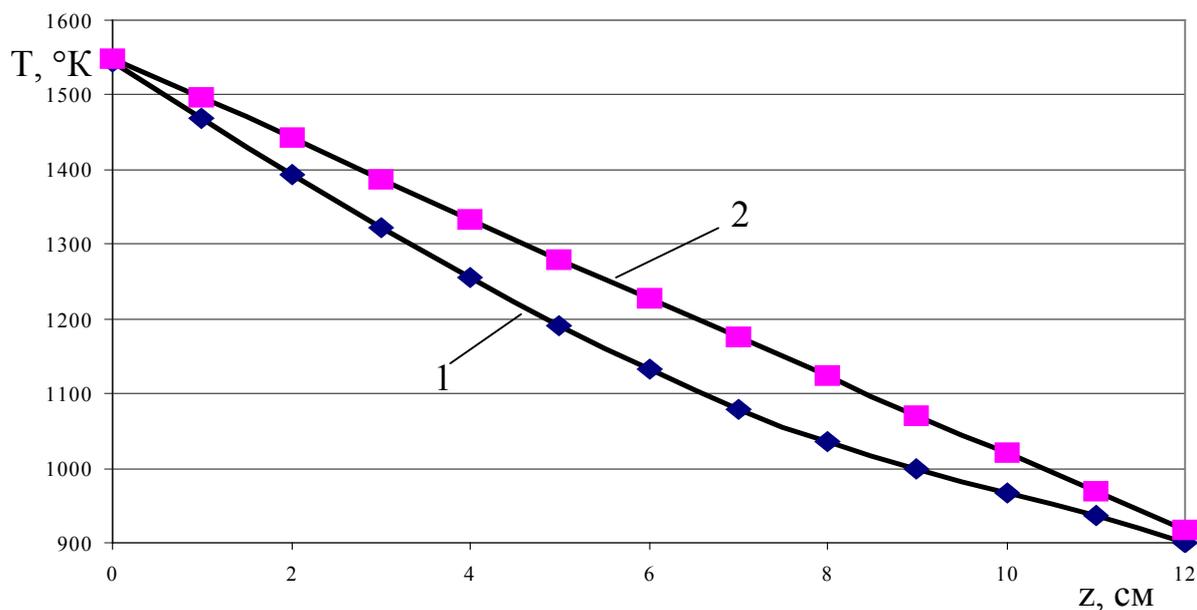


Рисунок 6.27 – Результаты расчетов температурного профиля по оси z слитка: 1 – установка «Арсенид-1»; 2 - установка «Арсенид-1М».

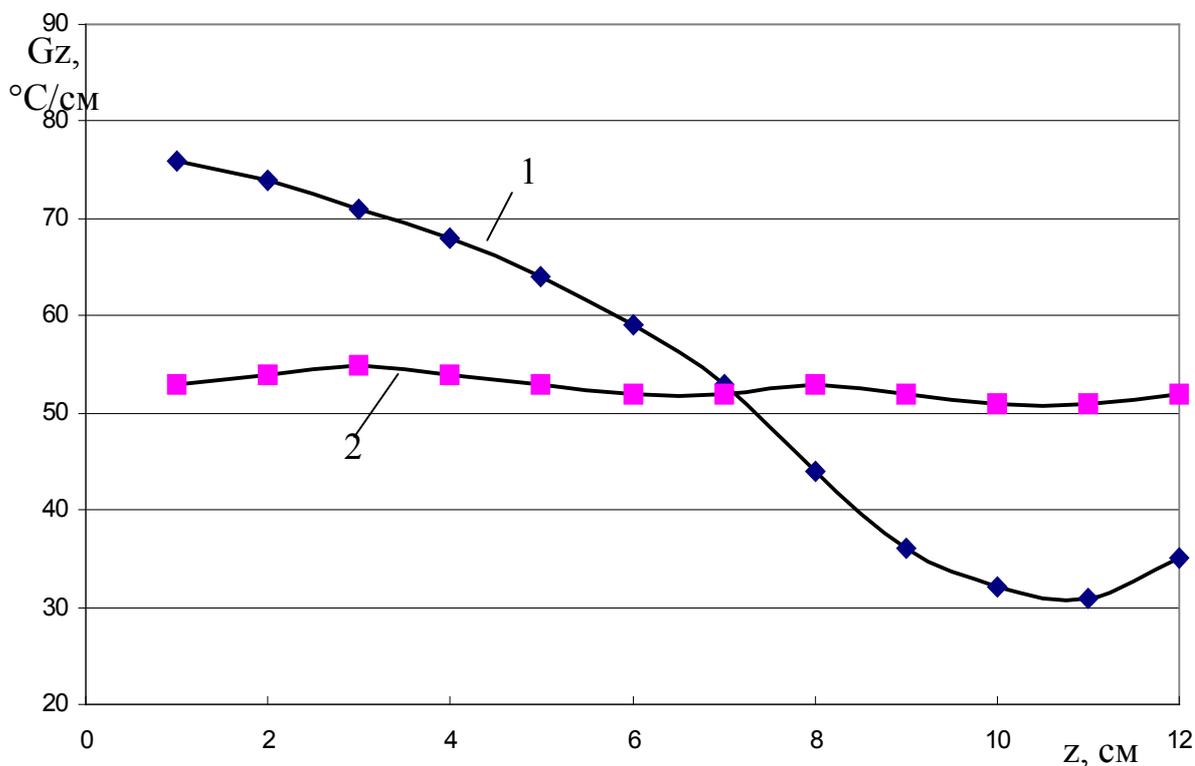


Рисунок 6.28 – Результаты расчетов градиента температуры вдоль оси z слитка: 1 – установка «Арсенид - 1»; 2 – установка «Арсенид - 1М».

Видно, что тепловой узел установки «Арсенид 1М» обеспечивает максимальную линейность распределения температуры, то есть оптимизация по критерию (4.43) прошла успешно.

Далее была исследована зависимость усреднённого температурного градиента Gz от радиуса экрана при различной длине слитка. Результаты исследования приведены на рис. 6.29. Видно, что существует совершенно четкая зона оптимального радиуса экрана (примерно 43...45 мм для слитка диаметром 60 мм), которая зависит от длины слитка.

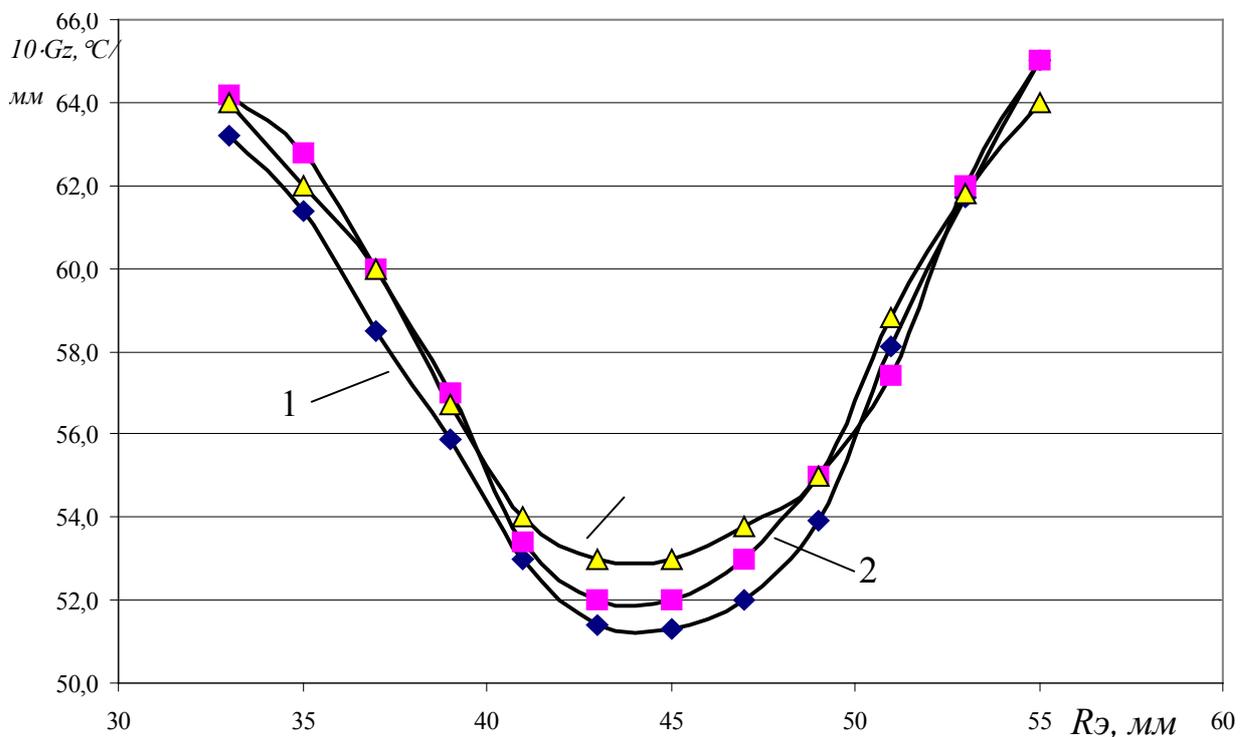


Рисунок 6.29 – Зависимость усредненного температурного градиента Gz от радиуса экрана при различной длине слитка диаметром 60 мм:
1 – $L_{сл} = 50$ мм; 2 – $L_{сл} = 80$ мм; 3 – $L_{сл} = 120$ мм

Зависимость усредненного температурного градиента Gz от соотношения длины слитка и длины экрана (на начальной стадии роста монокристалла до 12 см) показана на рис. 6.30. Видно, что при изменении данного соотношения значение осевого градиента температуры изменяется слабо, если значение радиуса экрана выбрано в пределах оптимального диапазона.

На рис. 6.31 показано изменение усредненного значения Gz от высоты расположения экрана $H_э$ при различных значениях радиуса экрана.

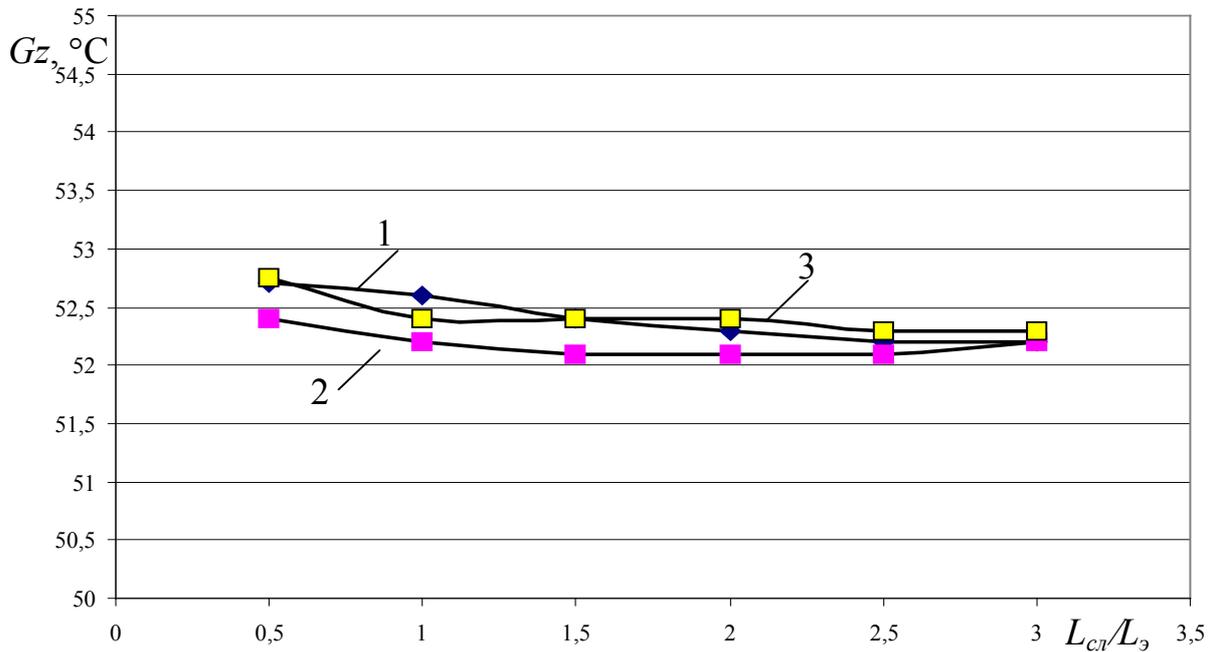


Рисунок 6.30 – Зависимость усредненного температурного градиента Gz от соотношения длины выращенной части слитка и длины экрана для различных значений радиуса экрана: 1 – $R_э = 41$ мм; 2 – $R_э = 43$ мм; 3 – $R_э = 45$ мм.

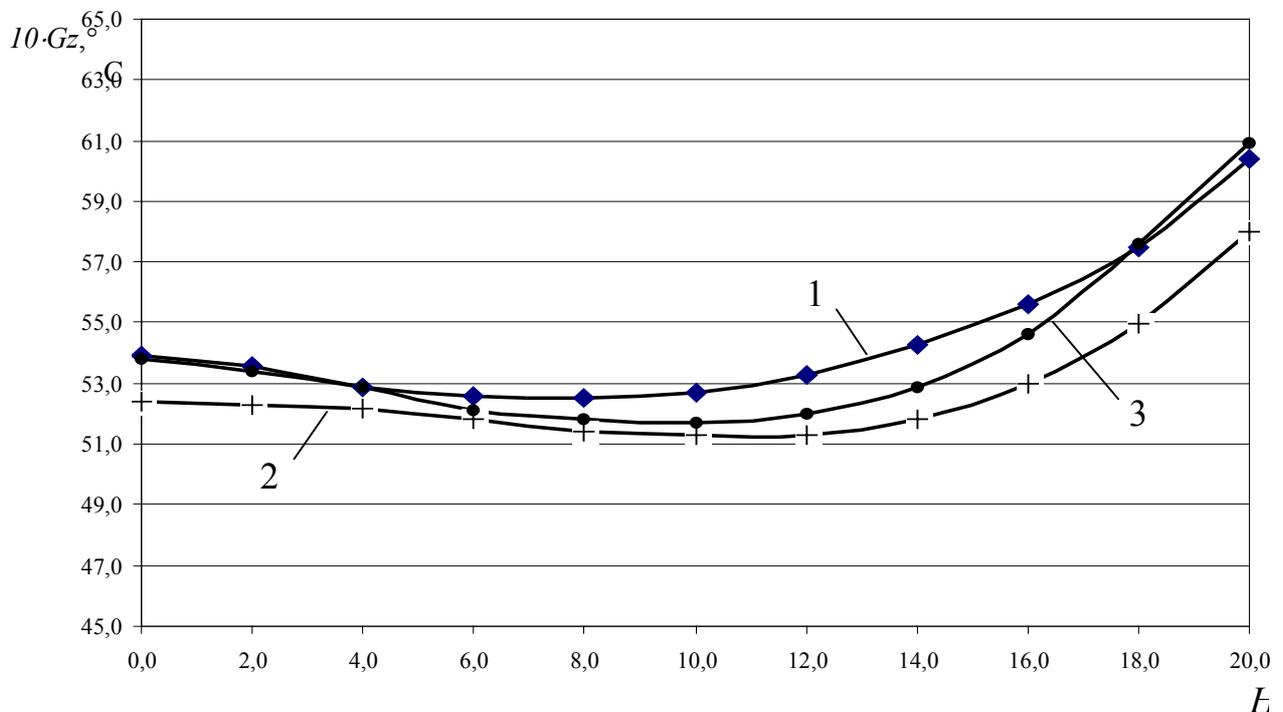


Рис. 6.31 – Изменение усредненного значения Gz от высоты расположения экрана $H_э$ при различных значениях радиуса экрана: 1 – $R_э = 39$ мм; 2 – $R_э = 43$ мм; 3 – $R_э = 47$ мм.

Таким образом, в подсистеме «Экран» реализована информационная технология оптимизации размеров и положения теплового экрана, что необходимо для обеспечения оптимальных условий остывания выращенной части слитка в процессе выращивания. Подсистема используется на стадии технологической подготовки производства слитков нового типоразмера или в процессе реконструкции тепловых узлов ростовых установок.

6.4. Исследование остаточных напряжений и уровня дислокаций в слитках GaAs при использовании ИАС УКПВ

Оптимизация тепловых условий выращивания и остывания слитка направлена, в конечном счете, на снижение уровня плотности дислокаций в монокристаллах и, соответственно, на повышение потребительских свойств конечного продукта. Поскольку величина плотности дислокаций прямо зависит от величины остаточного напряжения по длине слитка, то представляет интерес изменение этих показателей после внедрения ИАС УКПВ. Для исследования влияния тепловых условий на качество слитков были проведены эксперименты, подобные описанным в работе [234]. Среднее значение остаточного напряжения определялось по классическому выражению [129, 130]:

$$\sigma = \frac{\sum_{i=1}^n \sigma_i}{n},$$

где n – количество пластин GaAs, участвующих в эксперименте. Различие в результатах измерений, которое представляет собой уменьшение значения остаточного напряжения, выраженное в процентном отношении:

$$\Delta = \frac{\sigma_{1A}}{\sigma_1} \times 100\%,$$

где σ_{1A} – среднее значение остаточных напряжений в слитках, выращенных на установке «Арсенид 1М», и σ_1 – среднее значение остаточных напряжений в слитках, выращенных на установке «Арсенид 1».

Полученные результаты представлены в таблице 6.22. Результаты показы-

вают, что значения остаточных напряжений в слитках, выращенных на усовершенствованной ростовой установке «Арсенид-1М», снизились по сравнению со слитками, выращенными на установке «Арсенид-1», в верхней части слитка на 54 %, в средней части слитка на 53 % и в нижней части слитка на 50 %.

Таблица 6.22 – Сравнительные результаты измерений значения остаточного напряжения в слитках GaAs, выращенных на установках «Арсенид 1» и «Арсенид 1М»

	Остаточное напряжение в слитке, установка «Арсенид 1», $\cdot 10^6$ Па	Остаточное напряжение в слитке, установка «Арсенид 1М», $\cdot 10^6$ Па	Относительное уменьшение остаточного напряжения, %
Верхняя часть слитка	5,8	2,66	54
Средняя часть слитка	4,2	2,0	53
Нижняя часть слитка	3,4	1,7	50

На рис. 6.32 показано усреднённое распределение плотности дислокаций в слитках ПИН GaAs: а) без применения ИАС УКПВ; б) с применением

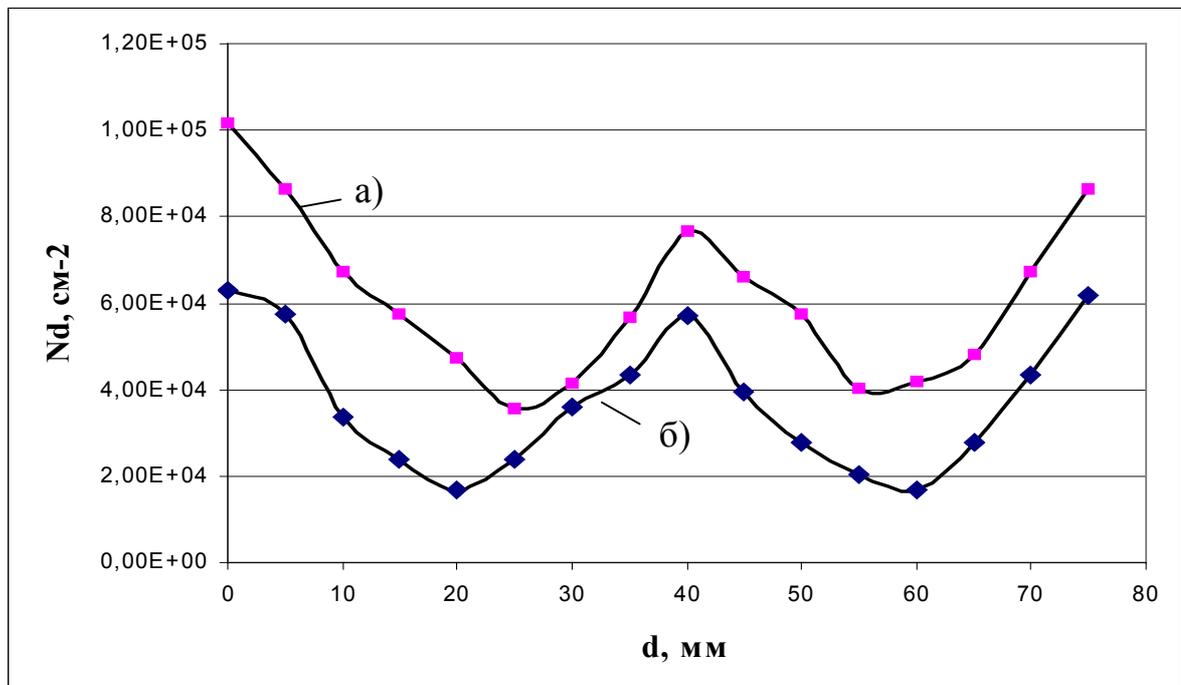


Рисунок 6.32 – Распределение плотности дислокаций в слитке ПИН GaAs: а) без применения ИАС; б) с применением ИАС.

ИАС УКПВ.

Из экспериментальных данных исследования плотности дислокаций по длине слитков выращенных на ростовой установке «Арсенид 1М», можно сделать вывод о том, что применение ИАС УКПВ позволило уменьшить остаточные напряжения и, как следствие, достичь уменьшения плотности дислокаций в слитке в среднем в 1,5 раза.

6.5. Оценка экономического эффекта от внедрения ИАС УКПВ

В данном подразделе проведена экспериментальная оценка экономической эффективности внедрения на производственном предприятии разработанной ИАС УКПВ.

В производстве монокристаллов полупроводников актуальной является проблема гарантированного выполнения заказа при обеспечении требуемого качества продукции и объема поставок. С целью определения факторов, учет которых необходимо проводить при анализе экономической эффективности применения ИАС УКПВ, первоначально рассмотрим последствия возникновения нештатных ситуаций, которые являются одной из причин появления брака и соответствующих убытков.

Нештатной ситуацией, как было сказано выше, будем называть ситуацию, в которой по тем или иным причинам происходит срыв нормального протекания процесса выращивания. Срыв, обнаруживается системой мониторинга технологического процесса или оператором. К причинам срыва относят недопустимое отклонение от заданного диаметра растущего кристалла, повышение вероятности возникновения высокого уровня дислокаций, отказ в системе контроля и т.п.

В случае нештатной ситуации выбор того или иного варианта действий зависит от множества факторов, среди которых:

- какая доля массы расплава была закристаллизована до возникновения нештатной ситуации;
- продолжительности пребывания загрузки в расплавленном состоянии;

- степени летучести легирующей примеси;
- цены данной марки полупроводника и текущей стоимости используемых ресурсов;
- длительности процесса выращивания до возникновения нештатной ситуации.

В случае срыва процесса должно приниматься решение о дальнейших действиях, вариантами которых могут быть [218]:

1. Сплавить выращенный монокристалл и начать процесс заново.
2. Сформировать нижний конус, вывести слиток в шлюзовую камеру, выгрузить его и начать выращивание нового слитка из оставшегося в тигле расплава.
3. Продолжить вытягивание слитка, зная, что вытянутая после срыва нормального роста часть пойдёт на переплавку, а не в готовую продукцию (осуществить т. н. «выборку расплава»).

Естественно, что нештатная ситуация может возникнуть на разных стадиях процесса выращивания монокристаллов: на стадии выращивания «шейки», формирования нижнего или верхнего конуса, выращивания цилиндрической части или формирования нижнего конуса, но наибольший практический интерес представляют случаи возникновения нештатных ситуаций на стадии выращивания цилиндрической части слитка. Для решения поставленной задачи необходимо знание значений ряда технико-экономических параметров, характеризующих конкретные условия производства. В табл. 6.23 приведены значения этих параметров для условий ЧП «Галар».

Таблица 6.23 – Значения параметров, учитываемых при принятии решений

№ п/п	Показатель		Характеристика показателя и единица измерения
	Обозначение	Значение	
1	$D_{ц}$	76, 100	Диаметр цилиндрической части слитка, мм

Продолжение табл. 6.23.

2	L_k	120	Средняя длина извлекаемого слитка, мм
3	m_z	5	Масса загрузки, кг
4	γ_k	5,316	Удельная плотность кристалла, г/см ³
5	$t_{пл}$	5	Среднее время плавления загрузки, час
6	$t_{выд}$	0.5	Среднее время выдержки расплава, час
7	$t_{ПУЗ}$	1,5	Среднее время подбора условий затравления, час
8	$t_{ш}$	0.5	Среднее время вытягивания «шейки» слитка, час
9	t_k	1	Среднее время формирования верхнего конуса, час
10	$t_{ц}(l_k)$	$0.012l_k$	Среднее время, затрачиваемое на вытягивание цилиндрической части слитка длиной l_k (в мм), час
11	$t_{кн}$	1	Среднее время формирования нижнего конуса, час
12	$\beta_{ш}$	0.2	Коэффициент, учитывающий затраты времени на сплавление шейки (доля от затрат времени на ее вытягивание)
13	$\beta_{ск}$	0.2	Коэффициент, учитывающий затраты времени на сплавление верхнего конуса (доля от затрат времени на его формирование)
14	$\beta_{ц}$	0.2	Коэффициент, учитывающий затраты времени на сплавление цилиндрической части слитка (доля от затрат времени на ее вытягивание)
15	$P_{нпл}$	90	Средняя потребляемая мощность нагревателей при плавлении, кВт
16	$P_{НВЫД}$	80	Средняя потребляемая мощность нагревателей при выдержке расплава, кВт
17	$P_{нпуз}$	80	Средняя потребляемая мощность нагревателей при подборе условий затравления, кВт
18	$P_{ниш}$	80	Средняя потребляемая мощность нагревателей при вытягивании шейки, кВт
19	$P_{нк}$	80	Средняя потребляемая мощность нагревателей при формировании верхнего конуса, кВт

Продолжение табл. 6.23.

20	$P_{ни}$	80	Средняя потребляемая мощность нагревателей при вытягивании цилиндрической части слитка, кВт
21	$P_{НКН}$	85	Средняя потребляемая мощность нагревателей при формировании нижнего конуса, кВт
22	$P_{нси}$	80	Средняя потребляемая мощность нагревателей при сплавлении шейки, кВт
23	$P_{нск}$	80	Средняя потребляемая мощность нагревателей при сплавлении верхнего конуса, кВт
24	$P_{нси}$	80	Средняя потребляемая мощность нагревателей при сплавлении цилиндрической части слитка, кВт
25	$S_{гпл}$	643.2	Средняя стоимость ресурсов (ССР), кроме электроэнергии, потребляемой нагревателем), расходуемых в единицу времени на этапе плавления, грн./час
26	$S_{гвыд}$	643.2	ССР, расходуемых в единицу времени на этапе выдержки расплава, грн./час
27	$S_{гнуз}$	643.2	ССР, расходуемых в единицу времени на этапе подбора условий затравления, грн./час
28	$S_{Руи}$	643.2	ССР, расходуемых в единицу времени на этапе вытягивания шейки, грн./час
29	$S_{РК}$	643.2	ССР, расходуемых в единицу времени на этапе формирования верхнего конуса, грн./час
30	$S_{Руц}$	643.2	ССР, расходуемых в единицу времени на этапе вытягивания цилиндрической части, грн./час
31	$S_{РКН}$	643.2	ССР, расходуемых в единицу времени на этапе формирования нижнего конуса, грн./час
32	V_u^*	2	Средняя скорость вытягивания цилиндрической части при «выборке расплава», мм/мин.
33	$t_{КН}^*$	0.75	Среднее время формирования нижнего конуса при «выборке расплава», час
34	$t_{Ткрит}$	40	Максимально допустимое время, в течении которого тигель может выдерживать воздействие высокой температуры, час
35	$\eta_{ГП}$	0,86	Средний коэффициент выхода в ГП (относительно извлеченного материала)
36	$\eta_{БП}$	0.16	Средний коэффициент безвозвратных потерь материала (относительно загрузки)
37	$C_{гп}$	970*	Средняя цена готовой продукции (ГП), грн./кг

Продолжение табл. 6.23.

38	C_0	270*	Средняя цена оборотного материала (идущего на повторную переплавку), грн./кг
39	C_e	0.5	Цена электроэнергии, грн./кВт·час

* Значения параметров подвержены колебаниям.

Методика расчета экономической эффективности. При решении задачи принято, что ограничение на использование так называемого «ресурса» тигля $t_{T_{крит}}$ (максимально допустимое время, в течение которого тигель может выдерживать воздействие высокой температуры) не принимается во внимание (в противном случае всегда используется вариант 3 действий).

Кроме того, если $l_k < l_{kmin}$, где l_{kmin} – минимально допустимая длина аттестуемого кристалла, а l_k – длина цилиндрической части на момент возникновения НС, то всегда действуют по варианту 1. При $l_k > l_{kmin}$, следует также различать две возможные ситуации: а) $L_k - l_k \geq l_{kmin}$; б) $L_k - l_k < l_{kmin}$. В ситуации б) всегда принимается вариант 3. Чтобы принять решение в ситуации а), необходимо оценить ожидаемую прибыль от реализации выращенного кристалла для каждого возможного варианта действия.

Если нештатная ситуация возникла в фазе выращивания цилиндрической части, то в этом случае возможен еще один вид решения: сформировать нижний конус, вывести слиток в шлюзовую камеру, выгрузить его и начать выращивать новый слиток. Кроме того, на этой фазе при принятии решения необходимо учитывать длину выращенной цилиндрической части на момент возникновения нештатной ситуации (l_k). Если $l_k < l_{kmin}$, где l_{kmin} – минимально допустимая длина слитка, то решение принимается с использованием следующего условия [218]:

$$\begin{aligned}
& t_{nl} + (1 + k_{cui} + k_{ck} + k'_{cu}) \cdot (t_{ввид} + t_{nyз}) + (1 + \beta_{cui}) \left(\sum_{i=1}^{k_{cui}} t_{ui} + (k_{ck} + k'_{cu}) t_u \right) + \\
& + (1 + \beta_{ck}) \cdot \left(\sum_{i=1}^{k_{ck}} t_{ki} + k'_{cu} \cdot t_k \right) + (1 + \beta_{cu}) \cdot \sum_{i=1}^{k'_{cu}} t_{yi}(l_i) + t_u + t_k + t_y(L_k) + t_{Hk} < t_{Tруmmr}
\end{aligned} \tag{6.4}$$

где $k'_{cu} = k_{cu} + 1$.

При $l_k > l_{kmin}$, следует также различать две возможные ситуации:

а) $L_k - l_k \geq l_{kmin}$; б) $L_k - l_k < l_{kmin}$.

В ситуации б) всегда принимается решение 3.

Чтобы принять решение в ситуации а), необходимо оценить ожидаемую прибыль от реализации выращенного кристалла для каждого возможного варианта действия, полагая, что колебания диаметра кристалла, обусловленные работой системы управления технологическим процессом, пренебрежимо малы.

Экономический расчет эффективности возможных вариантов действий производится по критерию $\Pi = D - Z$, где Π – прибыль, D – доход, Z – затраты, которые будут иметь место при реализации оцениваемого варианта действий.

Вариант 1 решения применим в случае, если выполняется условие (6.4), тогда прибыль $\Pi_1 = D_1 - Z_1$, где доход D_1 и затраты Z_1 определены соответственно формулами: (6.5) и (6.6) [218]:

$$D_1 = (\pi \cdot D_y^2 \cdot L_k \cdot \eta_{ГП} \cdot \zeta_{ГП} \cdot \gamma_k) / 4 + (m_3 - m_3 \cdot \eta_{БП} - \frac{\pi \cdot D_y^2 \cdot L_k \cdot \eta_{ГП} \cdot \gamma_k}{4}) \cdot \zeta_0 \tag{6.5}$$

$$\begin{aligned}
Z_1 = & t_{nl} \cdot (P_{нпл} \cdot \zeta_{\Delta} + S_{Rnl}) + (1 + k_{cui} + k_{ck} + k'_{cu}) \cdot [t_{ввид} \cdot (P_{нввид} \cdot \zeta_{\Delta} + S_{Rввид}) + \\
& + t_{nyз} \cdot (P_{nyз} \cdot \zeta_{\Delta} + S_{Pnyз})] + \left(\sum_{i=1}^{k_{cui}} t_{ui} + (k_{ck} + k'_{cu}) t_u \right) \cdot (P_{ну} \cdot \zeta_{\Delta} + S_{Ru}) + \\
& + \beta_{cui} \cdot \left(\sum_{i=1}^{k_{cui}} t_{ui} + (k_{ck} + k'_{cu}) t_u \right) \cdot (P_{нсу} \cdot \zeta_{\Delta} + S_{Ru}) + \\
& + \left(\sum_{i=1}^{k_{ck}} t_{ki} + k'_{cu} \cdot t_k \right) \cdot (P_{нк} \cdot \zeta_{\Delta} + S_{Rk}) + \beta_{ck} \cdot \left(\sum_{i=1}^{k_{ck}} t_{ki} + k'_{cu} \cdot t_k \right) \cdot (P_{нск} \cdot \zeta_{\Delta} + S_{Rk}) + \\
& + \left(\sum_{i=1}^{k'_{cu}} t_{yi}(l_i) \right) \cdot (P_{ну} \cdot \zeta_{\Delta} + S_{Ru}) + \beta_{cu} \cdot \sum_{i=1}^{k'_{cu}} t_{yi}(l_i) \cdot (P_{нсу} \cdot \zeta_{\Delta} + S_{Ru}) + [t_u \cdot (P_{ну} \cdot \zeta_{\Delta} + S_{Ru}) + \\
& + t_k \cdot (P_{нк} \cdot \zeta_{\Delta} + S_{Rk}) + t_y(L_k) \cdot (P_{ну} \cdot \zeta_{\Delta} + S_{Ru}) + t_{Hk} \cdot (P_{нкн} \cdot \zeta_{\Delta} + S_{Rkn})],
\end{aligned} \tag{6.6}$$

где κ_{cui} – количество сплавлений на стадии выращивания шейки, κ_{ck} – количество сплавлений на стадии разращивания верхнего конуса и κ_{cu} – количество сплавлений на стадии выращивания цилиндрической части, которые имели место до возникновения НС. Эти величины должны удовлетворять условиям $\kappa_{cui} \geq 0$, $\kappa_{ck} \geq 0$ и $\kappa_{cu} \geq 0$, $\kappa'_{cu} = \kappa_{cu} + 1$.

Вариант 2 решения, в рамках которого прибыль $\Pi_2 = D_2 - Z_2$ где доход D_2 и затраты Z_2 определены соответственно формулами (6.7) и (6.8):

$$\begin{aligned} D_2 = & (\pi \cdot D_u^2 \cdot \ell_k \cdot \eta_{ГП} \cdot \Pi_{ГП} \cdot \gamma_k) / 4 + \\ & + \pi \cdot D_u^2 \cdot (L_k - \ell_k - \ell_{кн}) \cdot \eta_{ГП} \cdot \Pi_{ГП} \cdot \gamma_k / 4 + \\ & + (m_3 - m_3 \cdot \eta_{БП} - \pi \cdot D_u^2 \cdot \gamma_k \cdot \eta_{ГП} \cdot (L_k - \ell_{кн}) / 4) \cdot \Pi_0 \end{aligned} \quad (6.7)$$

$$\begin{aligned} Z_2 = & t_{нл} \cdot (P_{нл} \cdot \Pi_{\text{Э}} + S_{Rnl}) + (1 + \kappa_{cui} + \kappa_{ck} + \kappa_{cu}) \cdot [t_{выд} \cdot (P_{нвыд} \cdot \Pi_{\text{Э}} + S_{Rвыд}) + \\ & + t_{ныз} \cdot (P_{ныз} \cdot \Pi_{\text{Э}} + S_{Pныз})] + (\sum_{i=1}^{\kappa_{cui}} t_{ui} + (\kappa_{ck} + \kappa_{cu}) t_{u}) \cdot (P_{ну} \cdot \Pi_{\text{Э}} + S_{Ru}) + \\ & + \beta_{cu} \cdot (\sum_{i=1}^{\kappa_{cu}} t_{ui} + (\kappa_{ck} + \kappa_{cu}) t_{u}) (P_{нсу} \cdot \Pi_{\text{Э}} + S_{Ru}) + (\sum_{i=1}^{\kappa_{ck}} t_{ki} + \kappa_{cu} \cdot t_{к}) (P_{нк} \cdot \Pi_{\text{Э}} + S_{Rk}) \\ & + \beta_{ck} \cdot (\sum_{i=1}^{\kappa_{ck}} t_{ki} + \kappa_{cu} \cdot t_{к}) (P_{нск} \cdot \Pi_{\text{Э}} + S_{Rk}) + (\sum_{i=1}^{\kappa_{cu}} t_{ci}(l_i)) \cdot (P_{ну} \cdot \Pi_{\text{Э}} + S_{Ru}) + \\ & + \beta_{cu} \cdot \sum_{i=1}^{\kappa_{cu}} t_{ci}(l_i) \cdot (P_{нсу} \cdot \Pi_{\text{Э}} + S_{Ru}) + t_{у} \cdot (P_{ну} \cdot \Pi_{\text{Э}} + S_{Ru}) + t_{к} \cdot (P_{нк} \cdot \Pi_{\text{Э}} + S_{Rk}) + \\ & + t_{ц}(l_k) \cdot (P_{ну} \cdot \Pi_{\text{Э}} + S_{Ru}) + t_{нк} (P_{нкн} \cdot \Pi_{\text{Э}} + S_{Rkn}) + t_{ныз} (P_{ныз} \cdot \Pi_{\text{Э}} + S_{Pныз}) + \\ & + t_{у} (P_{ну} \cdot \Pi_{\text{Э}} + S_{Ru}) + t_{к} (P_{нк} \cdot \Pi_{\text{Э}} + S_{Rk}) + t_{ц} (L_k - \ell_k - \ell_{кн}) (P_{ну} \cdot \Pi_{\text{Э}} + S_{Ru}) + \\ & + t_{кн} (P_{нкн} \cdot \Pi_{\text{Э}} + S_{Rkn}) \end{aligned} \quad (6.8)$$

Вариант 3 решения. В рамках этого варианта, прибыль $\Pi_3 = D_3 - Z_3$, где затраты Z_3 определены формулой (6.9), а для определения дохода D_3 необходимо воспользоваться выражением (6.5), заменив L_k на ℓ_k :

$$\begin{aligned}
Z_3 = & t_{nl} \cdot (P_{nl} \cdot U_{\text{Э}} + S_{Rnn}) + (1 + k_{cu} + k_{ck} + k_{cu}) \cdot [t_{\text{выд}} \cdot (P_{\text{нвыд}} \cdot U_{\text{Э}} + S_{R\text{ввы}}) + \\
& + t_{\text{нвз}} \cdot (P_{\text{нвз}} \cdot U_{\text{Э}} + S_{P\text{нвз}})] + (\sum_{i=1}^{k_{cu}} t_{ui} + (k_{ck} + k_{cu}) t_u) \cdot (P_{nu} \cdot U_{\text{Э}} + S_{Ruu}) + \\
& + \beta_{cu} \cdot (\sum_{i=1}^{k_{cu}} t_{ui} + (k_{ck} + k_{cu}) t_u) (P_{ncu} \cdot U_{\text{Э}} + S_{Ruu}) + (\sum_{i=1}^{k_{ck}} t_{ki} + k_{cu} \cdot t_k) (P_{нк} \cdot U_{\text{Э}} + S_{Rк}) + \\
& + \beta_{ck} \cdot (\sum_{i=1}^{k_{ck}} t_{ki} + k_{cu} \cdot t_k) (P_{нск} \cdot U_{\text{Э}} + S_{Rк}) + (\sum_{i=1}^{k_{cu}} t_{ui} (l_i)) \cdot (P_{ну} \cdot U_{\text{Э}} + S_{Ru}) \quad (6.9) \\
& + \beta_{cu} \cdot \sum_{i=1}^{k_{cu}} t_{ui} (l_i) \cdot (P_{ncu} \cdot U_{\text{Э}} + S_{Ru}) + \\
& + t_u \cdot (P_{nu} \cdot U_{\text{Э}} + S_{Ruu}) + t_k \cdot (P_{нк} \cdot U_{\text{Э}} + S_{Rк}) + \\
& + t_u (l_k) \cdot (P_{ну} \cdot U_{\text{Э}} + S_{Ru}) + t'_u (L_k - l_k) \cdot (P_{ну} \cdot U_{\text{Э}} + S_{Ru}) + t'_{кн} (P_{нкн} \cdot U_{\text{Э}} + S_{Rкн}),
\end{aligned}$$

где t'_u и $t'_{кн}$ – длительности соответствующих операций при извлечении расплава, которые ведутся при более высоких скоростях вытягивания по сравнению с нормальным выращиванием кристалла.

Расчет затрат проводился при средних значениях технико-экономических параметров, указанных в табл. 6.32, используемых в промышленных условиях при выращивании слитков диаметром 76 и 100 мм. Кроме того, было принято, что $l_{к\text{min}} = 0$.

По результатам расчетов можно определить средние затраты и потери прибыли с учетом характера и последствий НС разного вида и, соответственно, рассчитать уменьшение этих потерь при внедрении подсистемы «Советчик»:

НС1. *Отклонение диаметра за пределы допуска.* Следствие – часть слитка некондиционна. По данным производственного отдела в среднем уходит в брак 13% длины слитка с учетом оторцовки. При заданном диаметре и длине слитка можно рассчитать массу части слитка, ушедшей в брак, а следовательно, при известной цене и себестоимости (прямым затратам) – и потерю прибыли. Выход слитка при нормальном режиме выращивания составляет ориентировочно 86%.

Пример: из m кг исходного материала получается слиток массой m_1 кг. Тогда потери составляют $0,13m$ кг. При цене слитка $Ц$ грн./кг и себестоимости $С$ грн./кг получим потери прибыли $R_p = 0,13m(C - C)$ грн.

НС2. *Недопустимое увеличение плотности дислокаций.* Следствие: слиток на 100% уходит в брак. Убыток рассчитывается как сумма прямых за-

трат и потерянной прибыли.

НС3. *Замедление или остановка процесса кристаллизации.* Следствие: Средние потери от брака составляют 50%. Убыток рассчитывается как сумма прямых затрат и потерянной прибыли. Расчет в каждом случае производится по формулам (6.4)–(6.9).

НС4. *Разложение кристалла.* Следствие: средние потери на брак составляют 50%. Убыток рассчитывается как сумма прямых затрат и потерянной прибыли. Расчет в каждом случае производится по формулам (6.4)–(6.9).

НС5. *Неисправность в АСУТП или возникновение более двух критических ситуаций одновременно.* Следствие: в среднем уходи в брак 50% материала. Убыток рассчитывается как сумма прямых затрат и потерянной прибыли.

Статистика предприятия за 2011-2013 годы по нештатным ситуациям при выращивании монокристаллов арсенида галлия и связанным с ними расходам и потерям прибыли приведена в таблице 6.24.

Таблица 6.24 – Количество нештатных ситуаций и потери

Год	Номер ситуации	Кол-во случаев	Средние прямые затраты, грн.	Потерянная прибыль, грн.	Общие потери, грн.	Сумма потерь, грн.
Без применения подсистемы «Советчик»						
2011	1	10	1300	343	16430	92230
	2	9	1350	3500	43650	
	3	5	1310	1420	13650	
	4	5	1320	1410	13650	
	5	1	1330	3520	4850	
2012	1	11	1375	368	19173	94853
	2	8	1390	3560	39600	
	3	7	1423	1407	19810	
	4	4	1432	1398	11320	
	5	1	1410	3540	4950	

Продолжение табл. 6.24

С применением подсистемы «Советчик»						
2013	1	2	1365	378	3486	21166
	2	2	1420	3530	9900	
	3	0	1400	0	0	
	4	1	1430	1400	2830	
	5	1	1405	3545	4950	

Таким образом, при внедрении подсистемы «Советчик» в течение 2013 года потери снизились примерно на 73687 грн., т. е. в 3,5 раза.

Диаграмма снижения потерь от возникновения нештатных ситуаций приведена на рис. 6.33.

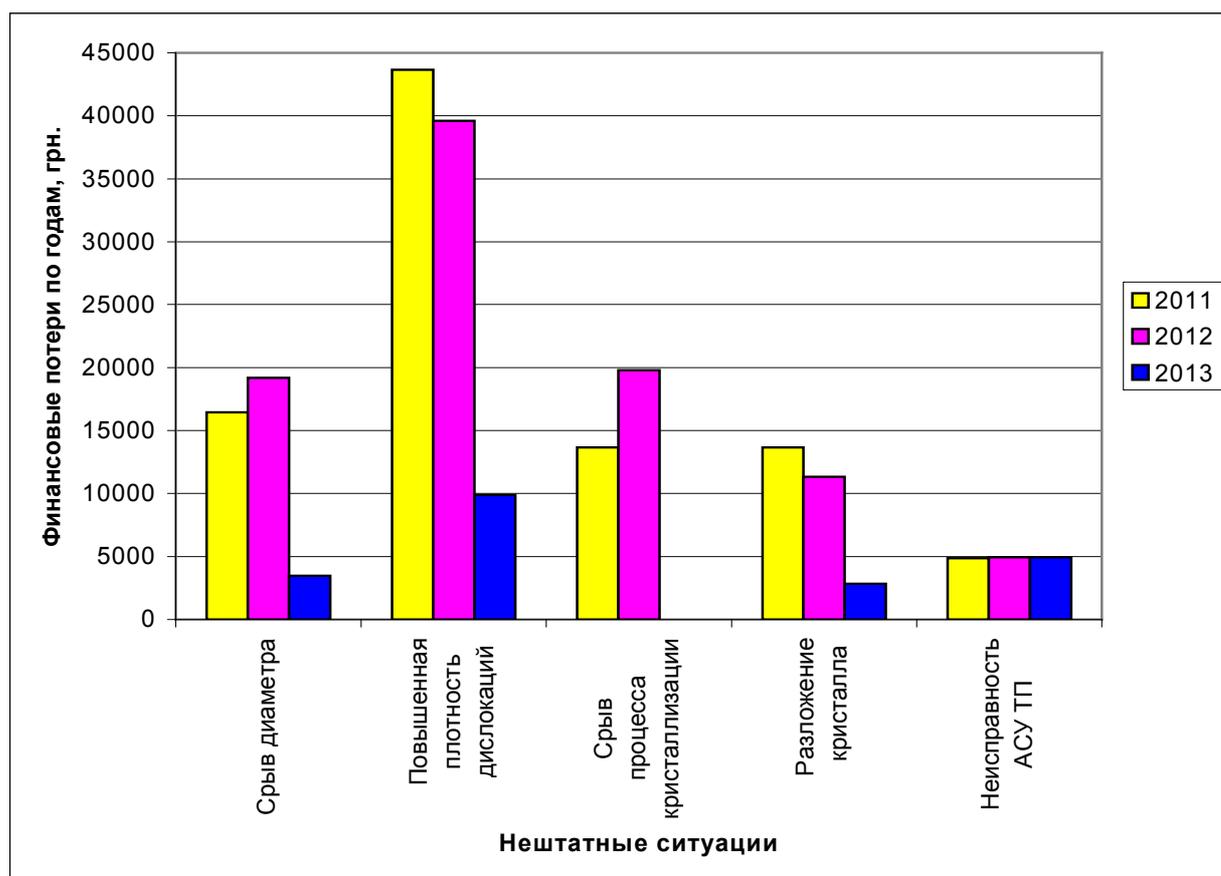


Рис. 6.33 – Диаграмма потерь от возникновения нештатных ситуаций в производстве арсенида галлия

Расчет снижения затрат при внедрении подсистемы «Экран». Не ре-

же одного раза в год происходит постановка на производство слитков нового диаметра, и ведутся эксперименты, в ходе которых устанавливаются оптимальные режимы выращивания и остывания слитка. В составе затрат на экспериментальные работы имеются статьи, связанные с неоднократной переработкой конфигурации теплового экрана, окружающего слиток и проведение экспериментальных процессов выращивания. В среднем годовые затраты на эти виды работ составляют:

1. Переработка конфигурации экрана, изготовление и установка новых образцов: 4100 грн.

2. Проведение экспериментальных процессов выращивания: 7550 грн.

Суммарный расход составляет 11650 грн. Внедрение подсистемы «Экран» позволяет исключить экспериментальные работы, связанные с подбором геометрических параметров теплового экрана и, соответственно, избежать этих расходов.

Таким образом, суммарный экономический эффект от внедрения ИАС УКПВ составил 85337 грн.

Выводы по разделу

1. Реализована информационная технология мониторинга процесса выращивания монокристаллов в виде подсистемы «Мониторинг». Подсистема позволяет оператору наблюдать изменения температурных полей расплава и слитка и при необходимости корректировать тепловой режим. Разработана функциональная модель подсистемы, база данных, алгоритмическое и программное обеспечение. Разработана методика мониторинга температурных полей расплава и слитка в процессе выращивания монокристаллов GaAs по ЛЕС-технологии.

2. Реализована информационная технология поддержки принятия оперативных решений в процессе выращивания в виде подсистемы «Советчик». Разработана функциональная модель подсистемы, база данных, алгоритми-

ческое и программное обеспечение. Подсистема обеспечивает распознавание ситуаций и выдачу рекомендаций по коррекции режима процесса выращивания. В базе данных сохраняется история сообщений, что позволяет корректировать содержимое базы знаний подсистемы.

3. Реализована информационная технология оптимизации условий остывания слитка в ростовой установке в виде подсистемы «Экран». Разработана функциональная модель подсистемы, база данных, алгоритмическое и программное обеспечение. Показана эффективность подсистемы на примере оптимизации геометрических параметров теплового экрана для установки «Арсенид-1М».

4. Проведены исследования остаточных напряжений и уровня дислокаций в слитках GaAs при использовании ИАС УКПВ. Показано, что с внедрением подсистем ИАС УКПВ повысилось качество выпускаемой продукции за счет снижения среднего уровня плотности дислокаций в слитках арсенида галлия.

5. Оценена экономическая эффективность внедрения ИАС УКПВ на предприятии «Галар». Годовой экономический эффект от внедрения превышает 85 тыс. грн.

Основные результаты раздела опубликованы в научных трудах автора [230, 231, 232, 233, 234].

ВЫВОДЫ

В диссертационной работе поставлена и решена актуальная научно-прикладная проблема создания теоретических и прикладных основ информационной поддержки процесса выращивания монокристаллов полупроводников и процессов оптимизации параметров технологической оснастки для обеспечения повышения качества продукции.

В процессе исследований получены такие новые теоретические и практические результаты:

1. Проведен анализ концепций и проблем мониторинга сложных технологических систем и процессов и, в частности, процесса выращивания монокристаллов полупроводников. Анализ показал:

- проблемы создания и развития информационных технологий мониторинга сложных технологических процессов – это, прежде всего, системные, модельно-алгоритмические и информационные проблемы, требующие для своего решения системного подхода и междисциплинарных исследований;
- проблема повышения эффективности управления качеством продукции в производстве монокристаллов полупроводников может быть трансформирована в проблему создания и внедрения информационно-аналитической системы управления качеством процесса выращивания (ИАС УКПВ), основной функцией которой является мониторинг данного процесса и поддержка принятия оперативных решений оператором;
- по физико-технологическим вопросам производства монокристаллов имеется большой объём исследований, результаты которых необходимо использовать при разработке информационных технологий мониторинга и оптимизации процесса выращивания монокристаллов;
- дальнейшего повышения эффективности производства монокристаллов можно достичь путем разработки и внедрения информационно-аналитической системы управления качеством, охватывающей технологическую подготовку производства, технологический процесс и стадию контроля готового продук-

та. ИАС должна базироваться на применении специально разработанных методов, моделей и информационных технологий.

2. Предложена концепция управления качеством процесса выращивания монокристаллов, которая предусматривает мониторинг температурных полей, поддержку принятия решений оператора по корректировке режима выращивания и оптимизацию условий охлаждения слитка, что позволило создать теоретические предпосылки для разработки системы управления качеством нового поколения.

3. Предложена концепция мониторинга температурных полей в процессе выращивания монокристаллов, предусматривающая косвенное измерение значений температурных параметров, недоступных для прямых измерений и вывод результатов измерений и вычислений на монитор оператора, что позволяет поднять на новый качественный уровень управление режимом процесса выращивания.

4. Впервые предложена теоретико-множественная модель информационно-аналитической системы управления качеством процесса выращивания монокристаллов, которая, в отличие от известных, содержит в своем составе модель качества продукта, модель качества технологического процесса, функциональную подсистему оптимизации параметров оснастки на стадии технологической подготовки производства, функциональную подсистему мониторинга процесса выращивания, функциональную подсистему поддержки принятия оперативных решений по коррекции режима выращивания, отображение множества параметров качества процесса на множество параметров качества продукта и отображение влияния множества решений функциональных задач на качество технологического процесса, что позволяет реализовать комплексный подход к повышению качества технологического процесса и конечного продукта.

5. Усовершенствован метод построения прикладной информационной технологии поддержки принятия решений по диагностике и коррекции сложного производственного процесса, путем формирования комплекса моделей мониторинга, основанных на раскрытии физического представления процесса,

что позволяет осуществить контроль важных параметров процесса, которые недоступны для прямых измерений и тем самым повысить эффективность управления качеством конечного продукта.

6. Разработаны методы, модели и информационная технология мониторинга температурных полей в процессе выращивания монокристаллов, а именно:

- нейросетевая модель для косвенного мониторинга температурного поля, которая, в отличие от известных, учитывает конвективные тепловые потоки, скорость вытягивания, стадию процесса вытягивания, что позволяет повысить точность результатов косвенных измерений параметров температурного поля и создать новую информационную технологию получения важных данных для оценки качества изготавливаемых монокристаллов полупроводников;
- разработана обобщенная структура взаимосвязей в комплексе моделей решения задач мониторинга процесса выращивания монокристаллов, что позволяет упростить синтез структуры подсистемы мониторинга сложного технологического процесса, в котором одновременно имеют место разнородные физические явления;
- усовершенствован метод моделирования процесса кристаллизации путем применения нечеткого клеточного автомата на этапе воспроизведения формы монокристалла, что позволяет упростить вычислительный процесс моделирования по сравнению с известными методами, получать уточненные значения коэффициента теплопроводности в проблемной зоне фронта кристаллизации и осуществлять информационную технологию мониторинга процесса выращивания монокристаллов;
- впервые предложен метод настройки параметров нечеткого клеточного автомата, основанный на поиске оптимальных значений коэффициентов в взвешенной t-конорме Лукасевича, что позволяет адекватно отразить динамику сложного процесса выращивания монокристаллов и реализовать необходимую обработку данных для мониторинга этого процесса;
- разработана модель расчета температуры фонового нагревателя и мето-

дика косвенного измерения температуры фонового нагревателя при различных сочетаниях значений параметров технологического режима. Это позволяет осуществлять мониторинг температурного режима выращивания монокристаллов.

- разработана и реализована в рамках подсистемы «Мониторинг» информационная технология мониторинга процесса выращивания монокристаллов. Подсистема обеспечивает предоставление необходимой оператору визуальной информации об изменениях температурных полей расплава и слитка.

7. Разработаны методы, модели и информационная технология поддержки принятия оперативных решений в ходе процесса выращивания монокристаллов, а именно:

- получила дальнейшее развитие модель подсистемы поддержки принятия оперативных решений для коррекции процесса выращивания монокристаллов путем введения базы математических моделей мониторинга и анализа температурных полей расплава и слитка, а также интерфейсов для связи с АСУ ТП выращивания монокристаллов и с подсистемой технико-экономического планирования АСУ предприятия, что позволяет принимать оперативные решения в ходе процесса выращивания с учетом как физических, так и экономических показателей;

- получила дальнейшее развитие модель поиска решений для оператора в виде генерации рекомендаций путем введения нечеткого представления ситуаций, которое учитывает тренды параметров процесса выращивания, что позволяет гибко реагировать на возникновение проблемных ситуаций и принимать адекватные решения по коррекции процесса выращивания;

- получила дальнейшее развитие нечеткая модель распознавания ситуаций в процессе выращивания монокристаллов, путем оценки степени критичности ситуации, и в которой для настройки используются индивидуальные коэффициенты значимости элементарных ссылок каждого правила, что позволяет упростить процесс обучения и дообучения модели при появлении новых про-

блемных ситуаций;

- извлечены знания из полученной от экспертов информации о причинно-следственных связях явлений и ситуаций в процессе выращивания монокристаллов. Структурирована оперативная информация по процессу выращивания и сформированы перечни ситуаций и параметров, определяющих качество процесса. Разработаны модели и процедуры интерпретации значений параметров в значения признаков ситуаций;
- разработана иерархическая база знаний для диагностики неблагоприятных ситуаций и выдачи рекомендаций по коррекции режима процесса выращивания монокристаллов, включающая правила реагирования на одновременное возникновение двух или более критических ситуаций, что позволяет гибко реагировать на возникающие ситуации и принимать рациональные решения;
- разработаны алгоритмы решения задачи коррекции базы знаний, решения задачи распознавания и выдачи рекомендаций;
- разработана и реализована в рамках подсистемы «Советчик» информационная технология поддержки принятия оперативных решений в процессе выращивания. Подсистема обеспечивает обработку данных для поддержки процесса распознавания ситуаций и выдачу рекомендаций по коррекции режима процесса выращивания.

8. Разработаны методы, модели и информационная технология поддержки задачи оптимизации тепловых условий охлаждения слитков в ростовой установке стадии технологической подготовки производства, а именно:

- разработана модель подсистемы оптимизации условий остывания слитка в ростовой установке, которая используется на этапе технической подготовки производства, что позволяет обеспечить минимальную плотность структурных дефектов в монокристаллах и повысить качество конечного продукта.
- разработана математическая модель решения задачи оптимизации геометрических параметров теплового экрана, в которой интегральный критерий оптимизации учитывает неравномерность осевого градиента в слитке и уровень радиального градиента температуры в зоне, примыкающей к фронту кристал-

лизации, что позволяет с учетом указанных факторов выбрать оптимальную конфигурацию теплового экрана.

- усовершенствован метод решения задачи оптимизации геометрических параметров теплового экрана на этапе технологической подготовки производства, который содержит математическую модель оптимизации со сложным критерием и использует эволюционную процедуру оптимизационных расчетов, что позволяет осуществить информационную поддержку процесса технологической подготовки производства и повысить качество конечного продукта;
- разработана математическая модель связи между геометрическими параметрами элементов теплового узла и тепловыми потоками излучения. Модель позволяет описать тепловое взаимодействие излучением между поверхностью слитка и поверхностью экрана кусочно-цилиндрической формы с произвольно изменяющимся по высоте радиусом, что даёт возможность рассчитывать температуру на поверхности слитка, задавая граничные условия на других поверхностях ростовой камеры, и оптимизировать форму экрана с учетом заданного критерия.
- разработана и реализована в рамках подсистемы «Экран» информационная технология оптимизации условий охлаждения слитка в процессе выращивания путем выбора оптимальной конфигурации теплового экрана на этапе технологической подготовки производства. Это обеспечивает снижение вероятности возникновения повышенной плотности дислокаций в монокристалле. Показана эффективность подсистемы на примере оптимизации геометрических параметров теплового экрана для установки "Арсенид-1М".

9. Разработана и реализована в рамках информационно-аналитической системы интегрированная информационная технология управления качеством процесса выращивания монокристаллов. В состав системы в виде функциональных подсистем вошли подсистемы «Мониторинг», «Советчик» и «Экран».

10. С целью изучения эффективности ИАС УКПВ проведены исследования остаточных напряжений и уровня дислокаций в слитках GaAs. Показано, что с внедрением подсистем ИАС УКПВ повысилось качество выпускае-

мой продукции за счет снижения среднего уровня плотности дислокаций в слитках арсенида галлия.

Внедрение этих подсистем на ЧП «Галар» (г. Светловодск) позволило получить годовой экономический эффект 85,4 тыс. грн. за счет уменьшения расхода электроэнергии, материальных ресурсов, трудозатрат и потерь прибыли на единицу готовой продукции при снижении количества нештатных ситуаций и соответствующего снижения доли бракованной продукции в производстве слитков арсенида галлия благодаря использованию подсистем «Мониторинг», «Советчик» и «Экран», а также уменьшения затрат на технологическую подготовку производства слитков арсенида галлия за счет исключения экспериментальных работ на ростовых установках при подборе размеров и положения теплового экрана благодаря использованию подсистемы «Экран».

11. Методы, модели и алгоритмы мониторинга процесса нормализации крупного железнодорожного литья внедрены в цехе обрубки и термообработки ПАО «КСЗ». Программный модуль, встроенный в SCADA-систему контроля режима печи нормализации обеспечивает:

- контроль температурного режима печи путём фиксации показаний термопар в двух тепловых зонах;
- контроль температуры окружающей среды;
- контроль атмосферного давления;
- контроль состояния входной и выходной штор;
- коррекцию уставок соотношения «газ-воздух» в контуре управления горелками печи с учетом значений вышеприведенных параметров.

В период эксплуатации программного модуля за счет повышения эффективности регулирования теплового режима и улучшения равномерности нагрева деталей средний уровень балльности зерна по ОСТ-32-183-2001 стабильно составил 9...10 против 8...9 в предыдущие периоды эксплуатации печи. Таким образом, применение программного модуля, реализующего мониторинг и коррекцию процесса нормализации позволило повысить качество отливок.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Юсупов Р. М. Концептуальные и научно-методологические основы информатизации / Р. М. Юсупов, В. П. Заболотский. – СПб. : Наука, 2009. – 544 с.
2. Бастриков М. В. Информационные технологии управления / М. В. Бастриков, О. П. Пономарев. – М. : ЭКСМО, 2002. – 391 с.
3. Шашков Ю. М. Выращивание монокристаллов методом вытягивания / Шашков Ю. М. – М. : Metallurgia, 1982. – 312 с.
4. Кузнецов Л. А. Управление качеством в сложных технологических процессах / Л. А. Кузнецов // Проблемы управления. – 2007. – №3. – С. 47–53.
5. Авдонин В. Ю. Система управления качеством непрерывнолитых заготовок / В. Ю. Авдонин, Л. В. Буланов, Н. А. Юровский и др. // Сборник трудов конференций и семинаров (14–18 ноября 2005, Москва). – С. 165–171.
6. Управление качеством продукции на современных промышленных предприятиях / С. А. Федосеев, М. Б. Гитман, В. Ю. Столбов, А. В. Вожаков. – Пермь : Изд-во ПНИПУ, 2011. – 229 с.
7. Павлов А. А. Информационные технологии и алгоритмизация в управлении / А. А. Павлов, С. Ф. Теленик. – К. : Техника, 2002. – 344 с.
8. Методи обчислювального інтелекту в системах керування технологічними процесами феросплавного виробництва / [Бодянський Є. В., Кучеренко Є. І., Михальов О. І. та ін.] Монографія (Наукове видання) – Днепропетровськ: Національна металургійна академія України, 2011. – 420 с.
9. Цыпкин Я. З. Информационная теория идентификации / Цыпкин Я. З. – М. : Наука, 1995. – 336 с.
10. Бунич А. Л. Синтез и применение дискретных систем управления с идентификатором / А. Л. Бунич, Н. Н. Бахтадзе. – М. : Наука, 2003. – 232 с.
11. Хартман К. Планирование эксперимента в исследовании процессов / Хартман К., Лецкий Э. И., Шеффер В. – М. : Мир, 1977. – 552 с.
12. Кашьяп Р. Л. Построение динамических стохастических моделей по экспериментальным данным / Р. Л. Кашьяп, А. Р. Рао. – М. : Наука, 1983. – 383 с.

13. Тамм Б. Г. Анализ и моделирование производственных систем / Б. Г. Тамм, М. Э. Пуусепп, Р. Р. Таваст. – М. : Финансы и статистика, 1987. – 191 с.
14. Бусленко Н. П. Моделирование сложных систем / Бусленко Н. П. – М. : Наука, 1978. – 384 с.
15. Дмитриев А. К. Основы теории построения и контроля сложных систем / А. К. Дмитриев, П. А. Мальцев. – Львов : Энергоатомиздат, 1988. – 192 с.
16. Подчуфаров Ю. Б. Физико-математическое моделирование систем управления и комплексов / Подчуфаров Ю. Б. – М. : Изд-во физико-математической литературы, 2002. – 168с.
17. Ивахненко А. Г. Индуктивный метод самоорганизации моделей сложных систем / Ивахненко А. Г. – К. : Наукова думка, 1981. – 296 с.
18. Люггер Дэю. Ф. Искусственный интеллект. Стратегии и методы решения сложных проблем: Пер. с англ. – 4-е изд. / Люггер Дэю. Ф. – М. : Издательский дом «Вильяме», 2003. – 864 с.
19. Поспелова Д. А. Нечеткие множества в моделях управления и искусственного интеллекта / Поспелова Д. А. – М. : Наука, 1986. – 312 с.
20. Заде Л. А. Понятие лингвистической переменной и его применение к принятию приближенных решений / Заде Л. А. – М. : Мир, 1976. – 167 с.
21. Уэно Х. Представление и использование знаний: Пер. с япон. / Х. Уэно, М. Исидзука. – М. : Мир, 1989. – 220 с.
22. Гаврилова Т. А. Базы знаний интеллектуальных систем / Т. А. Гаврилова, В. Ф. Хорошевский. – СПб. : Питер, 2000. – 384 с.
23. Поспелов Ю. А. Ситуационное управление: теория и практика / Поспелов Ю. А. – М. : Наука, 1986. – 328 с.
24. Мелихов А. Н. Ситуационные советующие системы с нечеткой логикой / А. Н. Мелихов, Л. С. Берштейн, С. Я. Коровин. – М. : Наука, 1990. – 272 с.
25. Гаврилова Т. А. Извлечение и структурирование знаний для экспертных систем / Т. А. Гаврилова, К. Р. Червинская. – М. : Радио и связь, 1992. – 200 с.
26. Борисов В. А. Обработка нечеткой информации в системах принятия ре-

- шений / Борисов В. А. – М. : Радио и связь, 1989. – 304 с.
27. Борисов А. Н. Принятие решений на основе нечетких моделей / Борисов А. Н. – Рига : Знание, 1990. – 184 с.
28. Райбман Н. С. Адаптивные модели в системах управления / Н. С. Райбман, В. М. Чадеев. – М. : Советское радио, 1966. – 157 с.
29. Бокс Дж. Анализ временных рядов. Прогноз и управление / Дж. Бокс, Г. Дженкис. – М. : Мир, 1974. – 408 с.
30. Сейдж Э. П. Идентификация систем управления / Э. П. Сейдж, Д. Л. Мелса. – М. : Мир, 1974. – 247 с.
31. Каминскас В. Статистические методы в идентификации динамических систем / В. Каминскас, А. Немура. – Вильнюс : Минтис, 1975. – 198 с.
32. Райбман Н. С. Построение моделей процессов производства / Н. С. Райбман, В. М. Чадеев. – М. : Энергия, 1975. – 336 с.
33. Основы управления технологическими процессами / [Анисимов С. А., Дынькин В. М., Касавин А. Д. и др.] ; Под ред. Н. С. Райбмана. – М. : Наука, 1978. – 440 с.
34. Куржанский А. Б. Управление и наблюдение в условиях неопределенности / Куржанский А. Б. – М. : Наука, 1977. – 392 с.
35. Малюгин Ю. М. Применение ЭВМ для решения задач идентификации объектов / Ю. М. Малюгин, А. В. Экало. – Львов : Ленингр. ун-т, 1980. – 257 с.
36. Дисперсионная идентификация / [Райбман Н. С., Капитоненко В. В., Овсепян Ф. А. и др.] ; Под ред. Н. С. Райбмана. М. : Наука, 1981. – 336 с.
37. Перельман И. И. Оперативная идентификация объектов управления / Перельман И. И. – М. : Энергоиздат, 1982. – 272 с.
38. Серая О. В. Модели и информационные технологии оценки и прогнозирования состояния многомерных динамических объектов в условиях нечетких входных даны : дис. на соискание ученой степени кандидата технических наук : 05.13.06 / Оксана Владимировна Серая. – Х., 2001. – 251 с.
39. Шур М. Современные приборы на основе арсенида галлия: пер. с англ. /

- Шур М. – М. : Мир, 1991. – 632 с.
40. Уиссмен У. Арсенид галлия в микроэлектронике: пер. с англ. / Уиссмен У., Френсли У., Дункан У. – М. : Мир, 1988. – 555 с.
41. Jacob G. A novel crystal growth method for GaAs: The liquid encapsulated kyropoulos method / G. Jacob // *Journal of Crystal Growth*. – 1982. – V. 58. – Iss. 2. – P. 455–459.
42. Суздаль В. С. Системы управления процессами получения монокристаллов из расплава / В. С. Суздаль, П. Е. Стадник // *Функциональные материалы для науки и техники*. – 2001. – С. 514–526.
43. Лейбович В. С. Управление формообразованием кристаллов на основе динамической модели объекта регулирования / В. С. Лейбович // *Материалы электронной техники*. – 1983. – Ч. 1. – С. 161–179.
44. Лейбович В. С. Динамические модели процессов кристаллизации из расплавов / В. С. Лейбович // *Математические модели в АСУТП*. – 1983. – Вып. 47. – С.15–27.
45. Аболмасов К. И. Алгоритмы оптимизации процесса выращивания монокристаллов полупроводниковых материалов методом Чохральского / К. И. Аболмасов, Е. М. Кадер, В. А. Пискунов и др. // *Научные труды ГИРЕДМЕТА : Средства и системы автоматического контроля и управления*. – 1976. – Т. 78. – С. 34–45.
46. Лейбович В. С. Автоматическое управление процессом роста монокристаллов / В. С. Лейбович, В. А. Сухарев, В. М. Шушков, В. А. Федоров // *Приборы и системы управления*. – 1975. – № 5. – С. 7–9.
47. Mathematical modeling and control system design of Czochralski and liquid encapsulated Czochralski process: the basic low order mathematical model / G. A. Satunkin // *Journal of Crystal Growth*. – 1995. – Vol. 154. – Iss. 1–2. – P. 172–188.
48. Оксанич А. П. Автоматизация выращивания монокристаллов полупроводников по методу Чохральского / А. П. Оксанич, В. Р. Петренко // *Научные труды КГПИ*. – 2000. – №1. – С. 364–367.

49. Оксанич А. П. Автоматизация и моделирование процессов выращивания структурно-совершенных монокристаллов кремния большого диаметра / А. П. Оксанич, В. Р. Петренко // АСУ и приборы автоматики. – 2001 – Вып. 117. – С. 165–175.
50. Оксанич А. П. Автоматизированная система управления процессом выращивания совершенных монокристаллов кремния по методу Чохральского (АСУ «Кремень») / А. П. Оксанич, В. Р. Петренко, С. Э. Пригчин // Нові технології. Науковий вісник Інституту економіки та нових технологій. – 2002. – № 1 (1). – С.7–13.
51. Оксанич А. П. Разработка стохастических моделей передаточных функций для системы управления процессом выращивания монокристаллов кремния большого диаметра / А. П. Оксанич, В. Р. Петренко // Вестник Херсонского государственного технического университета. – 2002. – № 2 (15). – С. 360–363.
52. Оксанич А. П. Оценивание адекватности стохастических моделей передаточных функций системы управления процессом выращивания монокристаллов кремния / А. П. Оксанич, В. Р. Петренко // Нові технології. Науковий вісник Інституту економіки та нових технологій. – 2004. – № 3 (6). – С. 12–14.
53. Суздаль В. С. Алгоритмизация управления процессами выращивания монокристаллов из расплава / В. С. Суздаль // Сборник научных трудов Харьковского государственного политехнического университета. – 1998. – Вып.6. – Ч. 1. – С. 421–425.
54. Налбандян О. Г. Управление процессом выращивания кристаллов методом Чохральского с помощью скорости вытягивания / О. Г. Налбандян // Кристаллография. – 1982. – Т. 29, № 3. – С. 620–621.
55. Nalbandyan H. G. Possibility of programming and optimal control of growth in the Czochralski technique / H. G. Nalbandyan // Journal Crystal Growth. – 1984. – Vol. 67. – Iss. 1. – P. 115–118.
56. Горилецкий В. И. Автоматизация процессов выращивания и управление

- свойствами крупногабаритных щелочногалоидных монокристаллов / В. И. Горилецкий, К. В. Шахова // Функциональные материалы для науки и техники. – 2001. – С. 466 – 489.
57. Булавский Д. В. Автоматизированная система управления установкой для выращивания монокристаллов кремния / Д. В. Булавский, В. Е. Зюбин, Н. Н. Карлсон, В. О. Криворучко, В. В. Миронов // Автометрия. – 1996. – № 2. – С. 32–34.
58. Горилецкий В. И. Принцип управляемого вытягивания монокристаллов из расплава / В. И. Горилецкий, А. В. Радкевич, Л. Г. Эйдельман. // Сб. науч. тр. НИИТЭХИМ. – 1977. – С. 37–40.
59. Оксанич А. П. Новые принципы построения устройств контроля процессов выращивания структурно-совершенных слитков кремния большого диаметра / А. П. Оксанич, Н. Д. Вдовиченко // Радиоэлектроника и информатика. – 2001. – № 1. – С. 42–45.
60. Суздаль В. С. Архитектура АСУ ТП получения монокристаллов из расплава / В. С. Суздаль // Вестник Харьковского государственного политехнического университета. – 2000. – Вып. 119. – С.15–18.
61. Петренко В. Р. Концептуальная модель организационно–технологической системы управления производством монокристаллического кремния / В. Р. Петренко // Новые технологии. – 2006. – № 1 (11). – С. 89–100.
62. Волохов С. А. Разработка аппаратуры, систем управления и контроля технологических процессов выращивания слитков кремния для солнечной энергетики : дис. на соискание ученой степени кандидата технических наук : 05.27.06 / Сергей Александрович Волохов. – Кременчуг, 2010. – 163 с.
63. Тавровский И. И. Синтез робастного регулятора заданной структуры для процесса кристаллизации : дис. на соискание ученой степени кандидата технических наук : 05.13.07 / Игорь Игоревич Тавровский. – Х., 2011. – 156 с.
64. Оксанич А. П. Архітектура і функціональність дворівневої системи управління вирощуванням злитків кремнію / А. П. Оксанич, В. Р. Петренко, С. Э. Притчин // Радіоелектроніка та інформатика. – 2007. – № 4 (39). –

- С. 49–53.
65. А. с. 1798396 СССР, МКИ С30 В 15/28, G05 D 27/00. Способ выращивания кристаллов из расплава в автоматическом режиме / В. Н. Курлов, И. С. Пентьков, Б. С. Редькин (СССР). – № 4848199/26 ; заявл. 09.07.90; опубл. 28.02.93, Бюл. № 8.
66. Пат. 2023063 Российская Федерация, МКИ С30 В 15/00, G05 D 27/00. Способ выращивания кристаллов из расплава в автоматическом режиме / В. Н. Курлов, И. С. Пентьков, Б. С. Редькин (РФ). – №4863983/26 ; заявл. 09.07.90; опубл. 28.02.94, Бюл. № 21.
67. Пат. 47988А Україна, 330В 15/20, 33В 15/126. Спосіб вирощування монокристала та пристрій для його здійснення / О. В. Третьяков, А. П. Оксанич, С. Е. Притчин, В. Р. Петренко, О. О. Слюсаренко; заявники і патентовласники О. В. Третьяков, А. П. Оксанич, С. Е. Притчин, В. Р. Петренко, О. О. Слюсаренко. – № 2002021161 ; заявл. 12.02.02 ; опубл. 15.07.02, Бюл. № 7.
68. Тиман Б. Л. Выращивание кристаллов постоянного диаметра методом контроля уровня расплава / Б. Л. Тиман, С. Ф. Бурачас // Кристаллография. – 1981. – Т. 26, Вып. 4. – С. 892–894.
69. Goriletzky V. I. Automated pulling of large alkali halide single crystals / V. I. Goriletzky, V. A. Nemenov, A. A. Protsenko // Journal Crystal Growth. – 1981. – Vol. 52. – Iss. 3. – P. 509–513.
70. Satunkin G. A. Analysis of the dynamics of the controlled crystallization process using the Czochralski method / G. A. Satunkin, S. N. Rossolenko // Journal Cryst. Res. and Technol. – 1986. – Vol. 21. – Iss. 9. – P. 1125–1138.
71. Goriletzky V. I. Automated growing of large single crystals controlled by melt level sensor / V. I. Goriletzky, L. G. Eidelman, V. A. Nemenov // Journal Crystal Res. and Technol. – 1985. – Vol. 20. – Iss. 2. – P. 167–172.
72. Bardsley W. Automatic control of czochralski crystal growth / W. Bardsley, G. W. Green, C. H. Holliday, D. T. J. Hurle // Journal of Crystal Growth. – 1972. – Iss. 16. – P. 277–279.
73. Riedling K. Autonomous liquid encapsulated Czochralski (LEC) growth of sin-

- gle crystal GaAs by “intelligent” digital control / K. Riedling // *Journal of Crystal Growth*. – 1988. – Iss. 89. – P. 435–446.
74. Gevelber M. A. Dynamics and control of the Czochralski process. II. Objectives and control structure design / M. A. Gevelber, G. Stephanopoulos, M. J. Wargo // *Journal of Crystal Growth*. – 1988. – Iss. 91. – P. 199–217.
75. Оксанич А. П. Определение телевизионным способом диаметра монокристалла кремния на разных стадиях его роста / А. П. Оксанич, С. Э. Притчин. // *Научные труды КГПИ*. – 2001. – Вып. 2 / (8). – С. 376–381.
76. Оксанич А. П. Оптимизация алгоритма контроля диаметра слитка кремния в процессе роста / А. П. Оксанич, В. Р. Петренко, С. Э. Притчин // *Нові технології: Науковий вісник КУЕІТУ*. – 2004. – № 4–5. – С. 82–86.
77. Digges T. G. The basis of automatic diameter utilizing bright ring meniscus reflections / T. G. Digges, R. H. Hopkins // *Journal Cryst. Growth*. – 1975. – Vol. 29. – P. 326–328.
78. Калиткин Н. Н. Численные методы / Н. Н. Калиткин. – М. : Наука, 1978. – 512 с.
79. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики / Марчук Г. И. – М. : Наука, 1989. – 328 с.
80. Самарский А. А. Теория разностных схем / Самарский А. А. – М. : Наука, 1989. – 616 с.
81. Самарский А. А. Методы решения сеточных уравнений / А. А. Самарский, Е. С. Николаев. – М. : Наука, 1978. – 592 с.
82. Каханер Д. Численные методы и программное обеспечение / Каханер Д., Моулер К., Нэш С. – М. : Мир, 1998. – 435 с.
83. Джордж А. Численное решение больших разреженных систем уравнений: пер. с англ. / А. Джордж, Дж. Лю. – М. : Мир, 1984. – 343 с.
84. Формалев В. Ф. Метод переменных направлений с экстраполяцией по времени для параболических задач со смешанными производными / В. Ф. Формалев // *Вычислительные технологии*. – 1996. – Т. 1, № 2. – С. 99–103.
85. Тихонов А. Н. Уравнения математической физики: учебное пособие для

- ВУЗов / А. Н. Тихонов, А. А. Самарский. – М. : Наука, 1977. – 735 с.
86. Гольд И. М. Математическая модель процесса выращивания монокристаллов методом Чохральского / И. М. Гольд, В. С. Лейбович // Автоматизация химической промышленности. – 1973. – С. 7–11.
87. Тевяшев А. Д. Математические модели физических процессов при выращивании монокристаллов методом Чохральского / А. Д. Тевяшев, В. С. Суздаль, Ю. М. Бородавко, А. А. Пелипец // Радиоэлектроника и информатика. – 2001. – № 4 (17). – С. 33–43.
88. Crochet M. J. Finite-element simulation of Czochralski bulk flow / M. J. Crochet, P. J. Wouters, F. T. Geyling, A. S. Jordan // Journal Crystal Growth. – 1983. – Vol. 65, Iss. 1–3. – P. 153–165.
89. Virzi A. Finite element analysis of the thermal history for Czochralski growth of large diameter silicon single crystals / A. Virzi // Journal Crystal Growth. – 1989. – Vol. 97. – Iss. 1. – P. 152–161.
90. Antonov V. A. Analysis of crystal-meniscus system behaviour under Czochralski crystal growth / V. A. Antonov // Journal of Crystal Growth. – 2001. – Vol. 226. – P. 555–561.
91. Вerezуб Н. А. Моделирование трехмерных течений расплава при асимметричном выращивании монокристаллов методом Чохральского / Н. А. Вerezуб, А. И. Простомолотов // Рост монокристаллов и тепломассоперенос. Труды пятой международной конференции в 4-х томах (25–30 сентября 2005, Обнинск). – Т.3. – С. 686–695.
92. Мамян А. Л. Концентрационное переохлаждение при флуктуациях температуры расплава при выращивании кристаллов методом Чохральского / А. Л. Мамян, О. Г. Налбандян // Физика и химия обработки материалов. – 1985. – № 3. – С. 107–110.
93. Jones A. D. W. The temperature field of a model Czochralski melt / A. D. W. Jones // Journal Crystal Growth. – 1984. – Vol. 69. – Iss. 1. – P. 165–172.
94. Простомолотов А. И. Сложный теплообмен и гидродинамика в различных вариантах метода Чохральского / Простомолотов А. И., Сидельников С. А.,

- Хенкин В. С., Атабаев С. Ч. – М. : Ин-т. пробл. мех., 1989. – 47 с. – (Препринт / АН СССР, Ин-т. пробл. мех.; ИПМ 1989–427).
95. Математическое моделирование тепловых процессов при выращивании монокристаллов: математические модели и их программная реализация / Простомолотов А. И., Сидельников С. А., Черкасов А. В., Чернышенко О. В. – М. : Ин-т. пробл. мех., 1990. – 44 с. – (Препринт / АН СССР, Ин-т. пробл. мех.; ИПМ 1990–108).
96. Бакирова О. И. Численное исследование тепло- и массопереноса в системе расплав-кристалл при получении полупроводниковых материалов / О. И. Бакирова, О. В. Пелевин, А. М. Соколов // Известия АН СССР. Серия: физика. – 1983. – Т. 47, № 2. – С. 334–337.
97. Chan Y. T. Numerical simulations of Czochralski silicon growth / Y. T. Chan, H. J. Gibeling, H. L. Grubin // Journal Appl. Phys. – 1988. – Vol. 64. – Iss. 3. – P. 1425–1439.
98. Жариков Е. В. Исследование распределения температур в расплаве при выращивании методом Чохральского / Жариков Е. В., Заварцев Ю. Д., Калитин С. П. – М. : Ин-т. общ. физ., 1987. – 14 с. – (Препринт / АН СССР, Ин-т. общ. физ.; ИОФ 19879–38).
99. Ekyo K. Influence of growth conditions on melt interface temperature oscillations in silicon Czochralski growth / Kuroda Ekyo, Kozuka Hirotsugu // Journal Crystal Growth. – 1983. – Vol. 63. – Iss. 2. – P. 276–284.
100. Virzi A. Finite element analysis of the thermal history for Czochralski growth of large diameter silicon single crystals / A. Virzi // Journal Crystal Growth. – 1989. – Vol. 97. – Iss. 1. – P. 152–161.
101. Простомолотов А. И. Разработка и применение методов моделирования в технологиях выращивания монокристаллов из расплава : дис. на соискание ученой степени доктора технических наук : 05.27.06 / Анатолий Иванович Простомолотов. – М., 2004. – 362 с.
102. Калаев В. В. Решение сопряжённой задачи гидродинамики и теплообмена в устройствах Чохральского для выращивания кристаллов кремния :

- дис. на соискание ученой степени кандидата физ.-мат. наук : 01.02.05 / Владимир Владимирович Калаев. – СПб., 2003. – 168 с.
103. Bottcher K. Numerical modelling of heat transfer in GaSb Czochralski crystal growth (CZ and LEC) / K. Bottcher, A. Kruger, B. Schleusener // *Journal Crystal Res. and Technol.* – 1988. – Vol. 23. – Iss. 6. – P. 821–829.
104. Crowley A. A. Crowley A. A. Modelling of the growth of GaAs by LEC Technique. 1. Thermal distribution in the crystal / A. A. Crowley, E. I. Stern, D. I. Hurle // *Cryst. Growth.* – 1991. – Vol. 108. – Iss. 2. – P. 627–636.
105. Schvezov C. Mathematical modelling of the liquid encapsulated Czochralski growth of gallium arsenide: II. Stress model / C. Schvezov, I. V. Samarasekera, F. Weinberg // *Journal of Crystal Growth.* – 1987. – Vol. 84. – Iss. 2. – P. 219–230.
106. Meduoye G. O. Computer modelling of temperature and stress distributions in LEC-grown GaAs crystals / G. O. Meduoye, D. J. Bacon, K. E. Evans // *Journal of Crystal Growth.* – 1991. – Vol. 108. – Iss. 3–4. – P. 627–636.
107. Looze D. P. Modeling and identification of the liquid encapsulated Czochralski GaAs process for control / D. P. Looze, F. Azad, B. Bernstein, T. Collins // *Journal of Crystal Growth.* – 1995. – Vol. 148. – Iss. 1–2. – P. 79–95.
108. Meduoye G. O. The minimisation of thermal stresses during the growth of GaAs crystals / G. O. Meduoye, D. J. Bacon, K. E. Evans // *Journal of Crystal Growth.* – 1988. – Vol. 88. – Iss. 3. – P. 397–410.
109. Meduoye G. O. Modelling of the growth of GaAs by the LEC technique : II. Thermal stress distribution and influence of interface shape / G. O. Meduoye, K. E. Evans, D. J. Bacon // *Journal of Crystal Growth.* – 1989. – Vol. 97. – Iss. 3–4. – P. 709–719.
110. Jordan A. S. The theory and practice of dislocation reduction in GaAs and InP / A. S. Jordan, A. R. Neida, R. Caruso // *Journal of Crystal Growth.* – 1984. – Vol. 70, Iss. 1–2. – P. 555–573.
111. Kelly K. W. Model-based control of thermal stresses during LEC growth of GaAs II. Crystal growth experiments / K. W. Kelly, S. Motakef, K. Koai // *Journal of Crystal Growth.* – 1991. – Vol. 113. – Iss. 1–2. – P. 265–278.

112. Ostrogorsky A. G. Infrared absorbance of B_2O_3 at temperatures to 1250 °C / A. G. Ostrogorsky, K. H. Yao, A. F. Witt // *Journal of Crystal Growth*. – 1987. – Vol. 84. – Iss. 3. – P. 460–466.
113. Hicks T. W. Fluid motion in the encapsulant region of the LEC growth system / T. W. Hicks // *Journal of Crystal Growth*. – 1987. – Vol. 84. – Iss. 4. – P. 598–600.
114. Панфилов И. В. Применение математического моделирования для анализа процессов теплообмена при выращивании монокристаллов кремния методом Чохральского в промышленных установках: дис. на соискание ученой степени кандидата технических наук : 05.27.06 / Игорь Владимирович Панфилов. – М., 2002. – 129 с.
115. Motakef S. Thermoelastic analysis of GaAs in lec growth configuration : II. Temporal evolution of the stress field / S. Motakef // *Journal of Crystal Growth*. – 1988. – Vol. 88. – Iss. 3. – P. 341–352.
116. Ramachandran P. A. Simulation of temperature distribution in crystals grown by Czochralski method / P. A. Ramachandran, M. P. Dudukovi // *Journal of Crystal Growth*. – 1985. – Vol. 71. – Iss. 2. – P. 399–408.
117. Мильвидский М. Г. Структурные дефекты в монокристаллах полупроводников / М. Г. Мильвидский, В. Б. Освенский. – М. : Металлургия, 1984. – 256 с.
118. Эйдензон А. М. Условия возникновения дислокаций в первоначально бездислокационных монокристаллах кремния, выращенных из расплава / А. М. Эйдензон // *Изв. АН СССР. Сер. Физическая*. – 1980. – Т. 44, № 2. – С. 312–319.
119. Нашельский А. Я. Технология полупроводниковых материалов / Нашельский А. Я. – М. : Металлургия, 1972. – 432 с.
120. Вильке К. Выращивание кристаллов / Вильке К. – Львов : Недра, 1977. – 600 с.
121. Татарченко В. А. Устойчивый рост кристаллов / Татарченко В. А. – М. : Наука, 1988. – 310 с.

122. Пузанов Н. И. Влияние условий выращивания на формирование микродефектов в бездислокационном кремнии / Н. И. Пузанов, А. М. Эйдензон, В. И. Роговой // Кристаллография. – 1989. – Т. 34, № 2. – С. 461–470.
123. Бурагас С. Ф. Получение и исследование кристаллов / С. Ф. Бурагас, П. Е. Стадник, Б. Л. Тиман // Сб. научн. трудов Ин-та монокристаллов. – 1978. – С. 78–80.
124. Технология полупроводникового кремния / [Фалькевич Э.С., Пульнер Э.О., Червоний И.Ф. и др.]. – М. : Metallurgia, 1992. – 408 с.
125. Оксанич А. П. О связи напряженного состояния с дефектами кристаллической структуры в арсениде галлия / А. П. Оксанич, Ю. А. Концевой, В. М. Чернер, Г. Д. Мельников // Заводская лаборатория. – 1987. – № 7. – С. 90–91.
126. Oksanich A. P. Principles of the control system for dislocation-free silicon single crystal diameter and melt temperature / A. P. Oksanich, S. E. Pritchyn, N. D. Vdovichenko // Functional materials. – 2001. – Vol. 8. – Iss. 2. – P. 377–380.
127. Оксанич А. П. Моделирование процессов образования дислокаций под действием термических напряжений в слитках GaAs, выращиваемых из расплава методом Чохральского с жидкостной герметизацией / А. П. Оксанич, Л. Г. Шепель, В. В. Батареев // Прикладная радиоэлектроника. – 2005. – Т. 4, № 2. – С. 185–194.
128. Оксанич А. П. Разработка процедуры определения температурных полей и термопластических напряжений в слитках GaAs, выращенных ЛЕС методом / А. П. Оксанич, П. А. Хозя, С. Э. Притчин // Новые технологии. Научный вестник Кременчугского университета экономики, информационных технологий и управления. – 2008. – № 1 (9). – С. 4–10.
129. Оксанич А. П. Промышленные методы и устройства исследования напряженно-деформированного состояния полупроводниковых материалов / Оксанич А. П. – Харьков : Институт монокристаллов, 2001. – 82 с.
130. Оксанич А. П. Модель термоупругих напряжений и плотности дислока-

- ций в кристаллах GaAs, выращиваемых из расплава / А. П. Оксанич, А. В. Вашерук, П. А. Хозя // Сложные системы и процессы. – 2007. – № 2. – С. 3–8.
131. Оксанич А. П. Математическое моделирование процесса выращивания Cz монокристаллов GaAs с использованием 3D информации о термоупругих напряжениях / А. П. Оксанич, А. В. Вашерук, П. А. Хозя // Праці Луганського відділення Міжнародної Академії інформатизації. – 2007. – №2 (15), Ч.1. – С. 89–93.
132. Васильев А. Н. О нейросетевом подходе к построению приближенных решений прикладных задач математической физики / А. Н. Васильев // Научно-технические ведомости СПбГТУ. – 2006. – № 3. – С. 182–186.
133. Васильев А. Н. Применение искусственных нейронных сетей к задаче Стефана / А. Н. Васильев, Д. А. Тархов // Искусственный интеллект. – 2005. – № 1. – С. 37–47.
134. Васильев А. Н. Нейросетевая методология построения приближённых решений дифференциальных уравнений по экспериментальным данным / А. Н. Васильев, Д. А. Тархов // Материалы международной конференции «Интеллектуальные и многопроцессорные системы – 2005» (26 сентября–1 октября 2005, Таганрог, Донецк, Минск). – Т. 2. – С. 219–223.
135. Васильев А. Н. Нейронные сети как новый универсальный подход к численному решению задач математической физики / А. Н. Васильев, Д. А. Тархов. – М. : Радиотехника, Нейрокомпьютеры : разработка, применение, 2004. – №7–8. – С. 111–118.
136. Горбаченко В. И. Пути использования нейронных сетей для решения обратных задач математической физики // В. И. Горбаченко, С. А. Москвитин // Материалы XIV Всероссийского семинара «Нейроинформатика и ее приложения» (6–8 октября 2006, Красноярск). – С. 35–36.
137. Lee H. Neural algorithms for solving differential equations / H. Lee, I. Kang // Journal of Computational Physics. – 1990. – Vol. 91. – P. 110–117.
138. Wang L. Structured trainable networks for matrix algebra / L. Wang, J.

- M.Mendel // IEEE Int. Joint Conference on Neural Networks. – 1990. – Vol. 2. – P. 125–128.
139. Gupta A. Highly Scalable Parallel Algorithms for Sparse Matrix Factorizations / A. Gupta, G. Karypis, V. Kumar // IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems. – 1995. – Vol. 8. – Iss. 5. – P. 502–520.
140. Lagaris I. E. Artificial Neural Networks for Solving Ordinary and Partial Differential Equations / I. E. Lagaris, A. Likas, D. I. Fotiadis // IEEE Trans. on Neural Networks. – 1998. – Vol. 4. – P. 987–1000.
141. Lagaris I. E. Artificial Neural Networks for Solving Ordinary and Partial Differential Equations / I. E. Lagaris, A. Likas, D. I. Fotiadis // IEEE Transactions on Neural Networks. – 1998. – Vol. 9. – Iss. 5. – P. 422–448.
142. Васильев А. Н. Математическое моделирование систем с распределенными параметрами на основе нейросетевой технологии : дис. на соискание ученой степени доктора технических наук : 05.13.18 / Александр Николаевич Васильев. – Спб., 2011. – 365 с.
143. Рутковская Д. Нейронные сети, генетические алгоритмы и нечеткие системы: пер. с польск. / Рутковская Д., Пилиньский М., Рутковский Л. – М. : Горячая линия – Телеком, 2004. – 452 с.
144. Бодянский Е. В. Искусственные нейронные сети: архитектуры, обучение, применения / Е. В. Бодянский, О. Г. Руденко. – Х. : ТЕЛТЕХ, 2004. – 372 с.
145. Руденко О. Г. Основы теории искусственных нейронных сетей / О. Г. Руденко, Е. В. Бодянский. – Х. : ТЕЛТЕХ, 2002. – 317 с.
146. Круглов В. В. Искусственные нейронные сети. Теория и практика / В. В. Круглов, В. В. Борисов. – М. : Горячая линия–Телеком, 2002. – 382 с.
147. Bishop C. M. Neural Networks for Pattern Recognition / C. M. Bishop // Oxford: Clarendon Press, 1995. – 482 p.
148. Любарский Ю. Я. Интеллектуальные информационные системы / Любарский Ю. Я. – М. : Наука, 1990. – 232 с.
149. Интеллектуальные системы поддержки принятия решений в нештатных

- ситуациях с использованием информации о состоянии природной среды / В. А. Геловани, А. А. Башлыков, В. Б. Бритков, Е. Д. Вязилов. – М. : Эдиториал УРСС, 2001. – 304 с.
150. Вагин В. Н. Некоторые базовые принципы построения интеллектуальных систем поддержки принятия решений реального времени / В. Н. Вагин, А. П. Еремеев // Известия РАН. Теория и системы управления. – 2001. – № 6. – С. 114–123.
151. Говоруха В. Б. Теоретичні основи розробки систем підтримки прийняття рішень / В. Б. Говоруха, О. К. Ткачова // Вісник Академії митної служби України. Серія : Технічні науки. – 2010. – № 2 (44). – С. 130–137.
152. Варшавский П. Р. Методы правдоподобных рассуждений на основе аналогий и прецедентов для интеллектуальных систем поддержки принятия решений / П. Р. Варшавский, А. П. Еремеев // Новости искусственного интеллекта. – 2006. – № 3. – С. 39–62.
153. Климчук С. А. Разработка СППР технической диагностики кранов мостового типа на основе прецедентов / С. А. Климчук // Вісник Східноукраїнського національного ун-т імені Володимира Даля. Серія : Технічні науки. – 2010. – № 2 (144). – С 64–71.
154. Zahng G. Forecasting with Artificial Networks: The State of the Art / G. Zahng, B. E. Patuwo, M. J. Hu // International Journal of Forecasting. – 1998. – Vol.14. – P. 35–62.
155. Prokhorov D. V. Comparative Study of Stock Trend Prediction Using Time Delay, Recurrent and Probabilistic Neural Networks / Prokhorov D. V., Saad E. W., Wunsch D. C. // IEEE Transactions on Neural Networks. – 1998. – Vol.6. – Iss. 9. – P.1456–1470.
156. Huang B. Q. Multi-Context Recurrent Neural Network for Time Series Applications / B. Q. Huang, T. Rashid, M. T. Kechadi // International Journal of Computational Intelligence. – 2006. – Vol.3. – Iss. 1. – P.1304–1386.
157. Gooijr J. G. 25 Years of IIF Time Series Forecasting: A Selective Review / J. G. Gooijr, R. J. Hyndman // Tinbergen Institute Discussion Paper. – 2005. – Vol.

- 068 (4).
158. Mendel J. Non-Singleton Fuzzy Logic Systems: Theory and Application / J. Mendel, G. Mouzouris // *IEEE Transactions on Fuzzy Systems*. – 1997. – Vol. 5. – P.56–71.
159. Mouzouris G. C. Dynamic Non-Singleton Fuzzy Logic Systems for Nonlinear Modeling / G. C. Mouzouris, J. M. Mendel // *IEEE Transactions on Fuzzy Systems*. – 1997. – Vol. 5. – Iss. 2. – P.56–71.
160. Батыршин И. З. Перцептивные функции и гранулярные производные в вычислении со словами / И. З. Батыршин // Сборник трудов II-го Международного научно-практического семинара «Интегрированные модели и мягкие вычисления в искусственном интеллекте» (29 сентября 2003, Москва). – С. 12–19.
161. Zadeh L. A. From Computing with Numbers to Computing with Words – From Manipulation of Measurements to Manipulation of Perceptions / L. A. Zadeh // *IEEE Transactions on Circuits and Systems*. – 1999. – Vol. 45. – P. 105–119.
162. Clemen R. T. Combining Forecasts: A Review and Annotated Bibliography (with Discussion) / R. T. Clemen // *International Journal of Forecasting*. – 1989. – Vol. 5. – P. 559–583.
163. Taylor J. V. Investigating Improvements in the Accuracy of Prediction Intervals for Combinations of Forecasts: A Simulations Study / J. V. Taylor, D. W. Bunn // *International Journal of Forecasting*. – 1999. – Vol. 15. – P. 325–339.
164. Granger C. W. Improved Methods of Combining Forecasts / C. W. Granger, R. Ramanathan // *Journal of Forecasting*. – 1984. – Vol. 3. – P.197–204.
165. Fiordaliso A. A Nonlinear Forecasts Combination Method Based on Takagi-Sugeno Fuzzy Systems / A. Fiordaliso // *International Journal of Forecasting*. – 1998. – Vol. 14. – P.367–379.
166. Diebold E. X. The Use of Prior Information in forecast Combination / E. X. Diebold, P. Pauly // *International Journal of Forecasting*. – 1990. – Vol. 6. – P.

- 503–508.
167. Ярушкина Н. Г. Основы теории нечетких и гибридных систем: Учебное пособие / Ярушкина Н. Г. – М. : Финансы и статистика, 2004. – 347 с.
168. Комарцова Л. Г. Вопросы гибридизации методов представления данных и знаний / Л. Г. Комарцова // Сборник научных трудов III-го Международного научно-практического семинара «Интегрированные модели и мягкие вычисления в искусственном интеллекте» (25 сентября 2005, Москва). – С. 185–191.
169. Борзенко И. М. Адаптация, прогнозирование и выбор решений в алгоритмах управления технологическими процессами / Борзенко И. М. – М. : Энергоатомиздат, 1984. – 144 с.
170. Егупова Н. Д. Методы робастного, нейро-нечеткого и адаптивного управления / Егупова Н. Д. – М. : Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2002. – 744 с.
171. Красовский А. А. Универсальные алгоритмы оптимального управления непрерывными процессами / Красовский А. А., Буко В. Н., Шендрик В. С. – М. : Наука, 1977. – 272 с.
172. Бочарников В. П. Fuzzy Technology: основы моделирования и решения экспертно-аналитических задач / Бочарников В. П. – К. : Эльга, Ника – Центр, 2003. – 296 с.
173. Takagi T. Fuzzy identifications of systems and its application to modeling and control / T. Takagi, M. Sugeno // IEEE Trans. SMC–15. – 1985. – Iss. 1. – P. 116–132.
174. Дюбуа Д. Теория возможностей. Приложение к представлению знаний в информатике: пер. с франц. / Д. Дюбуа, А. Прад. – М. : Радио и связь, 1990. – 286 с.
175. Уотермен Д. Руководство по экспертным системам: пер. с англ. / Уотермен Д. – М. : МИР, 1989. – 338 с.
176. Орловский С. А. Проблемы принятия решений при нечеткой исходной информации / Орловский С. А. – М. : Наука, 1984. – 206 с.
177. Захаров В. Н. Современная информационная технология в системах

- управления / В. Н. Захаров // Известия академии наук. Теория и системы управления. – 2000. – № 1. – С. 70–78.
178. Левыкин В. М. Модель структуры информационно-аналитической системы управления качеством процесса выращивания монокристаллов полупроводников / В. М. Левыкин, И. В. Шевченко // Вісник Академії митної служби України. – 2013. – № 2. – С. 63–71.
179. Левыкин В. М. Модель специализированной системы поддержки принятия решений для коррекции процесса выращивания монокристаллов / В. М. Левыкин, И. В. Шевченко // Управляющие системы и машины. – 2014. – №2. – С. 32–38.
180. Левыкин В. М. Метод построения информационной технологии диагностики состояния сложного технологического процесса / В. М. Левыкин, И. В. Шевченко // Управляющие системы и машины. – 2014. – №3. – С. 33–38.
181. Щербак С. С. Информационная технология разработки специализированной СППР оперативного управления производством полупроводниковых изделий / С. С. Щербак, И. В. Шевченко, В. В. Завгородний, В. Ф. Шостак // Вісник Академії митної служби України. Серія «Технічні науки». – 2013. – Вип. 1 (49). – С. 74–85.
182. Бурагас С. Ф. Анализ условий выращивания монокристаллов методом Чохральского / С. Ф. Бурагас // Физика и химия кристаллов. – 1977. – № 5 – С. 88–94.
183. Степанов А. Е. Математическое моделирование процессов выращивания кристаллических полупроводниковых материалов / А. Е. Степанов, Л. Г. Кириллова. – К. : Наукова думка, 1988. –184 с.
184. Гольд И. М. Математическая модель процесса выращивания монокристаллов методом Чохральского / И. М. Гольд, В. С. Лейбович // Автоматизация химической промышленности. – 1973. – С. 7–11.
185. Ландау Л. Д. Гидродинамика / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : Наука, 1986. – 736 с.
186. Галин Н. М. Тепломассообмен / Н. М. Галин, П. Л. Кириллов. – М. :

- Энергоатомиздат, 1987. – 347 с.
187. Оксанич А. П. Метод и нейросетевая модель расчёта температурного поля расплава в процессе выращивания методом Чохральского / А. П. Оксанич, И. В. Шевченко, Ю. А. Краснопольская // Інформаційні системи і технології. Математичне моделювання. Вісник Кременчуцького національного університету імені Михайла Остроградського. – 2012. – № 1 (72). – Частина 1. – С. 54–60.
188. Краснопольская Ю. А. Нейросетевая модель расчёта температурного поля слитка в процессе выращивания монокристаллов методом Чохральского / Ю. А. Краснопольская, И. В. Шевченко, Е. А. Глушков, М. В. Репин // Нові технології. Науковий вісник ІЕНТ. – 2009. – № 2 (24). – С. 3–9.
189. Оксанич А. П. Численно-аналитическое решение задачи теплообмена с поверхности слитка в процессе выращивания монокристаллов GaAs методом Чохральского с жидкостной герметизацией / А. П. Оксанич, П. О. Хозя, И. В. Шевченко // Нові технології. Науковий вісник Кременчуцького університету економіки, інформаційних технологій і управління. – 2008. – № 4 (22). – С. 10–17.
190. Шевченко И. В. Моделирование процесса выращивания полупроводниковых материалов на основе нейронной сети и нечёткого клеточного автомата / И. В. Шевченко, Ю. А. Краснопольская, Е. А. Глушков, С. Л. Шкатуло // Нові технології. Науковий вісник ІЕНТ. – 2010. – № 1 (27). – С. 169–177.
191. Wolfram S. Universality and complexity in cellular automata / S. Wolfram // *Physica*. – 1984. – Iss. 10. – P. 1–35.
192. Тоффоли Т. Машины клеточных автоматов / Т. Тоффоли, Н. Марголус. – М. : Мир, 1991. – 280 с.
193. Авдонин Н. А. Математическое описание процессов кристаллизации / Авдонин Н. А. – Рига : Знание, 1980. – 178 с.
194. Кан Дж. Теория роста кристалла и движения границы раздела фаз в кристаллических материалах / Дж. Кан // *Успехи физ. наук*. – 1967. – Вып. 4 (91). – С. 677–689.
195. Рост кристаллов / [Горилецкий В. И., Гринев Б. В., Заславский Б. Г. и

- др.]. – Х. : АКТА, 2002. – 535 с.
196. Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур / [Самарский А. А., Попов Ю. П. и др.]. – М. : Наука, 1986. – 200 с.
197. Татарченко В. А. Параметрическое исследование модели роста кристаллов способами Чохральского и Степанова / В. А. Татарченко, Е. В. Татарченко, В. С. Успенский // Известия АН СССР. Серия: физика. – 1988. – Т. 52, № 10. – С. 1927–1931.
198. Беленький В. З. Геометрико-вероятностные модели кристаллизации / Беленький В. З. – М. : Наука, 1980. – 88 с.
199. Темкин Д. Е. О молекулярной шероховатости границы кристалл-расплав / Д. Е. Темкин // Механизм и кинетика кристаллизации. – 1964. – С. 86–97.
200. Лодиз Р. Рост монокристаллов: пер. с англ. / Р. Лодиз, Р. Паркер. – М. : Мир, 1974. – 540 с.
201. Тевяшев А. Д. Математическое моделирование термо- и гидродинамических процессов в тепловом узле установки для выращивания монокристаллов методом Чохральского / А. Д. Тевяшев, Ю. М. Бородавко, А. Ф. Гуменный // Новые технологии. – 2003. – № 2 (3). – С. 6–10.
202. Ковтун Г. П. Технологические приемы улучшения теплового режима выращивания кристаллов GaAs методом Чохральского / Г. П. Ковтун, А. И. Кравченко, А. И. Кондрик, А. П. Щербань // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. – 2004. – № 6. – С. 3–6.
203. Оксанич А. П. Виртуальный датчик для мониторинга температуры фонового нагревателя в тепловом узле установки для выращивания монокристаллов арсенида галлия / А. П. Оксанич, И. В. Шевченко, Ю. А. Краснопольская // Автоматизированные системы управления и приборы автоматики: Всеукраинский межведомственный научно-технический сборник. Харьковский Национальный университет радиоэлектроники. – 2011. – Вып. 156. – С. 16–26.
204. Левыкин В. М. Информационная технология мониторинга температур-

- ных полей в процессе выращивания монокристаллов / В. М. Левыкин, И. В. Шевченко // Вимірювальна та обчислювальна техніка в технологічних процесах. – 2014. – №1 (46). – С. 133–138.
205. Оксанич А. П. Математическая модель геометрии теплового узла установки для выращивания монокристаллов GaAs методом Чохральского / А. П. Оксанич, П. А. Хозя, И. В. Шевченко, В. А. Тербан // Прикладная радиоэлектроника. – 2008. – Т. 7, № 4. – С. 351–355.
206. Оксанич А. П. Усовершенствование математической модели взаимодействия тепловых потоков излучения слитка и экрана в установке для выращивания монокристаллов GaAs методом Чохральского / А. П. Оксанич, И. В. Шевченко, В. А. Тербан // Сборник научных трудов 3-й Международной научной конференции «Функциональная компонентная база микро-, опто- и наноэлектроники», (28 сентября – 2 октября 2010, Харьков – Кацивели). – С. 201–204.
207. Оксанич А. П. Численно-аналитический подход к моделированию тепловых явлений в процессе выращивания монокристаллов GaAs методом Чохральского / А. П. Оксанич, А. П. Хозя, И. В. Шевченко // Складні системи і процеси. – 2008. – № 2. – С. 14–18.
208. Mikki F. T. A Neural Network Approach in a Backward Heat Conduction Problem / F. T. Mikki, E. I. Issamoto, J. da Luz, P. P. B. de Oliveira, H. F. Campos-Velho, J. D. S. da Silva // Proceedings of the IV Brazilian Conference on Neural Networks. – 1999. – P. 19–24.
209. Тилман Б. Л. Анализ условий выращивания монокристаллов методом Чохральского / Б. Л. Тилман, С. Ф. Бурачас // Физика и химия кристаллов. – 1977. – № 3. – С. 1–5.
210. Шевченко И. В. Оптимизация конфигурации теплового экрана ростовой установки по критерию минимума неравномерности осевых температурных градиентов / И. В. Шевченко, А. П. Оксанич, С. А. Волохов // Системные технологии. Региональный межвузовский сборник научных работ. – 2010. – № 1 (66). – С. 3–17.
211. Шевченко И. В. Информационная технология оптимизации геометриче-

- ских параметров тепловых узлов установок для выращивания монокристаллов / И. В. Шевченко // Вісник Кременчуцького національного університету імені Михайла Остроградського. – 2013. – Вип. 4 (81). – С. 114–120.
212. Васильев В. Ф. Методы оптимизации / Васильев В. Ф. – М. : изд. Факториал-Пресс, 2002. – 824 с.
213. Курейчик В. М. Генетические алгоритмы и их применение / Курейчик В. М. – Таганрог: ТРТУ, 2002. – 242 с.
214. Beasley J. E. A Genetic Algorithm for the Set Covering Problem / Beasley J. E., Chu P. C. // European Journal Oper. Res. – 1996. – Vol. 94. – Iss. 2. – P. 394–404.
215. Balas E. Optimized Crossover-Based Genetic Algorithms for the Maximum Cardinality and Maximum Weight Clique Problems / E. Balas, W. Niehaus // Journal of Heuristics. – 1998. – Vol. 4. – Iss. 4. – P. 107–122.
216. Кротюк И. Г. Формирование многоуровневых оценок качества производственных процессов / И. Г. Кротюк, И. В. Шевченко // Нові технології. Науковий вісник КУЕІТУ. – 2006. – № 3 (13). – С. 89–95.
217. Салли И. В. Управление формой роста кристаллов / И. В. Салли, Э. С. Фалькевич. – К. : Научная мысль, 1989. – 160 с.
218. Оксанич А. П. Оптимизация решений при возникновении нештатных ситуаций в процессе выращивания монокристаллов кремния / А. П. Оксанич, В. Р. Петренко, Л. Г. Шепель // Вісник КДПУ. – 2007. – Вип. 3 (44). – Ч. 2. – С. 164–168.
219. Шевченко И. В. Эвристический метод кластеризации в метрическом пространстве признаков / И. В. Шевченко, А. О. Минашкин, Л. Н. Осипчук // Нові технології. – 2009. – № 4 (26). – С. 101–106.
220. Шевченко И. В. Использование знаний о предметной области при формировании и настройке нейронной сети для медицинской диагностики / И. В. Шевченко, Ю. В. Удовиченко // Нові технології. – 2009. – № 4 (26). – С. 112–119.
221. Шевченко И. В. Извлечение знаний из баз данных при помощи нейронной сети и нечёткого интерпретатора / И. В. Шевченко, Ф. Г. Мурашко, С.

- А. Лабзов // Нові технології. – 2008. – №4 (22). – С. 41–45.
222. Файзильберг Л. Математические методы оценки полезности диагностических признаков / Л. Файзильберг. – Монография. – К.: «Освіта України», 2010. – 152 с.
223. Шевченко И. В. Представление и получение знаний в инструментальной системе нечеткого моделирования / И. В. Шевченко, Ю. О. Стрелец, В. Е. Краскевич // Нові технології: Науковий вісник КУЕІТУ. – 2007. – № 1–2 (15–16). – С. 74–78.
224. Шевченко И. В. Диагностика неблагоприятных ситуаций в процессе выращивания монокристаллов полупроводников / И. В. Шевченко, Н. Н. Дымченко, С. А. Грицаков // Вісник Кременчуцького національного університету імені Михайла Остроградського. – 2014. – Вип. 1 / 2014 (84). – С. 34–43.
225. Шевченко И. В. Информационные технологии управления качеством процесса выращивания монокристаллов полупроводников / И. В. Шевченко // Восточно-Европейский журнал передовых технологий. – 2014. – Вып. 3 / 2 (69). – С. 52–56.
226. Хартман К. Планирование эксперимента в исследовании технологических процессов / К. Хартман, Э. Лецкий, В. Шефер. – М. : Мир, 1977. – 552 с.
227. Монтгомери Д. К. Планирование эксперимента и анализ данных: Пер. с англ. / Монтгомери Д. К. – Львов : Судостроение, 1980. – 384 с.
228. Мудров В. И. Методы обработки измерений / В. И. Мудров, В. Л. Кушко. – М. : Радио и связь, 1983. – 304 с.
229. Айвазян С. А. Прикладная статистика. Основы моделирования и первичная обработка данных / Айвазян С. А., Енюков И. С., Мешалкин Л. Д. – М. : Финансы и статистика, 1983. – 471 с.
230. Шевченко И. В. Программное обеспечение для расчёта температурного поля в слитках GaAs, выращиваемых по ЛЕС-технологии / И. В. Шевченко, Ю. А. Краснопольская, С. Л. Шкатуло // Інформаційно-управляючі системи та технології. Вісник Кременчуцького національного університету імені Михайла Остроградського. – 2011. – № 4 (69). Част. 1. – С. 38–42.
231. Оксанич А. П. Прогнозирование концентрации углерода в слитках при

- выращивании монокристаллов кремния для солнечной энергетики / А. П. Оксанич, И. В. Шевченко, С. А. Волохов // Радиоэлектроника и информатика. – 2009. – №3 (46). – С. 20–24.
232. Шевченко И. В. Методы получения контуров на цифровых растровых изображениях с нечётким отображением дислокаций в пластинах GaAs / И. В. Шевченко А. Н. Самойлов // Комп'ютерно-інтегровані технології: освіта, наука, виробництво. – 2013. – № 12. – С. 63–69.
233. Оксанич А. П. Влияние тепловых условий на термоупругие напряжения в слитках ПИН GaAs, выращиваемых по ЛЕС технологии / А. П. Оксанич, И. В. Шевченко, В. А. Тербан // Прикладная радиоэлектроника. – 2011. – Т. 10, № 1. – С. 101–105.
234. Шевченко И. В. Метод кластеризации данных, основанный на параллельном генетическом алгоритме / И. В. Шевченко, Е. С. Король, И. В. Тимошук // Вісник Кременчуцького національного університету імені Михайла Остроградського. – Кременчук : КрНУ, 2014. – Випуск 5 (88). – С. 56–61.
235. Шевченко И.В. Модель взаимодействия интеллектуального агента и среды как инструмент мониторинга сложного технико-экономического процесса / И. В. Шевченко, И. С. Шаповал, Т. Д. Стаценко // Вісник Кременчуцького національного університету імені Михайла Остроградського. – Кременчук: КрНУ, 2014. – Випуск 5 (88). – С. 131–135.
236. Модели и информационные технологии мониторинга и оптимизации процесса выращивания монокристаллов полупроводников. – Монография / Левыкин В.М., Шевченко И.В., Оксанич И.Г. – Кременчуг: ЧП Щербатых А.В., 2014. – 216 с.

ПРИЛОЖЕНИЕ А
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ
МОДЕЛИ КОСВЕННОГО ИЗМЕРЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ ФОНОВОГО
НАГРЕВАТЕЛЯ И МЕТОДИКА ИСПОЛЬЗОВАНИЯ МОДЕЛИ

Математическая модель модели для косвенного измерения температуры фонового нагревателя (ФН) представляет собой линейное уравнение регрессии (3.22). Как было указано в разделе 3, в перечень варьируемых факторов, которые рассматривались при синтезе модели входят: $X1$ – потребляемая мощность ФН; $X2$ – температура ОН; $X3$ – скорость вытягивания; $X4$ – скорость вращения затравки; $X5$ – скорость вращения тигля; $X6$ – уровень расплава. В табл. А.1 приведены обозначения, названия и уровни перечисленных факторов.

Таблица А.1 – Перечень и уровни изменения факторов

Факторы		Уровни действия факторов				
		1	2	3	4	5
1	Мощность, потребляемая ФН, Вт	1500	2300	–	–	–
2	Температура основного нагревателя, °С	1100	1300	–	–	–
3	Скорость вытягивания, мм/мин	0,07	0,14	–	–	–
4	Скорость вращения затравки, об/мин	10	20	–	–	–
5	Скорость вращения тигля, об/мин	5	10	–	–	–
6	Уровень расплава, %	100	80	60	40	20

Для натурного исследования влияния перечисленных факторов на температуру фонового нагревателя был составлен предварительный план экспери-

мента, структура которого показана в табл. А.2. В таблице указаны номера уровней. Специфика экспериментов на ростовой установке заключается в следующем:

1. Каждый эксперимент по измерению температуры ФН, температуры в отдельных точках расплава и окружающей слиток среды требует неоднократного механического вмешательства в сложный процесс роста монокристалла и, как правило, приводит к ухудшению его качества, то есть, к значительным материальным потерям. Поэтому количество экспериментов на ростовой установке приходится ограничивать.

2. Смена уровней факторов $X1$ и $X2$ предполагает выдержку времени, в течение которой затухает переходный процесс и устанавливается новый тепловой режим. Учитывая тот факт, что фактор $X6$ (уровень расплава) является динамическим, строгая фиксация его уровня предполагает, что факторы $X1$ и $X2$ должны быть изменены заблаговременно.

3. Процесс выращивания является необратимым во времени и, следовательно, при планировании эксперимента приходится это учитывать. А именно – во время вытягивания кристалла уровень расплава в тигле (фактор $X6$) последовательно проходит все указанные в таблице А.2 ступени, и изменить их порядок невозможно.

Все эти условия определили стратегию проводимых экспериментов. Были проведены 7 процессов выращивания, в которых исследуемые факторы $X1...X5$ изменялись так, чтобы строки таблицы 6.2 чередовались случайным образом, но без нарушения чередования уровней фактора $X6$.

Для всех точек плана проводились параллельные измерения в одинаковом количестве $k = 3$. Таким образом, общее число опытов, результаты которых легли в основу многофакторного анализа, составило 105. Для проверки адекватности модели впоследствии были проведены дополнительные эксперименты.

Таблица А.2 – План факторного эксперимента

Номер опыта	X1	X2	X3	X4	X5	X6
1	1	1	1	1	1	1
2	1	1	1	1	2	2
3	1	1	1	2	1	3
4	1	1	1	2	2	4
5	1	1	2	1	1	5
6	1	1	2	1	2	1
7	1	1	2	2	1	2
8	1	1	2	2	2	3
9	1	2	1	1	1	4
10	1	2	1	1	2	5
11	1	2	1	2	1	1
12	1	2	1	2	2	2
13	1	2	2	1	1	3
14	1	2	2	1	2	4
15	1	2	2	2	1	5
16	1	2	2	2	2	1
17	2	1	1	1	1	2
18	2	1	1	1	2	3
19	2	1	1	2	1	4
20	2	1	1	2	2	5
21	2	1	2	1	1	1
22	2	1	2	1	2	2
23	2	1	2	2	1	3
24	2	1	2	2	2	4
25	2	2	1	1	1	5

Продолжение табл. А.2

26	2	2	1	1	2	1
27	2	2	1	2	1	2
28	2	2	1	2	2	3
29	2	2	2	1	1	4
30	2	2	2	1	2	5
31	2	2	2	2	1	1
32	2	2	2	2	2	2
33	1	2	1	1	1	3
34	2	2	1	1	2	4
35	2	1	1	2	1	5

Для измерения температуры ФН и окружающих его элементов использовали алундированные микротермопары ТПР (тип В) диаметром 100 мкм, спаи которых вваривали в кварцевые чехлы, которые, в свою очередь, крепили к специальному кронштейну. С помощью специального координатного устройства осуществляли перемещение термопар как вдоль поверхности герметизатора и расплава, так и под поверхностью на стадиях разрачивания, вытягивания цилиндрической части и сведения слитка на конус в конце процесса. Погрешность измерения составляла $\pm 3^\circ\text{C}$.

Схема размещения точек измерения температуры в тепловом узле приведена на рис. А.1. Обработка данных эксперимента и синтез регрессионной модели проводились в пакетах MS Excel и StatGraphics 3.

При предварительной обработке данных эксперимента проведена проверка однородности дисперсии воспроизводимости. Для оценки воспроизводимости эксперимента проводилась статистическая обработка его результатов.

Проверка воспроизводимости или постоянства дисперсии отклика сводится к проверке гипотезы об однородности дисперсий $s_1^2, s_2^2, \dots, s_N^2$, найденных по результатам N опытов. Уточнённая величина выборочной дисперсии от-

клика s_i^2 для i -го опыта равна [225]:

$$S_i^2 = \frac{\sum_{q=1}^m (y_{iq} - \bar{y}_i)^2}{m-1} \quad (i=1, 2, \dots, N), \quad (\text{A.1})$$

где y_{iq} – отклики i -го опыта при q -м его повторе; m – количество повторов опыта; \bar{y}_i – среднее значение отклика в i -м опыте.

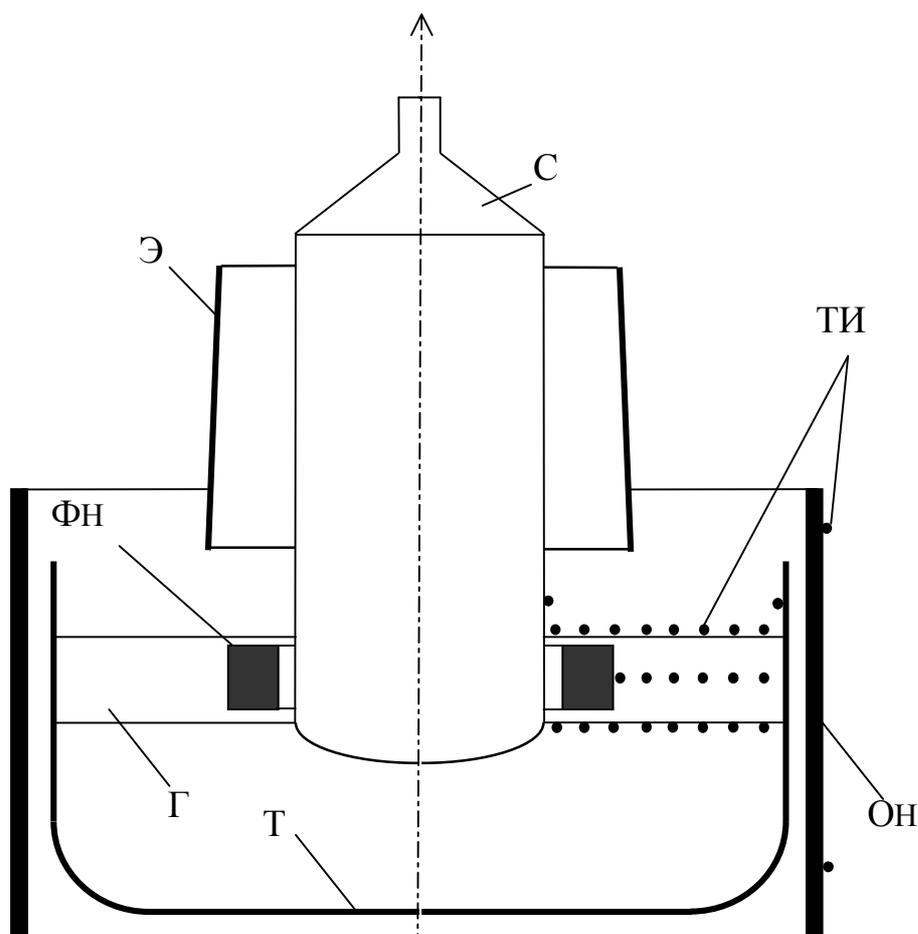


Рисунок А.1 – Схема размещения точек измерения температуры:
 С – слиток; ОН – основной нагреватель; ФН – фоновый нагреватель; Э – экран; Т – тигель; Г – герметизатор;
 Р – расплав; ТИ – точки измерения.

Для проверки гипотезы об однородности многих дисперсий при одинаковом для каждого опыта числе повторов применяется критерий Кохрена (G -критерий) [229]:

$$G = \frac{S_{max}^2}{\sum_{i=1}^N S_i^2}, \quad (A.2)$$

где S_{max}^2 – наибольшая найденная выборочная дисперсия. Гипотеза об однородности дисперсий подтверждается, если вычисленное значение G -критерия не превышает критического, определённого по соответствующим таблицам [176] в зависимости от числа степеней свободы $k_{G1} = m-1$, $k_{G2} = N$ и выбранного уровня значимости. При заданном числе степеней свободы каждого измерения $k_{G1} = 2$ и общем числе опытов $N=35$ оценка по числу Кохрена составила $G_{эксп} = 0,092537$, что существенно меньше соответствующего интерполированного табличного значения (0,2152) для уровня значимости 0,01 [227].

Уравнение регрессии строилось в виде линейного полинома в реальных координатах:

$$Y = a_0 + \sum_{i=1}^p a_i X_i, \quad (A.3)$$

где p – число независимых переменных.

На первом этапе в модель были включены все 6 независимых переменных. Несмотря на то, что R^2 статистика показала, что модель объясняет 99,2194% изменчивости отклика Y , оценка стандартной ошибки показывает отклонение остатков 6,075, что не является удовлетворительным при точности прямых измерений платиновой термопарой ± 3 °С и желательной точности косвенных измерений не хуже ± 5 °С.

Статистический анализ исходной модели показал, что переменными $X4$ и $X5$ можно пренебречь, так как P -значение (P -value – граничный уровень значимости) для $X4$ и $X5$ больше или равно 0,10 (0,4634 и 0,5273 соответственно). Другими словами, эти факторы не являются статистически значимыми на 90% или более доверительном уровне и их влияние не является закономерным.

Дальнейшие исследования велись с переменными $X1$, $X2$, $X3$, $X6$. Рег-

рессионный анализ выявил структуру линейной модели в виде выражения (3.22), показанного в разделе 3:

$$Y=765,14+0,143649*X1+0,0512563*X2+48,9129*X3 - 0,079936*X6$$

Как известно, качество регрессионной модели определяется значимостью (качеством) коэффициентов модели и качеством регрессионного уравнения в целом. В табл. А.3 показаны параметры качества коэффициентов модели, включая константу.

Таблица А.3 – Оценки коэффициентов модели и их значимости

Параметр	Стандартная оценка	Ошибка	t–статистика	P-Value
Константа	765,14	5,97353	127,895	0,0000
X1	0,143649	0,00105857	142,628	0,0000
X2	0,0512563	0,00426022	9,00704	0,0000
X3	48,9129	12,1232	7,35662	0,0000
X6	-0,079936	0,0150132	-2,20036	0,0036

Сравнивая значения коэффициента с его стандартной ошибкой, можно судить о значимости коэффициента. В данном случае сравнение указанных значений по t-статистике при уровне значимости P-Value не более 0,05, показывает, что все коэффициенты статистически значимы [228].

В табл. А.4 приведена матрица оценок коэффициентов парной корреляции между переменными модели. Значимой корреляции с абсолютными значениями более 0,5 не выявлено.

Общие результаты регрессионного анализа таковы:

- R^2 -статистика составляет 99,855%, то есть более 99% изменчивости отклика обусловлено изменением четырех указанных переменных;
- скорректированная величина R^2 (с учетом числа переменных регрессии – adjusted for d.f.) составляет 99,836%;

- стандартная ошибка остатков (SEE) составляет 2,48652;
- среднее значение остатков – 1,90981;

Таблица А.4 – Оценки взаимной корреляции факторов

	X1	X2	X3	X6
X1	1,0000	0,0750	-0,0764	-0,0250
X2	0,0750	1,0000	0,0698	0,1130
X3	-0,0764	0,0698	1,0000	-0,0692
X6	-0,0250	0,1130	-0,0692	1,0000

Статистика Дарбина-Уотсона (DW) составляет 0,928572 ($P=0,0001$). Эта статистика является результатом тестирования остатков для определения, есть ли существенная корреляция с порядком расположения данных в таблице. Так как P -значение для DW меньше 0,05, есть вероятность “сериальной” корреляции. Это, на наш взгляд, связано с тем, что переменная X6 в ходе опытов изменялась в одном и том же порядке.

С учетом того, что самое высокое P -значение независимых переменных составляет 0,0336, что меньше, чем уровень 0,05, считаем, что все независимые переменные являются статистически значимыми на уровне достоверности 95%.

Для проверки качества уравнения регрессии (3.22) использовалась F-статистика, представляющая собой отношение объясненной суммы квадратов остатков (в расчете на одну переменную) к остаточной сумме квадратов (в расчете на одну степень свободы). Результаты расчета F-статистики показаны в табл. 6.5. Значения F-отношения и P-Value показывают, что уравнение (3.22) имеет достаточный уровень адекватности.

Статистическая значимость (F-статистика) для каждой переменной показана в таблице А.6. Все включенные переменные статистически значимы.

Таблица А.5 – Результаты вычисления F-статистики

Источник	Суммарная квадратичная ошибка	Число степ. свободы	Средняя кв. ошибка на одну степень свободы	F-отношение	P-Value
Модель	127963,0	4	31990,8	5174,2	0,0000
Остатки	185,483	30	6,18277		
Общая	128149,0	34			

Верхний и нижний пределы оценок коэффициентов модели в доверительном интервале 95% с учетом объема имеющихся данных и наличия шума показаны в таблице А.7. Пределы изменения значений коэффициентов на 95%-ном доверительном уровне достаточно узкие.

Была вычислена также DFITS-статистика – диагностика влияния всех отдельно взятых наблюдений, которая показывает, насколько сильно данное наблюдение “оттягивает” на себя линию регрессии. Анализ не выявил точек с необычно большими значениями “рычага” DFITS.

Таблица А.6 – Результаты вычисления F-статистики по каждой переменной

Параметр	Суммарная квадратичная ошибка	Число ст. св.	Сред. кв. ошибка на одну степень свободы	F-отношение	P-Value
X1	127134,0	1	127134	20562,7	0,0000
X2	476,251	1	476,251	77,03	0,0000
X3	322,449	1	322,449	52,15	0,0000
X6	29,9345	1	29,9345	4,84	0,0036
Модель	127963,0	4	–	–	–

Таблица А.7 – Предельные оценки коэффициентов модели
в доверительном интервале 95%

Параметр	Стандартная оценка	Отклонение	Нижний предел	Верхний предел
Константа	765,14	2,04244	760,969	769,311
X1	0,143649	0,0003634	0,142907	0,144391
X2	0,0512563	0,0014446	0,048306	0,0542066
X3	48,9129	4,12283	40,493	57,3329
X6	-0,079936	0,00509	-0,0903248	-0,06955

На рис. А.2 приведен график студентизированных остатков (нормированных разностей между модельными и наблюдаемыми значениями) в зависимости от номера наблюдения.

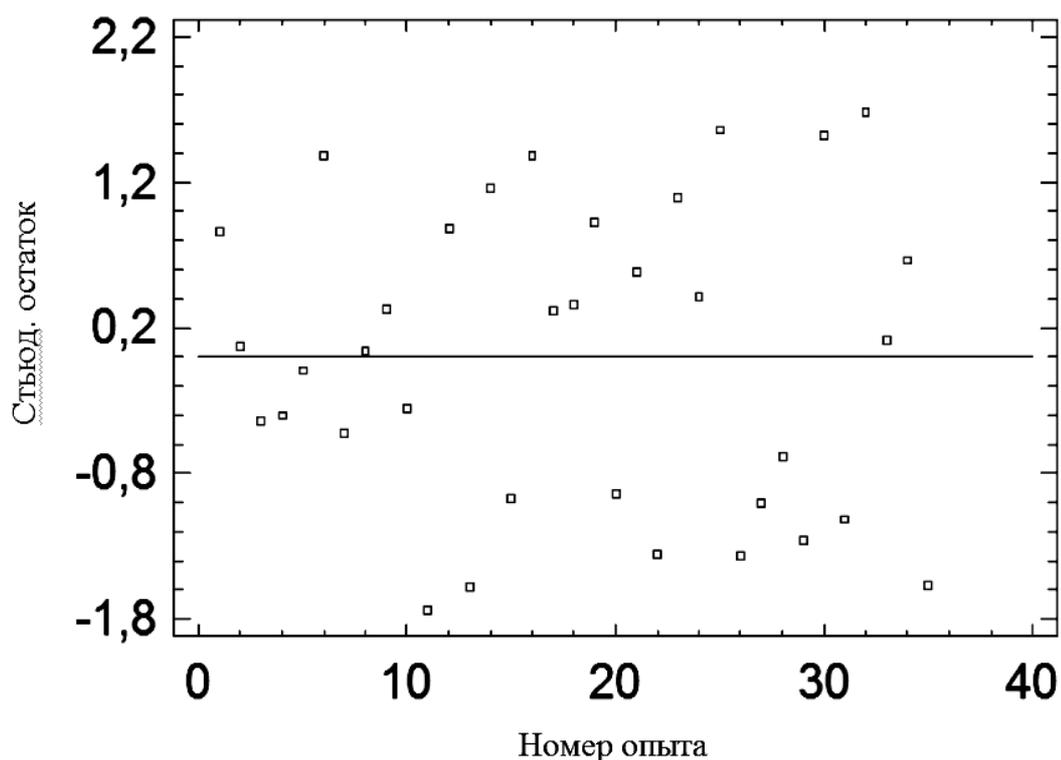


Рисунок А.2 – График студентизированных остатков
в зависимости от номера наблюдения.

Студентизированный остаток – это остаток, делённый на оценку своего стандартного отклонения, меняющегося от одного наблюдения к другому,

в зависимости от расстояния между X_i и средним значением X [227]. Стюдентизированные остатки точнее отражают различия в дисперсиях истинных ошибок для разных наблюдений. Различимого криволинейного тренда остатков не наблюдается, что позволяет говорить о том, что гипотеза о линейности модели подтверждается.

Если рассматривать целевое предназначение модели, то под адекватностью понимают степень соответствия модели этому предназначению. Проверка адекватности проводится на основании экспериментальной информации. В данном случае проверка адекватности заключается в доказательстве факта, что точность результатов измерения температуры ФН, полученных по модели, будет не хуже требуемой.

Верификация разработанной математической модели проведена путем сравнения значений температуры ФН, полученных с помощью модели и значений, полученных путём прямого измерения термопарой. Значения независимых переменных задавали в произвольных точках поверхности отклика. Эти же значения факторов использованы в модели для определения температуры ФН. Таблица А.8 включает в себя: модельные значения Y , °С; стандартную ошибку для каждого модельного значения; 95,0%-й доверительный интервал модельных значений; 95,0%-й доверительный интервал для среднего отклика.

Стандартные ошибки структурных параметров уравнения (3.22) и значение коэффициента детерминации R^2 свидетельствуют о статистической адекватности модели. Однако при наличии возможности физического моделирования была осуществлена и верификация модели путем сравнения получаемых на ней данных и измеренных значениях температуры фонового нагревателя в процессе выращивания. Для этого были задействованы аппаратные средства существующей системы автоматизированного контроля и управления ростовой установки “Арсенид–1М”.

Таблица А.8 – Прогнозные значения отклика модельной функции
в доверительном интервале 95%

№ оп.	Модельное значение, °С	Стандартная ошибка модельного значения	Нижний 95%-ный доверительный уровень модельного значения	Верхний 95%-ный доверительный уровень модельного значения	Нижний 95%-ный доверительный уровень для среднего модельного значения	Верхний 95%-ный доверительный уровень для среднего модельного значения
1	1034	0,9074	1033	1036	1034	1035
2	1057	0,8868	1055	1059	1056	1057
3	1063	0,9238	1061	1065	1062	1063
4	1084	0,8927	1082	1086	1083	1084
5	1107	0,9019	1105	1108	1106	1107
6	1106	0,8944	1104	1108	1106	1107
7	1129	0,8797	1127	1131	1128	1129
8	1134	0,9176	1133	1136	1134	1135
9	1041	0,9092	1039	1042	1040	1041
10	1063	0,9092	1062	1065	1063	1064
11	1063	0,8978	1061	1065	1062	1064
12	1086	0,8795	1084	1087	1085	1086
13	1091	0,9170	1089	1093	1091	1092
14	1112	0,8889	1111	1114	1112	1113
15	1135	0,9043	1133	1137	1135	1136

В таблице А.9 сравниваются округленные до 1°С модельные и экспериментальные значения температуры ФН и показана ошибка модели относительно результатов реальных измерений.

Таблица А.9 – Сравнение модельных и экспериментальных значений температуры ФН

Номер опыта	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
Мод., °С	1034	1057	1063	1084	1107	1106	1129	1134	1041	1063	1063
Эксп., °С	1035	1057	1062	1084	1108	1105	1126	1136	1043	1064	1062
Ост., °С	1	0	-1	0	1	-1	-3	2	2	1	-1
Номер опыта	12	13	14	15							
Мод., °С	1086	1091	1112	1135							
Эксп., °С	1085	1091	1110	1133							
Ост., °С	-1	0	-2	-2							

Несмотря на небольшое число опытов можно утверждать, что постоянной составляющей остатка не содержат. Анализ табличных данных показывает, что погрешность измерений при помощи виртуального датчика температуры в проведённых экспериментах не превышает $\pm 5^\circ\text{C}$, то есть сравнима с погрешностью измерений при помощи термопары с учётом неизбежных влияний динамики процесса вытягивания и нестабильности температуры расплава.

С использованием полученной математической модели, была сформирована методика косвенного измерения температуры фонового нагревателя при различных сочетаниях значений параметров технологического режима. Методика включает следующие этапы:

1. Для каждой конкретной ростовой установки виртуальный датчик верифицируется на типовом процессе выращивания. Для верификации достаточно одного пробного прогона процесса с измерением температуры ФН на трех этапах выращивания при помощи термопары, как это описано выше.

2. Если выявлена систематическая ошибка, оператор компенсирует её, регулируя значение постоянной составляющей модели в диалоговом окне программы контроля температуры.

3. В течении последующих процессов выращивания температура ФН вычисляется по следующим параметрам:

– температура основного нагревателя, °С (измеряется в реальном времени

прямым методом);

- скорость вытягивания, мм/мин (значение задаётся оператором);
- уровень расплава, вычисляемый в реальном времени по формуле:

$$h_p = \left(\frac{m_3 - m_c}{\rho_p \pi R_T^2} + h_T \right) \cdot 100\% ,$$

где m_3 – масса загрузки; m_c – измеренная в реальном времени масса выращенного на данный момент слитка; ρ_p – плотность расплава; R_T – радиус тигля; h_T – высота слоя герметизатора.

- потребляемая мощность ФН, кВт (измеряется в реальном времени прямым методом).

Методика прошла испытания в условиях производства монокристаллов GaAs диаметром 75...100 мм. Подтверждена валидность методики, то есть точность измерений температуры и повторяемость (воспроизводимость) результатов измерения. Применение методики на протяжении 2012...2013 г.г. в процессах выращивания показало повышение стабильности плотности дислокаций на уровне $N \leq 5 \cdot 10^3 \text{ см}^{-2}$. Данные по температуре ФН используются в подсистеме «Монитор» и подсистеме «Советчик», основная функция которой – поддержка принятия оперативных решений по коррекции параметров процесса выращивания монокристаллов GaAs.

ПРИЛОЖЕНИЕ Б
ДОКУМЕНТЫ ВНЕДРЕНИЯ

УТВЕРЖДАЮ
директор
ЧП «Галар»
Приватне підприємство
ГАЛАР
Код ЄДРПОУ 39216671
Бережний А.Н.
2013 г.

А К Т
о внедрении в производство
результатов диссертационной работы
Шевченко Игоря Васильевича на тему
«Методы, модели и информационные технологии мониторинга и оптимизации
процесса выращивания монокристаллов полупроводников»

Комиссия в составе: председатель – Тербан В.А., зам. директора ЧП «Галар», члены комиссии: главный метролог Холод А.Г., главный бухгалтер Омельянцева Е.О. составила этот акт о внедрении в производство разработанных Шевченко И.В. методов, моделей и информационных технологий мониторинга и оптимизации процесса выращивания монокристаллов на основе предложенной им концепции управления качеством процесса выращивания и реализованных в виде подсистем «Экран», «Мониторинг», «Советчик» в составе первой очереди информационно-аналитической системы управления качеством процесса выращивания монокристаллов.

Место внедрения: ЧП «Галар».

Состав внедрения:

Подсистема «Экран», обеспечивающая решение задачи оптимизации размеров и положения теплового экрана ростовой установки в процессе технологической подготовки производства арсенида галлия;

Подсистема «Мониторинг», обеспечивающая:

- контроль температурных полей расплава и слитка в процессе выращивания и прогнозирование возникновения критических ситуаций по вероятности превышения плотности дислокаций в выращиваемом слитке;

- периодическое уточнение параметров моделей и алгоритмов прогнозирования;

- ведение базы данных подсистемы и ее синхронизацию с базой данных АСУТП.

Подсистема «Советчик», осуществляющая функции поддержки принятия оперативных решений по коррекции режима выращивания и выходу из критических и нештатных ситуаций.

Суммарный экономический эффект от внедрения подсистем в производстве составляет 85.4 тыс. грн. в год.

Председатель комиссии

В.А. Тербан

Члены комиссии:

А.Г. Холод

Е.О. Омельянцева



УТВЕРЖДАЮ
главный инженер ПАО «КСЗ»
Шеворез Г.Ю.

» 08 2014 г.

А К Т
о внедрении в производство
результатов диссертационной работы
Шевченко Игоря Васильевича на тему
«Методы, модели и информационные технологии мониторинга и оптимизации
процесса выращивания монокристаллов полупроводников»

Комиссия в составе: председатель – Плохотнюк В.В., начальник управления метрологии и испытаний ПАО «КСЗ», члены комиссии: начальник лаборатории КИПиА Добрик О.В., инженер-металлограф II категории Мосиенко А.В. составили данный акт о внедрении в производство разработанных Шевченко И.В. метода, моделей и алгоритмов мониторинга процесса нормализации крупного железнодорожного литья.

Место внедрения: цех обрубки и термообработки ПАО «КСЗ».

Состав внедрения: программный модуль, встроенный в SCADA-систему контроля режима печи нормализации №6.

Программный модуль обеспечивает:

- контроль температурного режима печи путём фиксации показаний термопар в двух тепловых зонах;
- контроль температуры окружающей среды;
- контроль атмосферного давления;
- контроль влажности окружающей среды;
- контроль состояния входной и выходной заслонки;
- коррекцию уставок соотношения «газ-воздух» в контуре управления горелками печи с учетом значений вышеприведенных параметров.

В период эксплуатации программного модуля (с 21.12.2013 по 15.07.2014) за счет повышения эффективности регулирования теплового режима и улучшения равномерности нагрева деталей средний уровень балльности зерна по ОСТ-32-183-2001 стабильно составил 9...10 против 8...9 в предыдущие периоды эксплуатации печи.

Таким образом, применение программного модуля, реализующего мониторинг процесса нормализации позволило повысить качество отливок.

Председатель комиссии

В.В. Плохотнюк

Члены комиссии:

О.В. Добрик

А.В. Мосиенко



ЗАТВЕРДЖУЮ
Проректор КрНУ з науково-педагогічної та методичної роботи

Костін В.В.

2014 р.

АКТ
про впровадження в навчальний процес
результатів дисертаційної роботи
Шевченка Ігоря Васильовича на тему
"Методи, моделі та інформаційні технології моніторингу та оптимізації процесу
виращування монокристалів напівпровідників"

Комісія у складі:

голови: к.т.н., доцента, декана факультету електроніки та комп'ютерної інженерії Мосьпана В.О.;

членів комісії:

д.т.н., професора Оксанича А.П.,

к.т.н., доцента, с.н.с. Щербака С.С.

к.т.н., доцента Притчина С.Е.

склала цей акт про впровадження в навчальний процес лекційних матеріалів і методичних вказівок щодо виконання лабораторних робіт, розроблених Шевченко І.В. на основі результатів його дисертаційної роботи.

Місце впровадження: факультет електроніки та комп'ютерної інженерії КрНУ, кафедра інформаційно-управляючих систем.

Склад впровадження:

- лекції "Методика побудови інформаційної технології моніторингу складного технологічного процесу", "Розпізнавання ситуацій за допомогою нечіткої класифікаційної моделі" з курсу "Інтелектуальні технології в інформаційних системах";

- лекція "Архітектура спеціалізованої СППР" з курсу "Мультиагентні системи та технології підтримки прийняття рішень";

- методичні вказівки до виконання лабораторних робіт з курсу "Інтелектуальний аналіз даних" (Лабораторна робота "Перевірка адекватності та точності регресійної моделі для непрямого контролю температури");

- методичні вказівки до виконання лабораторних робіт з курсу "Мультиагентні системи та технології підтримки прийняття рішень" (Лабораторна робота "Паралельні еволюційні алгоритми").

Голова комісії

к.т.н., доцент Мосьпан В.О

Члени комісії

д.т.н., професор Оксанич А.П.

к.т.н., доцент, с.н.с. Щербак С.С.

к.т.н., доцент Притчин С.Е.