

一种检测单晶炉热场温度的新方法

张新雨, 刘丁[†], 汪姣, 李琦

(西安理工大学 自动化与信息工程学院, 陕西 西安 710048)

摘要: 为去除单晶炉热场温度测量信号中的低频干扰、提高温度信号的估计精度, 本文提出了一种基于跨维模拟退火(trans dimensional simulated annealing, TDSA)的单晶炉热场温度检测方法. 该方法首先将AIC(Akaike information criterion)信号个数判断准则纳入采样机制中以便对干扰个数采样估计, 进而利用所设计的基于信号频谱和轮盘赌思想的Metropolis Hastings机制对相应个数的干扰频率进行采样, 最后设计了混合均匀和高斯采样机制对单晶炉热场温度进行采样估计. 仿真和单晶炉工程实验结果表明, 该方法在干扰个数未知的情况下, 能够有效地抑制低频干扰、准确检测单晶炉热场的温度.

关键词: 单晶炉; 热场温度检测; 低频干扰; 跨维模拟退火; 最大似然准则; AIC准则; 最小二乘法

中图分类号: TP14; TP202+.2 **文献标识码:** A

A new method for measuring heat zone temperature of single crystal furnace

ZHANG Xin-yu, LIU Ding[†], WANG Jiao, LI Qi

(School of Automation and Information Engineering, Xi'an University of Technology, Xi'an Shaanxi 710048, China)

Abstract: We propose a trans-dimensional simulated annealing (TDSA)-based method for the temperature measurement of the single crystal furnace heat zone to remove the low frequency interference and improve the estimation accuracy of the temperature. This method firstly introduces Akaike information criterion (AIC) into the sampling mechanism to estimate the number of interferences, and then utilizes the designed Metropolis Hastings sampling mechanism that combines the signal frequency spectrum and roulette-based ideas to sample the estimated number of interference frequencies. Finally a mixed uniform and Gaussian distribution sampling mechanism is designed to sample and estimate the temperature of the single crystal furnace heat zone. Simulation and practical engineering experiment results show that the proposed method can effectively restrain the low frequency interference and accurately detect the temperature of the single crystal furnace heat zone with uncertain number of interferences.

Key words: single crystal furnace; heat zone temperature measurement; low frequency interference; trans-dimensional simulated annealing; maximum likelihood criterion; Akaike information criterion; least square

1 引言(Introduction)

单晶炉是利用直拉法生产集成电路材料的主要设备, 在其产业链中处于首要地位. 在单晶炉直拉单晶硅的过程中, 热是硅单晶生长的根本驱动力, 晶体生长对温度的变化极其敏感. 随着低纳米线距集成电路的要求不断提高, 对温度的稳定性、精确性都提出近乎苛刻的要求, 温度发生细微的变化都可能使晶体发生错位导致拉晶失败^[1]. 然而在实际过程中, 晶体转动、坩埚转动、加热器纹波等变化都会给热场温度带来一定的低频干扰, 加上传感器本身也携带一定的测量噪声, 导致测量所得的温度信号波动较大^[2]. 因此,

如何在多个低频干扰存在的条件下, 对单晶炉热场温度实现精确测量以达到控制热场温度, 满足晶体生长的要求, 就显得极为重要了.

目前, 热场温度的测量方法主要有红外图像法^[3-4]、声学法^[5]、热电偶及红外传感器点对点等方法, 但由于单晶炉新型热场都装有热屏, 导致红外热像仪的视野和声波传递路径受到阻挡, 红外图像法和声学法不能应用于单晶炉的热场测量中. 而国内外单晶炉厂商为便于热场温度控制, 大多采用红外温度传感器点对点的方法, 对固液界面平面处加热器的温度进行测量, 进而间接得到热场温度, 然后采用均值滤

波、中值滤波、以及一阶滞后滤波等传统方法来滤除热场温度信号中的干扰. 实验证明, 这些滤波方法都不能很好地滤除干扰, 从而无法达到工艺控制的要求^[2]. 文献[2]对单晶炉热场温度信号进行了频谱分析, 提出单晶炉热场温度信号中存在多个低频干扰, 并且温度的有效信号是缓慢变化的. 多频陷波器和自适应噪声抵消法能够有效地消除多个低频噪声. 文献[2, 6]分别提出了基于粒子群优化幅值的自适应对消滤波器和多频陷波器, 以滤除多个低频噪声. 文献[7-8]提出了非归一化的自适应陷波器频率估计方法, 能够同时求出幅值、频率和相位, 但该方法的最优结果受输入信号幅值影响较大, 鲁棒性较差. 文献[9]提出了一种归一化的自适应陷波器频率估计方法, 避免了输入幅值对结果的影响, 但仍存在两个初始参数对结果造成影响的问题. 以上文献所提方法均假设频率个数已知或者频率和频率个数均已知, 但在单晶炉实际工作的过程中, 干扰频率及其个数很难确定, 并且干扰频率会随着某些控制量(如晶转、坩埚转动等)的调整而变化, 不准确的干扰个数及频率的先验信息将导致无法有效地估计热场温度甚至导致估计算法失败.

近年来, 可逆跳转马尔可夫链蒙特卡罗(reversible jump Markov chain Monte Carlo, RJMCMC)方法^[10]的提出为估计自适应陷波器频率个数、频率、幅值和相位提供了新的思路, 文献[11]将RJMCMC方法用于估计多个正弦信号的个数、频率和幅值, 由于RJMCMC需要确定先验分布的参数, 并且准则函数存在的问题^[12], 鲁棒性较差. 文献[13]借鉴RJMCMC方法的跨维搜索机制, 提出了一种跨维模拟退火算法(trans-dimensional simulated annealing, TDSA), 该算法不需要确定先验分布, 并且采用极大似然准则进行寻优. 由于其具有较高的稳定性和收敛性, 现已被广泛应用于逻辑回归^[13]、信号处理^[14-15]和模糊聚类^[16]等领域.

基于以上考虑, 本文提出一种基于TDSA的单晶炉热场温度检测方法. 该方法首先将Akaike信息准则(Akaike information criterion, AIC)即信号个数判断准则纳入采样机制中以便对干扰个数采样估计, 进而利用所设计的基于信号频谱和轮盘赌思想的Metropolis Hastings机制对相应个数的干扰频率进行采样, 然后设计了混合均匀和高斯采样机制对单晶炉热场温度进行采样估计. 最后本文通过仿真和工程实验证明了该方法的有效性, 该方法在干扰个数未知的前提下, 可有效地抑制低频干扰, 并且能够准确地检测单晶炉热场温度.

2 问题描述(Problem description)

在单晶炉的工作过程中, 由于其内部高温、负压的

环境和新型热场中热屏(导流筒)的遮挡, 并不能对整个热场温度进行测量, 而热场温度是由加热器的工作状态决定, 因此, 一般采用侧取光的方法间接获得单晶炉的热场温度, 即利用灵敏度较好的红外传感器通过炉壁开孔获得固液界面平面处加热器的温度, 进而间接获得热场温度, 用于单晶炉的温度控制. 测量原理如图1所示.

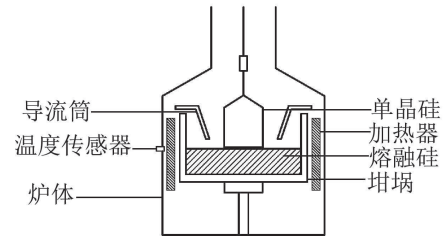


图 1 单晶炉热场温度测量示意图
Fig. 1 Sketch of single crystal furnace heat zone temperature measurement

在直拉单晶硅的过程中, 由于氩气充气、坩埚转动、晶体转动、加热器电源纹波等对单晶炉热场温度信号具有一定的干扰, 红外传感器的输出信号不能直接用于单晶炉的温度控制, 因此, 需要对信号进行处理. 因为单晶炉热场温度变化非常缓慢, 在一段时间内可以看作一个恒定信号, 且坩埚转动、晶体转动、加热器电源纹波都是周期性的干扰, 为此, 文献[2]提出通过一个常量 C 逼近温度信号, 并且利用傅里叶级数逼近低频周期性干扰, 如下式所示:

$$y(n) = c + \sum_{i=1}^k (a_i \cos(\omega_i n \Delta t) + b_i \sin(\omega_i n \Delta t)), \quad (1)$$

式(1)中: c 为温度信号, ω_i 为干扰频率, a_i 和 b_i 为干扰幅值, Δt 为采样周期, k 为低频干扰个数. 由于红外传感器在测量过程中存在一定的测量误差, 根据检测理论及实验证明^[17], 这个测量误差近似看作正态分布, 因此, 本文将式(1)可重写为

$$y(n) = c + \sum_{i=1}^k (a_i \cos(\omega_i n \Delta t) + b_i \sin(\omega_i n \Delta t)) + v(n), \quad (2)$$

式(2)中: $v(n)$ 为服从均值为0, 方差为 σ^2 的正态分布的测量误差. 现假设观察序列长度为 N , 令

$$\mathbf{y}^T = (y(0), y(1), \dots, y(N-1)),$$

$$\mathbf{v}^T = (v(0), v(1), \dots, v(N-1)),$$

$$\mathbf{c}^T = c \times (1, 1, \dots, 1)_{1 \times N},$$

$$\boldsymbol{\alpha}^T = (a_1, b_1, \dots, a_k, b_k),$$

\mathbf{M} 为 $N \times 2k$ 的矩阵, 即

$$M = \begin{bmatrix} \cos(\omega_1 \Delta t) & \sin(\omega_1 \Delta t) & \cdots & \cos(\omega_k \Delta t) & \sin(\omega_k \Delta t) \\ \cos(\omega_1 2\Delta t) & \sin(\omega_1 2\Delta t) & \cdots & \cos(\omega_k 2\Delta t) & \sin(\omega_k 2\Delta t) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \cos(\omega_1 N\Delta t) & \sin(\omega_1 N\Delta t) & \cdots & \cos(\omega_k N\Delta t) & \sin(\omega_k N\Delta t) \end{bmatrix}.$$

由此,式(2)可以写为

$$\mathbf{y} = \mathbf{c} + M\boldsymbol{\alpha} + \mathbf{v}. \quad (3)$$

由于在实际信号中, \mathbf{c} , $\boldsymbol{\alpha}$, k , σ^2 和 $\boldsymbol{\omega}^T = (\omega_1, \dots, \omega_k)$ 均为未知,因此,单晶炉热场温度估计问题即为以上参数的联合估计问题.

3 基于TDSA的单晶炉热场温度检测(TDSA-based heat zone temperature measurement for single crystals furnace)

3.1 跨维模拟退火算法(Trans-dimensional simulated annealing)

跨维模拟退火算法最早由Brooks提出^[13-14],将RJCMC方法的跨维搜索机制引入基本模拟退火方法,用于解决模型和参数不确定性的问题.它的基本思想是,将固体加热到温度足够高,然后让其逐渐冷却,在加热过程中,固体内部分子状态随着温度的提高变为无序,内能增大,而逐渐冷却时,分子渐渐有序,最后在常温时达到基态,内能减为最小^[18].分子状态对应优化解,内能对应目标函数.根据统计力学,在某一温度下,分子状态满足Boltzmann分布 $b_T(\boldsymbol{\theta}) \propto \exp[-f(\boldsymbol{\theta})/T]$, $\boldsymbol{\theta}$ 为分子状态向量, $f(\boldsymbol{\theta})$ 为目标函数即内能, T 为固体温度.以一定概率对分子状态 $\boldsymbol{\theta}$ 进行抽样或者增加、减小状态个数,使得 $b_T(\boldsymbol{\theta})$ 达到最大,此时,分子状态 $\boldsymbol{\theta}$ 即为最优解.

3.2 建模(Modeling)

令

$$\boldsymbol{\omega}^T = (\omega_1, \dots, \omega_k), \boldsymbol{\theta} = (\mathbf{c}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\omega}, \sigma^2, k),$$

根据式(2)得到 $\boldsymbol{\theta}$ 似然函数为

$$p(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta}) = (2\pi\sigma^2)^{-\frac{N}{2}} \times \exp\left(-\frac{(\mathbf{y} - \mathbf{c} - M\boldsymbol{\alpha})^T(\mathbf{y} - \mathbf{c} - M\boldsymbol{\alpha})}{2\sigma^2}\right). \quad (4)$$

根据最大似然和AIC准则可得到 $\boldsymbol{\theta}$ 最优解^[19],由于跨维模拟退火算法用于求目标函数最小值,现将目标函数定义为 $f(\boldsymbol{\theta}) = -\log(p(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})) + k + 1$.因此,在温度 T ,模拟退火算法的Boltzmann分布为

$$b_T(\boldsymbol{\theta}) \propto \exp\left[\frac{\log(p(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})) - k - 1}{T}\right] = p(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})^{\frac{1}{T}} \exp\left(-\frac{k+1}{T}\right),$$

根据逆伽马分布得到 σ^2 的条件分布为

$$\sigma^2 | \mathbf{c}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\alpha} \sim IG\left(\frac{N}{2T} - 1, \frac{-(\mathbf{y} - \mathbf{c} - M\boldsymbol{\alpha})^T(\mathbf{y} - \mathbf{c} - M\boldsymbol{\alpha})}{2T}\right). \quad (5)$$

根据式(4)–(5)和高斯分布得到 $\boldsymbol{\alpha}$ 的条件分布为 $\boldsymbol{\alpha} | \mathbf{c}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\omega}, \sigma^2 \sim N(\boldsymbol{\mu}_0, \boldsymbol{\Sigma}_0)$, $\boldsymbol{\mu}_0 = (\boldsymbol{\Sigma}_0^T M^T(\mathbf{y} - \mathbf{c})) / (T\sigma^2)$, $\boldsymbol{\Sigma}_0^{-1} = (M^T M) / (T\sigma^2)$.

3.3 模型简化(Model simplification)

根据最大似然准则, $\boldsymbol{\alpha}$ 和 σ^2 可通过最小二乘得到^[20]:

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}} = (M^T M)^{-1} M^T(\mathbf{y} - \mathbf{c}), \quad (6)$$

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{N}(\mathbf{y} - \mathbf{c} - M\hat{\boldsymbol{\alpha}})^T(\mathbf{y} - \mathbf{c} - M\hat{\boldsymbol{\alpha}}) = \frac{1}{N}(\mathbf{y} - \mathbf{c})^T P^*(\mathbf{y} - \mathbf{c}). \quad (7)$$

由于在对 $\boldsymbol{\omega}$ 的抽样过程中,不可能出现两个分量相同的情况,因此, $M^T M$ 可逆,则 \mathbf{y} 在 M 的正交投影矩阵 P^* 为

$$P^* = I_N - M(M^T M)^{-1} M^T. \quad (8)$$

显然,一旦 \mathbf{c} 和 $\boldsymbol{\omega}$ 已知, $\boldsymbol{\alpha}$ 和 σ^2 容易获得,为简化TDSA算法中采样数据个数,将式(6)–(7)代入Boltzmann分布,优化目标函数可化简为

$$b_T(\boldsymbol{\theta}) \propto ((\mathbf{y} - \mathbf{c})^T P^*(\mathbf{y} - \mathbf{c}))^{-\frac{N}{2}} \exp\left(-\frac{k+1}{T}\right). \quad (9)$$

3.4 抽样算法设计(Design of sampling algorithm)

1) 对 $\boldsymbol{\omega}$ 抽样.

由于 $\boldsymbol{\omega}$ 是非线性的,因此,本文对 $\boldsymbol{\omega}$ 的每个分量采用混合Metropolis Hastings(MH)抽样.即以 $0 < \lambda < 1$ 概率采用一种建议分布,对 $\boldsymbol{\omega}$ 分量进行全局搜索,以 $1 - \lambda$ 概率采用另一种建议分布,对 $\boldsymbol{\omega}$ 分量进行局部搜索,最后通过接受拒绝准则对所得 $\boldsymbol{\omega}$ 分量进行接受或者拒绝.假设第 i 次循环采样得到 $\boldsymbol{\omega}_i = (\omega_{i,1}, \omega_{i,2}, \dots, \omega_{i,k})$,第 $i+1$ 次循环经过第 $1 \sim j$ 次($j < k$)采样得到的向量为 $\boldsymbol{\omega}_{i+1,j} = (\omega_{i+1,1}, \dots, \omega_{i+1,j}, \omega_{i,j+1}, \dots, \omega_{i,k})$,那么第 $j+1$ 次采样的建议分布为 $p(\omega_{i+1,j+1} | \boldsymbol{\omega}_{i+1,j}, \sigma^2, \boldsymbol{\alpha}, \mathbf{y})$.

对 $\omega_{i+1,j+1}$ 的两种建议分布分别为:1)为提高算法搜索全局最优的速度,本文根据样本点的频谱和轮盘赌思想产生建议分布,即首先对样本点进行点

数为 $2N$ 的快速傅里叶变换(fast Fourier transform, FFT),然后取幅值,记为 $\mathbf{Y} = \text{abs}(\text{FFT}(\mathbf{y}), 2N)$,由于FFT得到的为对称谱,因此取前 N 点的幅值求和,计算每个频率所占轮盘的区域比例 $P(i) = Y(i) / \sum_{i=1}^N Y(i)$,然后通过旋转轮盘(即产生0-1之间的随机数,根据随机数落入的区域)选取相应的 $\omega_{i+1,j+1}$.

2) 由于FFT选取的观察序列长度有限,并且受噪声影响,频率的采样精度会被降低,只能获得粗略的采样值.为了提高算法的采样精度,第2种建议分布采用高斯分布 $p(\omega_{i+1,j+1} | \omega_{i+1,j}) \sim N(\omega_{i,j+1}, \sigma_{\text{RW}}^2)$, σ_{RW}^2 为预先设定的方差.

2) 对 c 抽样.

本文对 c 采样仍采用MH抽样方法,设第 i 次采样为 c_i ,满足 $0 < \lambda < 1$ 概率时,为了提高算法的全局搜索能力,第 $i+1$ 次采样采用均匀分布 $c_{i+1} \sim U(c_{\min}, c_{\max})$ 作为建议分布, c_{\min} 和 c_{\max} 分别为先验知识中 c 的最小值和最大值,满足 $1 - \lambda$ 概率时,为提高算法的局部搜索精度,采用高斯分布 $p(c_{i+1} | c_i) \sim N(c_i, \sigma_{\text{RW}}^2)$ 作为建议分布.最后根据接受拒绝准则对 c_{i+1} 进行接受或者拒绝.

3) 对 k 抽样.

TDSA对 k 的抽样算法借鉴了RJCMCMC的跨维搜索模式,引入了阶数增加(birth)、阶数降低(death)的机制,阶数增加即从对 ω 抽样的第1种建议分布中抽一个频率,放在 ω 向量的最后,并且记作 $\omega_{i+1} = (\omega_{i,1}, \dots, \omega_{i,k}, \omega_{i,k+1})$,根据接受拒绝准则进行判断,然后根据2)对 c 抽样,最后根据式(6)–(8)计算 α 和 σ^2 .阶数降低即从 $\omega_i = (\omega_{i,1}, \dots, \omega_{i,k})$ 中随机去掉一个分量,根据接受拒绝准则进行判断,然后根据2)对 c 抽样,最后根据式(6)–(8)计算 α 和 σ^2 .

4) 接受拒绝准则.

TDSA以一定概率选择阶数增加(Birth)、阶数降低(death)和参数更新(update),通过1)–3)对 ω , c 和 k 进行抽样,然后根据接受拒绝准则进行判断.根据模拟退火算法和第3.3节可得阶数增加、阶数降低和参数 ω 更新的接受拒绝准则为

$$A_{\text{birth}} = \min\left[1, \left(\frac{(\mathbf{y} - \mathbf{c})^T \mathbf{P}_i^* (\mathbf{y} - \mathbf{c})}{(\mathbf{y} - \mathbf{c})^T \mathbf{P}_{i+1}^* (\mathbf{y} - \mathbf{c})}\right)^{\frac{N}{2}} \exp\left(\frac{-1}{T_{i+1}}\right)\right], \quad (10)$$

$$A_{\text{death}} = \min\left[1, \left(\frac{(\mathbf{y} - \mathbf{c})^T \mathbf{P}_i^* (\mathbf{y} - \mathbf{c})}{(\mathbf{y} - \mathbf{c})^T \mathbf{P}_{i+1}^* (\mathbf{y} - \mathbf{c})}\right)^{\frac{N}{2}} \exp\left(\frac{1}{T_{i+1}}\right)\right], \quad (11)$$

$$A_{\text{update}} = \min\left[1, \left(\frac{(\mathbf{y} - \mathbf{c})^T \mathbf{P}_i^* (\mathbf{y} - \mathbf{c})}{(\mathbf{y} - \mathbf{c})^T \mathbf{P}_{i+1}^* (\mathbf{y} - \mathbf{c})}\right)^{\frac{N}{2}}\right]. \quad (12)$$

参数 c 更新的接受拒绝准则为

$$A_{\text{update},c} = \min\left[1, \left(\frac{(\mathbf{y} - \mathbf{c}_i)^T \mathbf{P}_i^* (\mathbf{y} - \mathbf{c}_i)}{(\mathbf{y} - \mathbf{c}_{i+1})^T \mathbf{P}_{i+1}^* (\mathbf{y} - \mathbf{c}_{i+1})}\right)^{\frac{N}{2}}\right]. \quad (13)$$

3.5 跨维模拟退火算法步骤(Steps of TDSA)

基于TDSA的单晶炉热场温度信号检测算法如下:

1) 设置初始参数:观察序列长度 N , k 的初始值、最大值 k_{\max} 和最小值 k_{\min} ,最大迭代次数 L ,初始温度 T_0 和终止温度 T_f , c 的最大值 c_{\max} 和最小值 c_{\min} ,随机移动抽样方差 σ_{RW}^2 ,阶数增加概率 P_{birth} ,阶数降低概率 P_{death} .

2) 产生一个 $[0,1]$ 之间的随机数 r ,若 $r < P_{\text{birth}}$,则执行步骤3),若 $P_{\text{birth}} < r < P_{\text{birth}} + P_{\text{death}}$,则执行步骤4),若 $r > P_{\text{birth}} + P_{\text{death}}$,则执行步骤5).

3) 根据第3.4节中3)执行阶数增加操作,然后根据式(10)计算 A_{birth} ,并且产生一个 $[0,1]$ 之间的随机数,如果随机数小于 A_{birth} ,接受Birth操作,产生一个新的干扰分量,否则,拒绝.然后转到步骤6).

4) 根据第3.4节中3)执行阶数降低操作,然后根据式(11)计算 A_{death} ,并且产生一个 $[0,1]$ 之间的随机数,如果随机数小于 A_{death} ,接受death操作,随机去掉一个干扰分量,否则,拒绝.然后转到步骤6).

5) 根据第3.4节中1)对 ω 进行抽样,然后根据式(12)计算 A_{update} ,并且产生一个 $[0,1]$ 之间的随机数,如果随机数小于 A_{update} ,接受对 ω 的抽样,否则,拒绝.然后转到步骤6).

6) 根据第3.4节中2)对 c 进行抽样,然后根据式(13)计算 $A_{\text{update},c}$,并且产生一个 $[0,1]$ 之间的随机数,如果随机数小于 $A_{\text{update},c}$,接受对 c 的抽样,否则,拒绝.最后根据式(6)–(8)计算 α 和 σ_2 .

7) 在温度 T_i 时判断参数是否达到平衡状态,即多次迭代中正弦个数 k 保持不变,如果未平衡,转到步骤2),否则转到步骤8).

8) 判断温度 T_i 是否达到终止温度 T_f ,如果达到,算法结束,否则转到步骤9).

9) 根据式(14)计算新的温度 T_{i+1} ,转到步骤2).

$$T_{i+1} = T_0 + \frac{T_f - T_0}{L} \times i. \quad (14)$$

4 实验结果及分析(Experimental results and analysis)

为验证所提方法的有效性,本文进行了两个对比实验:第1个实验通过仿真数据进行,并且和RJCMCMC方法进行对比;第2个实验为单晶炉热场

温度检测工程实验, 并且和目前单晶炉中所用的均值滤波和文献[2]方法进行对比.

4.1 仿真实验(Simulation)

本实验根据式(2)构造600个仿真数据点, 设置仿真参数如下:

$$\begin{aligned} k &= 3, c = 1000, \omega_1 = 1.8850, \omega_2 = 1.9831, \\ \omega_3 &= 2.1795, a_1 = 2.2361, b_1 = -2.2361, \\ a_2 &= 1.2574, b_2 = -2.1779, \\ a_3 &= 2.5583, b_3 = -1.8587, \end{aligned}$$

定义信号信噪比: $\mu = 10 \log((a_1^2 + b_1^2)/(2\sigma^2)) = 5$, 则高斯白噪声方差 $\sigma^2 = 1.5811$.

设置本文算法的参数初值如下: 观察序列长度 $N = 64$, k 的初值为16, $k_{\max} = 31$, $k_{\min} = 1$, $c_{\max} = 1050$, $c_{\min} = 950$, 最大迭代次数 $L = 3000$, 初始温度 $T_0 = 1$, 终止温度 $T_f = 0.1$, 随机移动抽样方差 $\sigma_{RW}^2 = (1/250)^2$, MMH抽样 $\lambda = 0.2$, 阶数增加概率 $P_{\text{birth}} = 0.2$, 阶数降低概率 $P_{\text{death}} = 0.2$. 设置 RJMCMC 算法参数如下: $\alpha_{\delta^2} = 2$, $\beta_{\delta^2} = 10$, $\varepsilon_1 = 0.0001$, $\varepsilon_2 = 0.0001$, $\nu_0 = 0.1$, $\gamma_0 = 0.1$, $c^* = 0.5$, 其余参数均与本文算法相同. 实验方式采用对600个数据点连续滑动估计, 独立重复200次.

图2为随机抽取一次实验的某个观察序列中本文方法与RJMCMC的 k 值随迭代次数变化的曲线, 图3为该次观察序列中本文方法与RJMCMC对 k 估计次数的直方图. 由图2-3知, 本文方法与RJMCMC均能在较低信噪比的情况下正确地估计正弦干扰个数, 但本文方法的收敛速度优于RJMCMC, 本文方法在260次就已经收敛, 而RJMCMC则在400次以后才收敛. 在200次重复实验中, 本文方法在迭代200~300次以后就已经收敛, 而RJMCMC在迭代350~800次以后才会收敛. 由此可得, 本文方法的收敛性能优于RJMCMC.

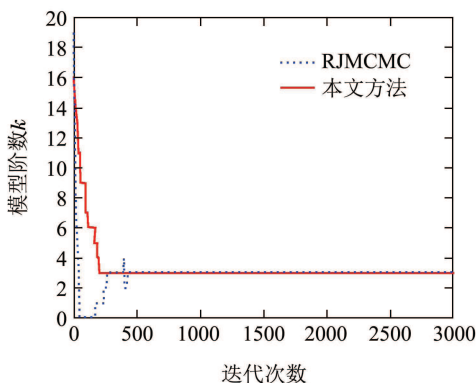


图2 实验1中 k 估计的迭代曲线

Fig. 2 Iterative curves of k in Experiment 1

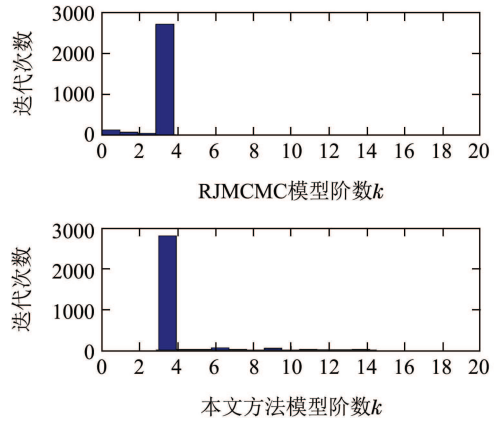


图3 实验1中 k 估计的直方图

Fig. 3 Histograms of k estimation in Experiment 1

图4为本文方法与RJMCMC在该次观察序列中对频率估计的迭代曲线. 由图4得, 两种方法在迭代初期受 k 未收敛的影响较大, 后期基本稳定在真实频率附近. 图5为该次观察序列中的本文方法与RJMCMC对常量 c 的估计曲线, 根据图5可得, 本文方法在初期受 k 的影响波动较大, 但在迭代400次以后能够精确地估计出常量 c , 并且后期波动相对 RJMCMC 较小.

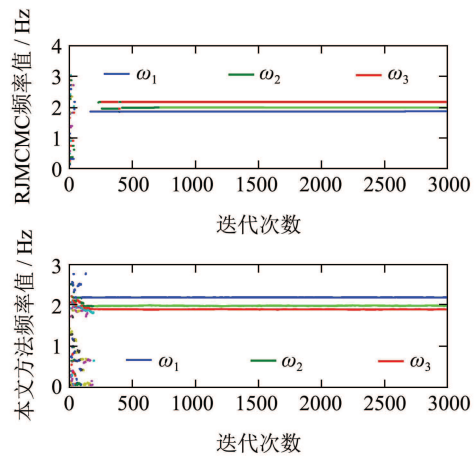


图4 实验1中频率估计迭代曲线

Fig. 4 Iterative curves of frequency estimation in Experiment 1

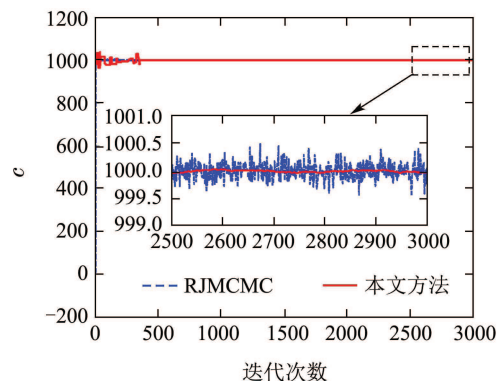


图5 实验1中常量 c 迭代曲线

Fig. 5 Iterative curves of constant c in Experiment 1

图6为该次实验中本文方法和RJMC MC对600个数据点进行连续滑动估计的结果. 根据图6结果可得, 在干扰个数和频率未知的情况下, 本文方法能准确地连续估计常量 c , 波动较小, 而RJMC MC毛刺较多.

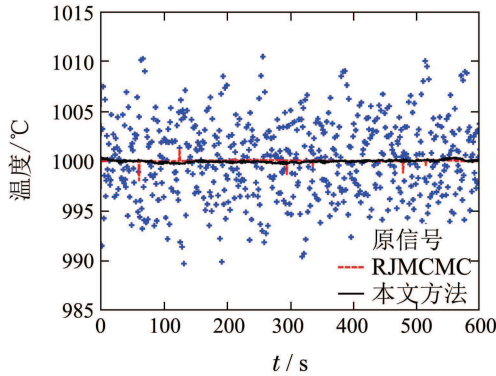


图 6 实验1中各种算法提取信号的结果

Fig. 6 Signal acquisition results using different algorithms in Experiment 1

为更清晰地对比本文方法与RJMC MC的估计精度, 现定义200次独立重复滑动估计实验的均方误差(mean-square error, MSE)如下:

$$MSE(\psi) = \frac{1}{200} \frac{1}{600} \sum_{i=1}^{200} \sum_{j=1}^{600} (\hat{\psi}_{i,j} - \psi)^2,$$

式中: i 为重复实验次数, j 为滑动序列号, ψ 分别取 c, ω_1, ω_2 和 ω_3 , 表1为两种方法200次独立重复滑动估计结果的MSE. 由图6和表1可得, 本文方法对频率和常量的估计精度均高于RJMC MC. 根据仿真实验结果可得, 本文方法的估计精度和收敛性能较RJMC MC具有一定优势.

表 1 实验1中各种方法估计结果的均方误差

Table 1 MSE of estimation results using different methods in Experiment 1

参数	本文方法	RJMC MC
c	7.1461E - 04	2.3801E - 02
ω_1	1.6445E - 05	2.3180E - 03
ω_2	2.6060E - 05	1.7470E - 03
ω_3	2.0159E - 06	5.5889E - 05

4.2 单晶炉热场温度检测工程验证实验(Practical engineering verification)

1) 实验准备.

本次实验应用于TDR-150型单晶炉热场温度红外传感器测量数据中, 测量原理如图1所示. TDR-150型单晶炉为极大规模集成电路所用单晶硅的全自动生长设备, 投料量为170 kg, 控制直径为12英

寸(300 mm), 等径长度为650 mm, TDR-150型单晶炉及温度传感器如图7所示. 根据单晶炉热场温度的先验信息已知温度范围为[1350, 1450], 本文方法参数初值 $c_{max} = 1450, c_{min} = 1350$, 其余参数设置与实验1相同.

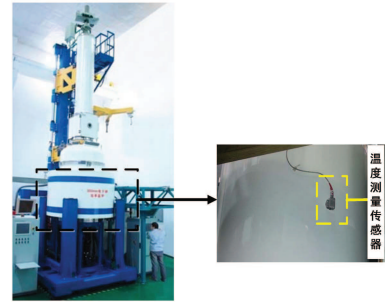


图 7 TDR-150型单晶炉及温度传感器实物图

Fig. 7 TDR-150 single crystal furnace and temperature sensor

2) 实验结果及分析.

图8为随机抽取某次观察序列中本文方法对 k 随迭代次数变化的估计曲线, 由图8可明显看出, k 在350次以后就收敛了, 图9为该次观察序列中本文方法对 k 估计次数的直方图, 结合图8和图9可得, 本文所提方法在未知干扰个数和频率的情况下能够估计单晶炉热场温度信号中包含低频干扰的个数.

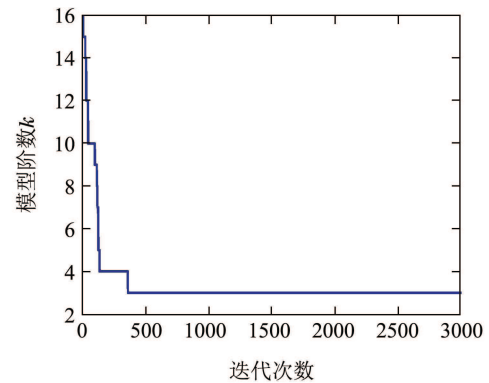


图 8 实验2中 k 的迭代曲线

Fig. 8 Iterative curve of k in Experiment 2

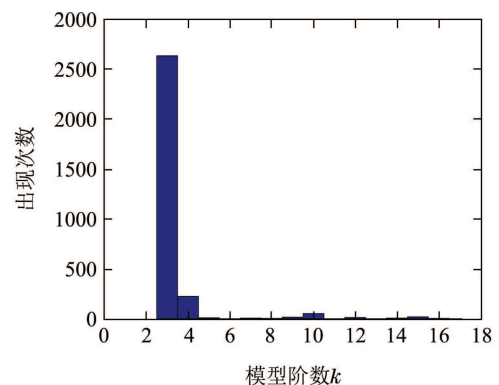


图 9 实验2中 k 估计的直方图

Fig. 9 Histogram of estimation with k in Experiment 2

图10为该次观察序列中3000次迭代的频率估计曲线,由图10可得,算法在开始时频率较多,在迭代350次以后逐渐稳定到3个频率(0.1458, 0.8222和2.3474)。图11为该次观察序列中本文方法对常量 c 的估计曲线,根据图11得,在迭代650次以后,常量 c 基本稳定在1401。

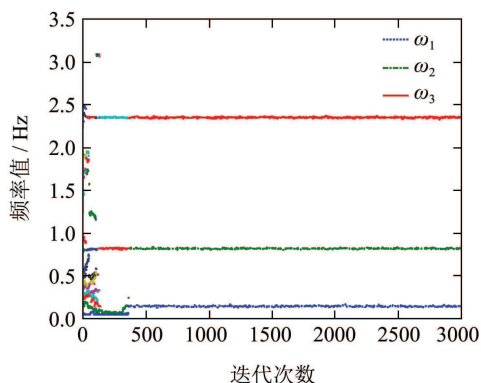


图 10 实验2中频率估计迭代曲线

Fig. 10 Iterative curves of frequency estimation in Experiment 2

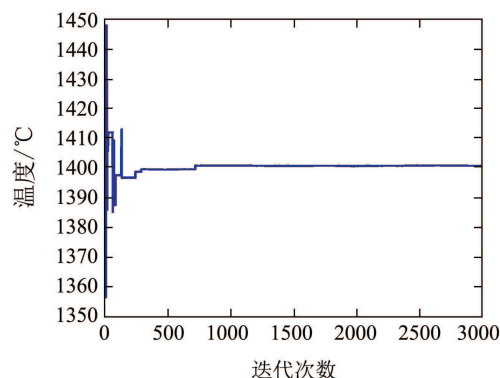


图 11 实验2中常量 c 迭代曲线

Fig. 11 Iterative curve of constant c in Experiment 2

图12为本文所提方法、文献[2]方法和均值滤波对250个数据点进行连续滑动估计的结果。

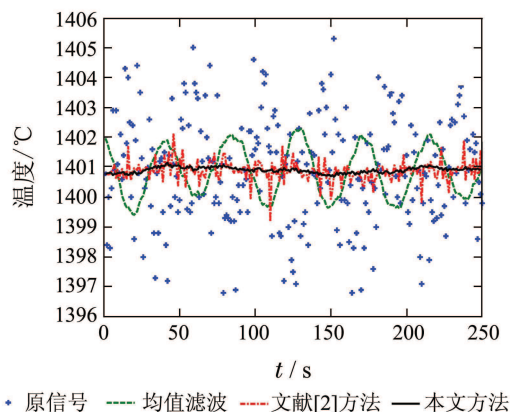


图 12 实验2中不同算法提取信号的结果

Fig. 12 Signal acquisition results using different algorithms in Experiment 2

由图12结果可得,在未知干扰个数和频率的情况下,本文方法能够准确地估计单晶炉热场温度信号 c ,估计结果在 $\pm 0.5^\circ\text{C}$ 范围内波动,效果明显优于均值滤波,并且略优于文献[2]方法(在通过傅里叶变换获得干扰个数和频率的前提下,滤波结果在 $\pm 1^\circ\text{C}$ 范围内波动),满足TDR-150型单晶炉的温度控制工艺需求。

5 结论(Conclusion)

针对单晶炉热场温度测量信号中存在多个低频干扰的问题,本文提出一种基于TDSA的单晶炉热场温度检测方法。该方法将AIC信息准则引入以判断干扰频率的个数,然后将信号频谱和轮盘赌思想运用到Metropolis Hastings采样机制中,提高了对干扰频率的搜索效率,最后利用基于均匀和高斯的Metropolis Hastings采样机制对温度进行采样估计。仿真和工程实验证明该方法充分利用了跨维模拟退火算法的优势,在单晶炉热场温度测量信号中干扰个数和频率不确定的情况下能够有效地抑制低频干扰,对单晶炉热场温度检测具有重要意义,并为今后解决参数个数不确定的优化问题提供了新的思路。

参考文献(References):

- [1] FANG H S, JIN Z L, HUANG X M. Study and optimization of gas flow and temperature distribution in a Czochralski configuration [J]. *Journal of Crystal Growth*, 2012, 361: 114 – 120.
- [2] 梁炎明, 刘丁, 赵跃. 基于自适应噪声抵消的CZ单晶炉炉膛温度信号处理 [J]. *控制理论与应用*, 2011, 28(1): 94 – 100. (LIANG Yanming, LIU Ding, ZHAO Yue. Temperature signal processing based on adaptive noise cancellation for CZ crystal growing furnace [J]. *Control Theory & Applications*, 2011, 28(1): 94 – 100.)
- [3] USAMENTIAGA R, GARCIA D F, MOLLEDA J, et al. Temperature measurement using the wedge method: Comparison and application to emissivity estimation and compensation [J]. *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, 2011, 60(5): 1768 – 1778.
- [4] 安剑奇, 吴敏, 何勇, 等. 基于分层递归融合算法的高炉料面煤气流分布软测量方法 [J]. *自动化学报*, 2011, 37(4): 496 – 502. (AN Jianqi, WU Min, HE Yong, et al. Soft-sensing method of gas flow distribution of blast furnace burden surface based on multi-level Hierarchical fusion algorithm [J]. *Acta Automatica Sinica*, 2011, 37(4): 496 – 502.)
- [5] 阚哲, 邵富群, 李成志, 等. 基于广义互功率谱的温度检测方法 [J]. *仪器仪表学报*, 2012, 33(6): 1344 – 1350. (KAN Zhe, SHAO Fuqun, LI Chengzhi, et al. Temperature monitoring method based on generalized cross power spectrum algorithm [J]. *Chinese Journal of Scientific Instrument*, 2012, 33(6): 1344 – 1350.)
- [6] 王秋生, 杨浩, 袁海文. 基于粒子群优化的数字多频陷波滤波器设计 [J]. *仪器仪表学报*, 2012, 33(7): 1661 – 1667. (WANG Qiusheng, YANG Hao, YUAN Haiwen. Digital multiple notch filter design based on particle swarm optimization [J]. *Chinese Journal of Scientific Instrument*, 2012, 33(7): 1661 – 1667.)
- [7] KARIMI-GHARTEMANI M, ZIARANI A K. Performance characterization of a non-linear system as both an adaptive notch filter and a phase-locked loop [J]. *International Journal of Adaptive Control and Signal Processing*, 2004, 18(1): 23 – 53.

- [8] MCNAMARA D M, ZIARANI A K, ORTMEYER T H. A new technique of measurement of nonstationary harmonics [J]. *IEEE Transactions on Power Delivery*, 2007, 22(1): 387 – 395.
- [9] 储昭碧, 张崇巍, 冯小英. 基于自适应陷波滤波器的频率和幅值估计 [J]. *自动化学报*, 2010, 36(1): 60 – 66.
(CHU Zhaobi, ZHANG Chongwei, FENG Xiaoying. Adaptive notch filter-based frequency and amplitude estimation [J]. *Acta Automatica Sinica*, 2010, 36(1): 60 – 66.)
- [10] ASKARI G, XU A, LI Y, et al. Automatic determination of number of Homogenous regions in SAR images utilizing splitting and merging based on a reversible jump MCMC algorithm [J]. *Journal of the Indian Society of Remote Sensing*, 2013, 41(3): 509 – 521.
- [11] ANDRIEU C, DOUCET A. Joint Bayesian model selection and estimation of noisy sinusoids via reversible jump MCMC [J]. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 1999, 47(10): 2667 – 2676.
- [12] ALIREZA R, JULIEN B, GILLES F. Comments on ‘Joint Bayesian Model Selection and Estimation of Noisy Sinusoids Via Reversible Jump MCMC’ [J]. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 2013, 61(14): 3653 – 3655.
- [13] BROOKS S P, FRIEL N, KING R. Classical model selection via simulated annealing [J]. *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)*, 2003, 65(2): 503 – 520.
- [14] 梁军利, 杨树元, 高丽. 一种新颖的基于TDSA的多个正弦信号参数估计方法 [J]. *电子与信息学报*, 2007, 29(1): 96 – 100.
(LIANG Junli, YANG Shuyuan, GAO Li. A novel parameter estimation method for sinusoid signals based on TDSA [J]. *Journal of Electronics & Information Technology*, 2007, 29(1): 96 – 100.)
- [15] LIANG J, LIU D. Joint estimation of source number and DOA using simulated annealing algorithm [J]. *Digital Signal Processing*, 2010, 20(3): 887 – 899.
- [16] BANDYOPADHYAY S. Simulated annealing using a reversible jump Markov chain Monte Carlo algorithm for fuzzy clustering [J]. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 2005, 17(4): 479 – 490.
- [17] 周杏鹏. 传感器与检测技术 [M]. 北京: 清华大学出版社, 2010: 24 – 30.
(ZHOU Xingpeng. *Sensors and Detection Technology* [M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2010: 24 – 30.)
- [18] HASANÖH. Subset selection in multiple linear regression models: A hybrid of genetic and simulated annealing algorithms [J]. *Applied Mathematics and Computation*, 2013, 219(23): 11018 – 11028.
- [19] STYLIANOU C, PICKLES A, ROBERTS S A. Using Bonferroni, BIC and AIC to assess evidence for alternative biological pathways: covariate selection for the multilevel Embryo-Uterus model [J]. *BMC Medical Research Methodology*, 2013, 13(1): 73 – 73.
- [20] 西蒙·赫金. 自适应滤波器原理 [M]. 第4版. 郑宝玉, 等, 译. 北京: 电子工业出版社, 2010: 303 – 339.
(SIMON H. *Adaptive Filter Theory* [M]. 4th Edition. ZHENG Baoyu, et al. Translated. Beijing: Publishing House of Electronics Industry, 2010: 303 – 339.)

作者简介:

张新雨 (1985–), 男, 博士研究生, 研究方向为检测技术与自适应滤波, E-mail: xhyzzxy@126.com;

刘丁 (1957–), 男, 教授, 博士生导师, 目前研究方向为复杂系统的建模与控制、智能机器人控制、智能控制理论与方法、数字信号处理等, 发表论文200余篇, 获国家及省部级科技进步奖5项, E-mail: liud@xaut.edu.cn;

汪姣 (1988–), 女, 硕士研究生, 研究方向为检测技术与自动化装置, E-mail: wj5850328@163.com;

李琦 (1957–), 男, 教授, 目前研究方向为新型传感器技术, E-mail: liqi@xaut.edu.cn.