

DOI: 10.19650/j.cnki.cjsi.J2514618

基于 HC-NPE-FDCVA 的直拉硅单晶 生长过程状态监测方法*

黄伟超, 杨可欣, 刘 丁

(西安理工大学自动化与信息工程学院 西安 710048)

摘 要:直拉硅单晶生长过程具有强耦合、动态和非线性特征。生产过程中微弱数据异常与参数波动不易识别,但可能逐步累积并影响晶体直径稳定性与品质。针对这一问题,提出一种融合特征增强与判别优化机制的过程监测方法—混合余弦-邻域保持嵌入-Fisher 判别准则的典型变量分析方法(HC-NPE-FDCVA)。该方法采用“特征提取—动态建模—状态判别”的递进式建模思路。首先,针对硅单晶生长过程高维、非线性及多模态数据特征,引入混合余弦-邻域保持嵌入(HC-NPE)算法,通过融合余弦距离与欧氏邻域结构信息,对原始过程变量进行非线性特征提取与降维表示,在保持局部流形结构的同时增强对微弱异常模式的表达能力。随后,在降维特征空间中引入基于 Fisher 判别准则的典型变量分析方法(FDCVA),通过构建具有判别能力的动态状态子空间,实现对正常运行状态与异常状态差异信息的有效分离,从而强化异常相关特征在状态空间中的可辨识性。在此基础上建立在线过程监测模型,并利用 T^2 统计量与 Q 统计量构建监测指标,实现对硅单晶生长过程运行状态的实时评估与异常识别。实验结果表明,所提出方法在保持较高异常检测灵敏度的同时有效降低了误报率,能够在复杂非线性工业过程中更有效地表征异常演化特征,为直拉硅单晶生产过程的稳定运行与质量控制提供了一种可行的过程监测技术路径。

关键词:直拉硅单晶生长过程;典型变量分析;Fisher 判别优化;余弦相似度

中图分类号: TH165 TP273 **文献标识码:** A **国家标准学科分类代码:** 510.40

State monitoring of the Czochralski silicon single-crystal growth process based on HC-NPE-FDCVA

Huang Weichao, Yang Kexin, Liu Ding

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

Abstract: The Czochralski silicon single-crystal growth process exhibits strong coupling, dynamic behavior, and pronounced nonlinearity. In production, weak anomalies and slight process parameter fluctuations are often difficult to detect in time, yet they may gradually accumulate and affect the stability of crystal diameter and product quality. To address this issue, a process monitoring method integrating feature enhancement and discriminant optimization, termed hybrid cosine-neighborhood preserving embedding with Fisher discriminant canonical variate analysis (HC-NPE-FDCVA), is proposed. The method follows a progressive modeling framework consisting of feature extraction, dynamic modeling, and state discrimination. First, considering the high-dimensional, nonlinear, and multimodal characteristics of the process data, the hybrid cosine-neighborhood preserving embedding(HC-NPE) algorithm is introduced for nonlinear feature extraction and dimensionality reduction. By combining cosine distance with Euclidean neighborhood structure information, the algorithm preserves the local manifold structure of the original data while enhancing the representation of weak abnormal patterns. Subsequently, Fisher discriminant canonical variate analysis(FDCVA) is applied in the reduced feature space. By constructing a discriminative dynamic state subspace based on the Fisher criterion, differences between normal operating states and abnormal conditions are effectively separated, thereby improving the distinguishability of anomaly-related features in the state space. On this basis, an online process monitoring model is established. Monitoring indices are constructed using the T^2 and Q statistics, enabling real-time evaluation and anomaly identification for the silicon single-crystal growth process. Experimental results demonstrate that the proposed

收稿日期:2025-10-24 Received Date: 2025-10-24

* 基金项目:国家自然科学基金重大项目(62127809)资助

method maintains high anomaly detection sensitivity while effectively reducing the false alarm rate. It can more effectively characterize the evolution of abnormal behaviors in complex nonlinear industrial processes, providing a feasible monitoring approach for the stable operation and quality control of Czochralski silicon single-crystal growth processes.

Keywords: czochralski silicon single-crystal growth process; canonical variate analysis; Fisher discriminant analysis; cosine similarity

0 引言

伴随我国半导体产业自主可控战略的深化,硅单晶作为不可或缺的战略基础材料,直接关乎能源安全与科技自主的命脉。实现硅单晶高品质全自动生长的瓶颈在于单晶炉生产过程的“监测盲区”^[1]。当前直拉法设备对微弱故障与工艺参数波动的实时感知与诊断能力不足,致使初期异常无法被有效隔离,其影响会沿工艺链传递并放大,最终表现为晶体品质的波动。该监测缺失更使得潜在故障得以长期演化,进而升级为导致非计划停机、甚至安全事故的系统性风险。因此,攻克面向直拉硅单晶生长过程的多变量监测方法,旨在破解当前生产的“监测盲区”这一核心瓶颈,对实现制造过程的质效提升与智能赋能具有重大意义。

现有过程监测方法的验证大多在实验室环境下完成,其依赖的仿真条件与简化模型,难以应对真实工业场景中的复杂动态干扰,这构成了其走向工程应用的核心挑战。多元统计过程监测(multivariate statistical process monitoring, MSPM)是此领域主流研究与工程应用范式之一。以主成分分析(principal component analysis, PCA)、偏最小二乘(partial least squares, PLS)及典型变量分析(canonical variate analysis, CVA)为代表的经典线性方法虽奠定了过程监测的基础,却在处理非线性耦合、多模态扰动及微弱异常时表现出固有局限性。部分研究人员在传统方法的基础上围绕监控统计量的构造与优化展开研究。例如,文献[2]针对动态监测中残差序列相关性不足而导致监测灵敏度较差的问题,提出了白成分分析(whitened component analysis, WCA)方法,通过最小化潜在变量的白度指标来增强异常敏感性;文献[3]针对高维小样本场景下参数估计波动及易受异常值干扰问题,通过基于协方差矩阵对角元素构建新型统计量,融合自启动控制图与稳健估计技术,有效增强了对均值向量偏移的监测稳定性与可靠性。这些方法多以线性或弱相关性为前提,在处理强耦合、多模态及非平稳扰动问题时,实则面临严峻挑战,适用性有限。

另一类改进的方向聚焦复杂工业数据特性,通过引入工业数据特性的处理方法,提升模型在复杂工况下的适应能力。文献[4]针对数据非高斯性强且寻优易陷局部最优的复杂特性,提出改进独立成分分析与粒子群优化结合的非线性分离方法,增强复杂背景下的源信号精

确提取能力;文献[5]针对数据具有非线性特征的问题,提出基于主成分分析与非线性映射的特征提取方法。通过数据驱动的PCA矩阵去相关,并利用非线性函数强化目标特征权重,提升模型在复杂强噪工况下的鲁棒性;文献[6]提出输入输出-核潜在结构投影模型(input-output kernel projection to latent structure, IO-KPLS),将原始变量映射至高维空间构建非线性目标函数以提取潜变量;文献[7]提出深度概率主成分分析(deep probabilistic principal component analysis, DPPCA),融合变分自编码器对潜在空间概率建模,提升非高斯高维数据的异常监测性能。但这些方法多未充分将时序相关性与动态特征系统化纳入建模,导致动态异常识别与长期稳定性不足。

为了应对工业过程固有的时序依赖性,相关研究的一种核心改进策略侧重动态扩展方法的研发,以期精准表征过程动态特性。文献[8]针对数据时序相关性,引入时间滞后构建增广矩阵,提出一种动态独立成分分析(deep dynamic independent component analysis, DDICA)方法,在表征动态演变特性的同时实现微弱故障有效提取;文献[9]为监测工业过程固有的动态与非平稳特性,从概率视角提出基于柯西-施瓦茨(Cauchy-Schwarz, CS)散度的早期故障检测与隔离方案,无需先验分布假设即可实现精准针对时许依赖性的在线过程监测;文献[10]通过整合多元累积和控制图,构建了一种改进的PCA方法,用于监控动态生产系统;文献[11]则进一步将DPCA与带自适应权重参数的独立成分分析(independent component analysis, ICA)相结合,基于K-S(Kolmogorov-Smirnov)距离构建平方预测误差监测统计量,实现了对非高斯动态异常的有效监测;文献[12]开发了公共正则变量分析(common canonical variate analysis, CCVA),它使用最小化联合对角判据来划分模式-公共动态子空间。然而,当前大多数动态改进模型仍主要停留在仿真实验验证阶段,其在实际工业场景中的适用性与鲁棒性尚待进一步验证。

直拉硅单晶生长过程具有的非线性、强耦合与时变等动态特性,使其对监测方法的灵敏度与鲁棒性提出了极高要求。然而,现有监测方法多面向通用场景,缺乏应对此类复合性挑战的针对性设计,因而难以直接迁移应用。基于此,本文提出了一种融合特征增强与判别优化的新型过程监测方法—混合余弦-邻域保持嵌入-Fisher判别准则的CVA(hybrid cosine-neighborhood preserving

embedding with Fisher discriminant CVA, HC-NPE-FDCVA),用于直拉硅单晶生长过程的实时状态监测。本文的创新性工作主要体现在:

- 1) 针对直拉硅单晶过程变量众多、特征分布复杂且局部结构易受损的问题,在传统邻域保持嵌入中引入余弦相似度机制,增强对数据局部邻域特征与全局拓扑结构的保持能力,从而提升低维嵌入的特征提取稳定性与结构保真度;
- 2) 在状态空间重构阶段引入 FDCVA 动态监测模型,解决硅单晶生长过程中监控统计量判别性不足、控制限精准性欠缺的问题,提升监测过程的判别性能与统计可靠性;
- 3) 在判别优化状态空间中提取能够有效表征过程主动态行为的典型变量,从而克服直拉硅单晶过程动态

演化显著、时序依赖强带来的建模难点;基于实际生产数据的系统验证表明,该方法在复杂动态工况下具备更高的异常监测准确率与鲁棒性。

1 基于 HC-NPE-FDCVA 的状态监测方法

本文提出的一种基于 HC-NPE-FDCVA 的监测方法在传统离线建模与在线监测两阶段框架基础上,融合动态特征增强与判别优化策略,以提升状态识别与故障检测的准确性与鲁棒性。整体流程如图 1 所示。首先,在离线阶段对历史数据进行结构化预处理、动态特征构建与判别特征提取,建立过程监测模型;随后,在线阶段利用该模型实时计算监控统计量,实现对过程状态的快速识别与微小异常监测。

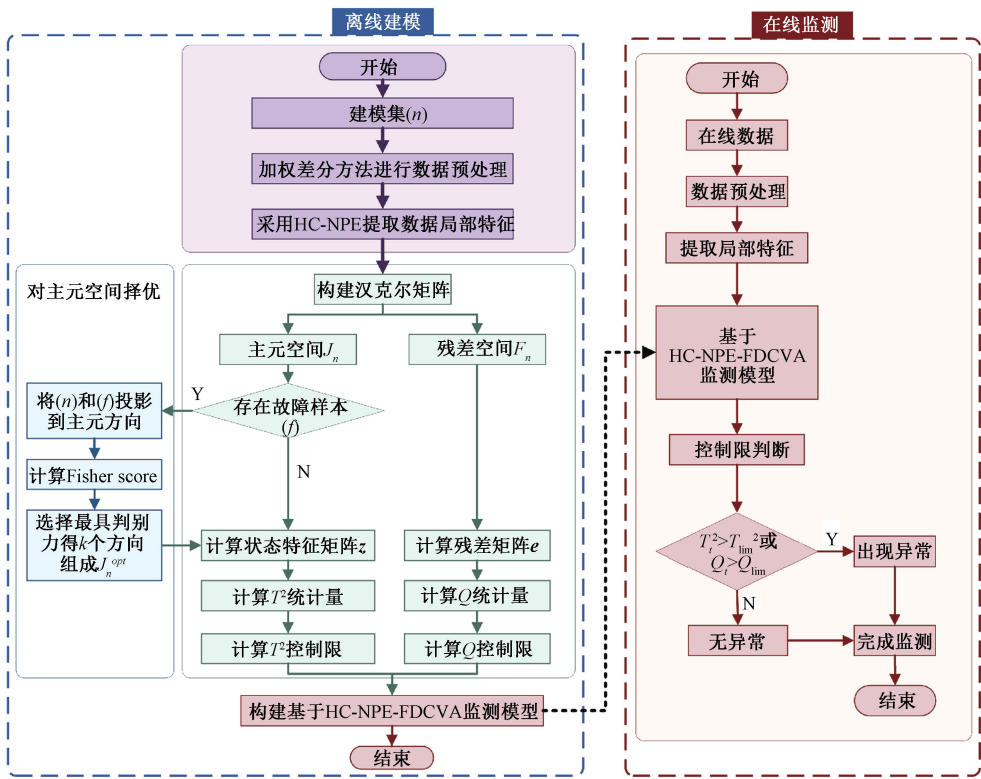


图 1 HC-NPE-FDCVA 算法

Fig. 1 Flowchart of the HC-NPE-FDCVA algorithm

具体来说,在离线建模阶段首先采用加权差分算法 (weighted difference, WD) 对原始多模态过程数据进行预处理^[13],以抑制模态混叠;进而引入 HC-NPE 构建具有结构保持能力的低维嵌入空间^[14]。将嵌入特征构建为汉克尔矩阵并分解至主元空间与残差空间^[15],分别计算状态特征矩阵和残差特征矩阵。在主元空间内进行 Fisher 判别分析^[16],依据类间与类内离散度之比筛选判别性最强的投影方向,构建融合能量约束的判别优化子空间,最终建立

基于 HC-NPE-FDCVA 的监测模型及其控制限。

在线监测阶段,新样本经过相同的预处理与特征提取后投影到上述判别子空间中,实时计算 T^2 统计量和 Q 统计量。通过比较统计量与控制限实现状态判断:任一统计量超限即触发报警,否则判定系统运行正常。

1.1 基于 HC-NPE 提取数据特征

鉴于工业过程的复杂性,数据集常呈现非线性与多模态特性,致使数据分布形成多个簇或子空间,这会给基

于单一高斯假设的传统控制限设定方法带来偏差。为此,本研究在建模前期引入加权差分预处理策略,旨在改善数据分布结构,缓解多模态效应,从而确保后续监测模型控制限的合理性。

给定数据集 $\mathbf{X} \in R^{n \times m}$, 其中 n 为样本数, m 为变量数。采用加权差分方法对数据集 $\mathbf{X} \in R^{n \times m}$ 中的样本点 $\mathbf{x}_i (i = 1, 2, \dots, n)$ 进行如式(1)所示的预处理,即:

$$\mathbf{x}_i^k = \mathbf{x}_i - \sum_{j=1}^k \omega_j \mathbf{m}_j \quad (1)$$

式中: $\mathbf{m}_j = \text{mean}[n_1(x_{i,1}), n_2(x_{i,1}), \dots, n_j(x_{i,1})]$ 为 $x_{i,1}$ 的前 j 个近邻样本点的均值, $n_j(x_{i,1})$ 为样本 $x_{i,1}$ 的第 j 个近邻点, $j=1, 2, \dots, k$ (k 是所选近邻点的个数)。权值 $\omega_j (j=1, 2, \dots, k)$ 如式(2)所示。

$$\omega_j = \frac{D_j}{\sum_{j=1}^k D_j} \quad (2)$$

式中: $D_j = 1/d(x_{i,1}, n_j(x_{i,1}))$ 是样本点 $x_{i,1}$ 到 $x_{i,1}$ 的第 j 个近邻点欧式距离的倒数。权值满足归一化约束条件,即:

$$\sum_{j=1}^k \omega_j = 1 \quad (3)$$

经加权差分处理后,得到新的样本集为 $\mathbf{X}^* \in R^{n \times m}$ 。随后对其进行标准化处理,得到 $\tilde{\mathbf{X}}^* \in R^{n \times m}$ 并对 $\tilde{\mathbf{X}}^*$ 建立每一个样本点间的邻域关系。

设两个样本点分别为 $\mathbf{x}_i$ 和 $\mathbf{x}_j$, 其余弦相似度计算公式如式(4)所示。

$$\cos(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \frac{\mathbf{x}_i^T \cdot \mathbf{x}_j}{\|\mathbf{x}_i\| \times \|\mathbf{x}_j\|} \quad (4)$$

样本点 $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \in \tilde{\mathbf{X}}^*$ 的距离定义为 $\text{dist}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$, 基于此, HC-NPE 的计算公式如式(5)所示。

$$\text{dist}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \alpha_1 \cos(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) + \alpha_2 \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| \quad (5)$$

式中: α_1, α_2 为权重系数, 特征映射过程如图2所示。

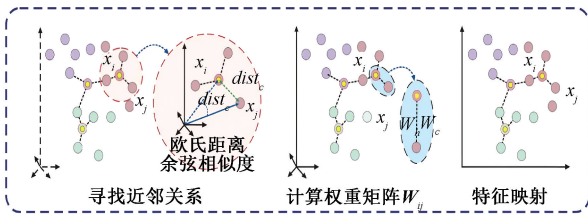


图2 HC-NPE 特征映射原理

Fig. 2 Schematic diagram of the HC-NPE feature mapping principle

以 HC-NPE 为距离度量 $\text{dist}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$, 代替以往仅依赖于欧氏距离来构建样本点邻域的方法, 隐式用于式(6)中近邻点的选择。

设权重矩阵为 $\mathbf{W}$, ω_{ij} 代表样本点 $\mathbf{x}_i$ 到样本点 $\mathbf{x}_j$ 的

权重系数, 通过最小化平方重构误差得到权重矩阵 $\mathbf{W}$, 如式(6)所示。

$$\Phi(\mathbf{W}) = \argmin \sum_{i=1}^n \|\mathbf{x}_i - \sum_{j=1}^n \omega_{ij} \mathbf{x}_j\|^2 \quad (6)$$

当 $\mathbf{x}_j$ 不是 $\mathbf{x}_i$ 的近邻点时, $\omega_{ij} = 0$; 当 $\mathbf{x}_j$ 是 $\mathbf{x}_i$ 的近邻点时, 满足条件: $\sum_{j=1}^k \omega_{ij} = 1$, k 是近邻点的数量。

HC-NPE 通过保持降维空间内样本点间的邻域重构关系, 实现了低维流形结构的有效提取。

通过对以下优化问题求解最优投影矩阵 $\mathbf{A}$, 即:

$$\mathbf{A} = \argmin \mathbf{a}^T \tilde{\mathbf{X}}^* \mathbf{T} (\mathbf{I} - \mathbf{W})^T (\mathbf{I} - \mathbf{W}) \tilde{\mathbf{X}}^* \mathbf{a} \quad (7)$$

引入拉格朗日乘子, 将优化问题转化为广义特征值求解, 即:

$$\mathbf{M} = (\mathbf{I} - \mathbf{W})^T (\mathbf{I} - \mathbf{W}) \quad (8)$$

$$\tilde{\mathbf{X}}^{*T} \mathbf{M} \tilde{\mathbf{X}}^* \mathbf{a} = \lambda \tilde{\mathbf{X}}^{*T} \tilde{\mathbf{X}}^* \mathbf{a} \quad (9)$$

求解的 m 个特征值, 按照 $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_m$ 排列, 所对应的 m 个特征向量构成 $\mathbf{A}(\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m)$ 。最终, 降维后的过程变量矩阵可表示为 $\bar{\mathbf{X}}^* = \tilde{\mathbf{X}}^* \times \mathbf{A} \in R^{n \times m}$ 。有效剔除了原始高维数据中的冗余信息与噪声干扰。

1.2 基于 FDCVA 的监测模型

本文提出了一种改进的典型变量分析方法, 以解决其初始投影矩阵在关键判别方向上能力欠缺的问题。FDCVA 是模型基于 HC-NPE 特征, 并依赖 FDCVA 所生成的、具有增强判别力的投影矩阵, 以精准揭示系统动态特性与异常。设过程变量和输出变量分别为 $\mathbf{x}_t \in R^{n_x}$ 和 $\mathbf{y}_t \in R^{n_y}$, 分别表示系统在时刻 t 的输入与输出状态。所构建历史数据向量 $\mathbf{h}_t$ 和未来数据向量 $\mathbf{f}_t^{[17]}$, 如式(10)与(11)所示。

$$\mathbf{h}_t = [\mathbf{x}_{t-1}^T, \mathbf{x}_{t-2}^T, \dots, \mathbf{x}_{t-h}^T, \mathbf{y}_{t-1}^T, \mathbf{y}_{t-2}^T, \dots, \mathbf{y}_{t-h}^T] \in R^{n_h} \quad (10)$$

$$\mathbf{f}_t = [\mathbf{y}_t^T, \mathbf{y}_{t+1}^T, \mathbf{y}_{t+2}^T, \dots, \mathbf{y}_{t+f-1}^T] \in R^{n_{y^f}} \quad (11)$$

式中: $n = n_x + n_y$, h 和 f 分别为历史数据和未来数据的滞后长度。对于具有 N 个样本的训练集, 令 $M = N - h - f + 1$, 生成 t 时刻的历史和未来数据向量 $\mathbf{h}_t, \mathbf{f}_t$, 其中 $t \in [h+1, h+M]$ 。

基于预处理后输入变量 $\bar{\mathbf{X}}^*$ 和输出变量 $\mathbf{Y}^*$, 构建样本数据集的历史汉克尔矩阵 $\mathbf{H}_t$ 与未来汉克尔矩阵 $\mathbf{F}_t$, 其具体形式分别如式(12)与(13)所示。

$$\mathbf{H}_h = [\mathbf{h}_{t+1}, \mathbf{h}_{t+2}, \dots, \mathbf{h}_{t+M}] \in R^{n_h \times M} \quad (12)$$

$$\mathbf{F}_f = [\mathbf{f}_{h+1}, \mathbf{f}_{h+2}, \dots, \mathbf{f}_{h+M}] \in R^{n_{y^f} \times M} \quad (13)$$

针对历史与未来监测值, 其样本协方差矩阵与交叉协方差矩阵可分别通过式(14)~(16)确定。

$$\Sigma_{hh} = \frac{1}{M-1} \mathbf{H}_h \mathbf{H}_h^T \in R^{n_h \times n_h} \quad (14)$$

$$\Sigma_{ff} = \frac{1}{M-1} \mathbf{F}_f \mathbf{F}_f^T \in R^{n_{y^f} \times n_{y^f}} \quad (15)$$

$$\Sigma_{f_h} = \frac{1}{M-1} F_f H_h^T \in R^{n_f \times m_p} \quad (16)$$

通过奇异值分解,汉克尔矩阵如式(17)所示。

$$H = \Sigma_{ff}^{-1/2} \Sigma_{f_h} \Sigma_{hh}^{-1/2} = U \Sigma V^T \quad (17)$$

式中: U 是汉克尔矩阵的左奇异矩阵; V 是汉克尔矩阵的右奇异矩阵; Σ 是对角矩阵。由此可获得初始投影矩阵,即:

$$J_n = V_n^T \Sigma_{hh}^{-1/2} \quad (18)$$

$$F_n = (1 - V_n V_n^T) \Sigma_{hh}^{-1/2} \quad (19)$$

式中: V_n 是 V 的前列。

CVA 所求得的初始投影矩阵 J_n, F_n 虽能提取系统动态特征,但部分方向判别能力不足,会导致对故障信息的识别能力低下。为此,本文引入 Fisher 判别准则^[18],寻找最大类间方差与最小类内方差比值的投影方向,在正常工况 (n) 与参考故障工况 (f) 下,对各方向进行优化。计算得到正常工况与故障工况的汉克尔矩阵分别为 $H^{(n)}$ 和 $H^{(f)}$,则每个样本在状态子空间的表示如式(20)与(21)所示。

$$Z^{(n)} = H^{(n)} J_n \quad (20)$$

$$Z^{(f)} = H^{(f)} J_n \quad (21)$$

在每个方向上计算正常样本 (n) 与故障样本 (f) 的均值 μ 和方差 σ^2 ,即:

$$\mu_n = \frac{1}{M_n} \sum_{i=1}^{M_n} Z_i^{(n)} \quad (22)$$

$$\mu_f = \frac{1}{M_f} \sum_{i=1}^{M_f} Z_i^{(f)} \quad (23)$$

$$\sigma_n^2 = \frac{1}{M_n} \sum_{i=1}^{M_n} (Z_i^{(n)} - \mu_n)^2 \quad (24)$$

$$\sigma_f^2 = \frac{1}{M_f} \sum_{i=1}^{M_f} (Z_i^{(f)} - \mu_f)^2 \quad (25)$$

式中: M_n 表示正常样本个数; M_f 表示故障样本个数; $Z_i^{(n)}$ 与 $Z_i^{(f)}$ 分别表示正常与异常样本在主元空间中第 i 个样本在某一方向投影标量。

基于此进行 Fisher 判别,即:

$$J_{FDA}^{(j)} = \frac{(\mu_f^{(j)} - \mu_n^{(j)})}{\sigma_f^{2(j)} + \sigma_n^{2(j)}} \quad (26)$$

式中: $j = 1, 2, \dots, m, J_{FDA}^{(j)}$ 代表第 j 个方向的 Fisher 判别分数,用于衡量第 j 个方向是否能够有效区分正常与故障,分母越小表示类内一致性越好。

对每个方向 j , 计算其在故障投影数据中的“能量”,如式(27)与(28)所示。

$$E_j = \|Z_{:,j}^{(f)}\| \quad (27)$$

$$\bar{E}_k = \frac{\sum_{j=1}^k E_j}{\sum_{j=1}^m E_j} \quad (28)$$

式中: $\bar{E}_k$ 代表选取前 k 个方向后的积累能量比例。

最终按 Fisher 得分排序、能量比筛选,保留下来的 k 个方向组成新的投影矩阵,将原始的 J_n 中筛选出最有判别能力的部分构成优化投影矩阵 J_n^{opt} ,即:

$$J_n^{opt} = [j_{(1)}, j_{(2)}, \dots, j_{(k)}] \quad (29)$$

得到状态特征矩阵 z_t 和残差矩阵 e_t , 如式(30)与(31)所示。

$$z_t = J_n^{opt} h_t \in R^n \quad (30)$$

$$e_t = F_n h_t \in R^{nh} \quad (31)$$

式中: J_n^{opt} 和 F_n 表示历史数据向量的投影矩阵。而后,基于正常监测样本计算每个时刻 t 的 T^2 和 Q 统计量,如式(32)与(33)所示。

$$T_t^2 = z_t^T z_t \quad (32)$$

$$Q_t = e_t^T e_t \quad (33)$$

最后通过核密度估计法^[19]计算控制限 T_{lim}^2 和 Q_{lim} 。当实时工业工程中任一时刻计算的统计量超出该控制限时,则说明监测到异常。

2 实验验证

2.1 直拉硅单晶生长设备数据监测系统

直拉法硅单晶生长是一个包含多个阶段的精确控制过程。首先,多晶硅在坩埚中熔化,籽晶接触熔体界面后,经引晶、放肩与等径生长,在持续的旋转与拉升中形成单晶^[20]。该过程的实现高度依赖于对热场、速度场等多物理量的协同优化,其控制精度直接决定了最终晶体的直径、缺陷密度及内在品质^[21],其整体工艺流程如图3所示。

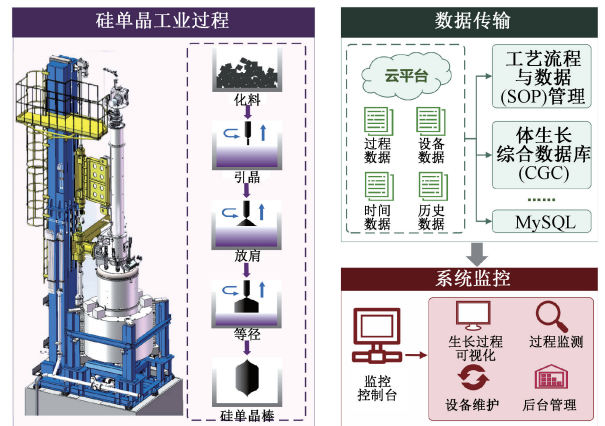


图3 直拉硅单晶生长设备数据监测系统

Fig. 3 Schematic diagram of the data monitoring system for Czochralski silicon single crystal growth equipment

由图3可知,硅单晶生产过程中产生的大量过程数据、设备运行数据及时间序列数据通过传感器实时采集,

并按照预设的逻辑和需求传输并存储于数据库中。通过建立规范化的数据表结构,为过程监测提供可靠的数据支持。系统监控环节则依赖实时数据及先进的过程监测算法。监测结果通过可视化界面展示,支持操作人员及时进行故障干预,从而提升系统的稳定性。

2.2 数据准备

本文以国产某型号 12 英寸半导体直拉硅单晶炉为研究对象,采集其实际生产过程数据,并结合硅单晶生长过程的机理特性,筛选出关键操作变量与被控变量。采集的数据涵盖提拉速度、坩埚转速、加热器功率、坩埚升降速度、晶体转速及晶体直径,全面反映了生长过程的动态行为。

为验证基于现场数据所构建监测模型的有效性,实验数据均截取自真实的在线运行历史记录,采样频率设定为 1 s/次,累计采集样本 2 400 组。数据集划分策略如下:1)正常工况训练集:480 组样本,用于离线构建监测模型。2)故障工况训练集:480 组样本,用于模型故障敏感性优化。3)故障工况测试集:960 组未参与建模的独立新数据,用于客观验证模型处理未知数据的在线故障监测能力。

故障测试集来源为:为验证本文方法在复杂工业环境下的在线监测有效性,实验基于单晶炉真实运行记录,选取了 3 类典型的实际故障工况数据。在时间序列样本的构造上,为真实模拟工业现场系统由稳态正常运行向异常状态演变的动态过程,实验设定前 160 个时间采样点为正常工况数据;从第 161 个采样点开始,接入 800 组历史故障样本,形成 3 种故障的独立测试集。旨在全面评估模型在无故障阶段的误报率以及故障发生后的在线监测率。测试集具体的故障类型及其物理特性描述如表 1 所示。

表 1 故障类型
Table 1 Fault types

编号	故障类型	故障描述
故障 1	阶跃	晶升机构的位置传感器控制异常
故障 2	阶跃	坩埚轴机构的转速传感器故障
故障 3	阶跃	加热器控制器故障

为了衡量监测性能,定义两个监测指标,即故障监测率(fault detection rate, FDR)和误报率(false alarm rate, FAR)^[22],分别定义为:

$$FDR = \frac{FP}{FP + TN}$$

(34)

$$FAR = \frac{FN}{FN + TP}$$

(35)

式中:FP 表示正常事件被识别为异常;TN 表示正常事件

识别为正常;FN 表示异常事件被识别为正常;TP 表示异常事件识别为异常。

本实验中,充分结合直拉硅单晶生长过程的复杂时变性与动态响应特征,对 HC-NPE-FDCVA 模型的关键参数进行了科学设定:为完整保持局部流形拓扑结构,HC-NPE 构图近邻数设为 $k_{\text{nnn}} = 5$;距离权重系数设为 $\alpha_1 = 0.6$ 与 $\alpha_2 = 0.4$,使模型在度量高维非线性数据时对趋势演化更为敏感;基于单晶炉系统的自相关时间常数,汉克尔矩阵延时步长设定为 $l = h = 5 \text{ s}$,以精准覆盖瞬态动态特征而不过多引入历史冗余;考虑到实际工艺数据的非高斯长尾分布,核密度估计控制限的显著性水平选取 $\gamma = 0.99$ 。

在本模型中,状态子空间维数 k 代表将特征投影方向按 Fisher 得分降序排列后,累积能量比例达到设定阈值时所截取的最优方向总数。为明确该维数的选取依据,本文以故障 1 为例,分别对 T^2 和 Q 统计量开展了参数敏感性分析,如图 4 与 5 所示。

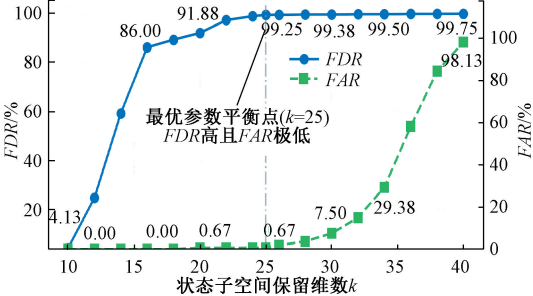


图 4 T^2 统计量 k 参数敏感性分析
Fig. 4 T^2 -statistic k -parameter sensitivity analysis

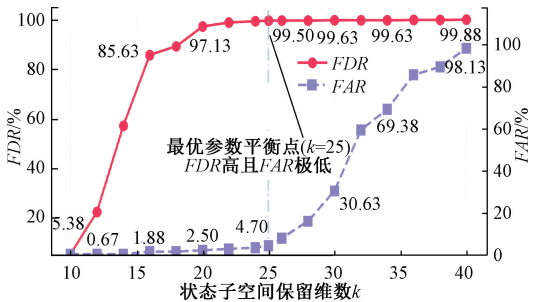


图 5 Q 统计量 k 参数敏感性分析
Fig. 5 Q -statistic k -parameter sensitivity analysis

随着 k 的增加,主元空间捕获的系统动态特征增多, T^2 统计量的故障监测率迅速上升并在 $k = 25$ 附近趋于饱和,但过大的 k 值会引入冗余噪声导致误报率上升;同时,若 k 取值过大,残差空间被过度压缩,其有效故障信息减少,导致 Q 统计量的 FDR 出现下降趋势。综合权衡主元空间与残差空间的监测效能,本文最终选取 $k = 25$ 作为最优状态子空间维数,实现了特征保留与噪声抑制的最优工程平衡。

2.3 结果与分析

为评估本文方法的泛化性能与先进性,通过将所提模型与 PCA、KCVA、改进的 NPE-PPCA、NPE-DPCA

及 CVA-KLD 等监测模型进行性能比对,详细统计了各模型在不同故障下的监测率与误报率,结果如表 2 及 3 所示。

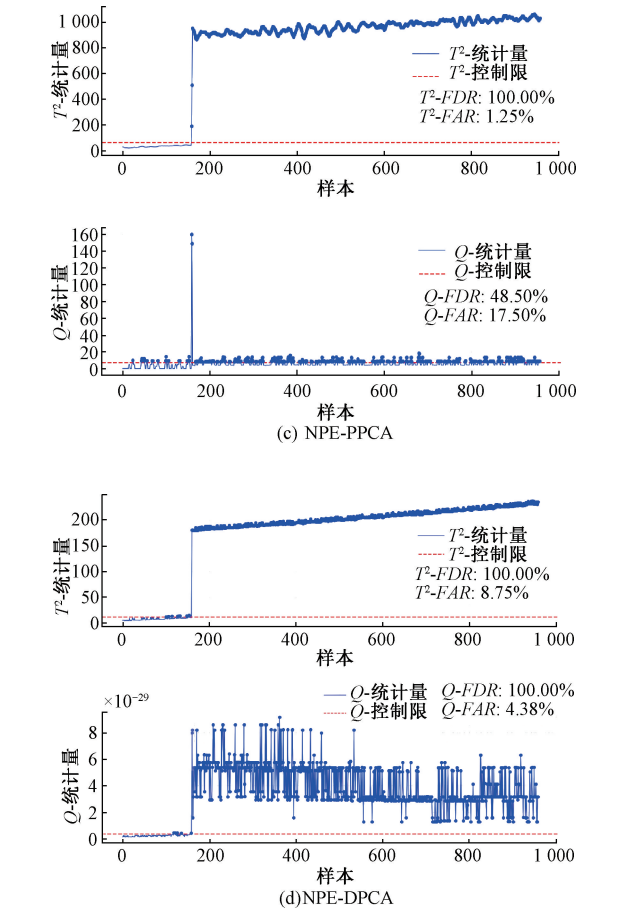
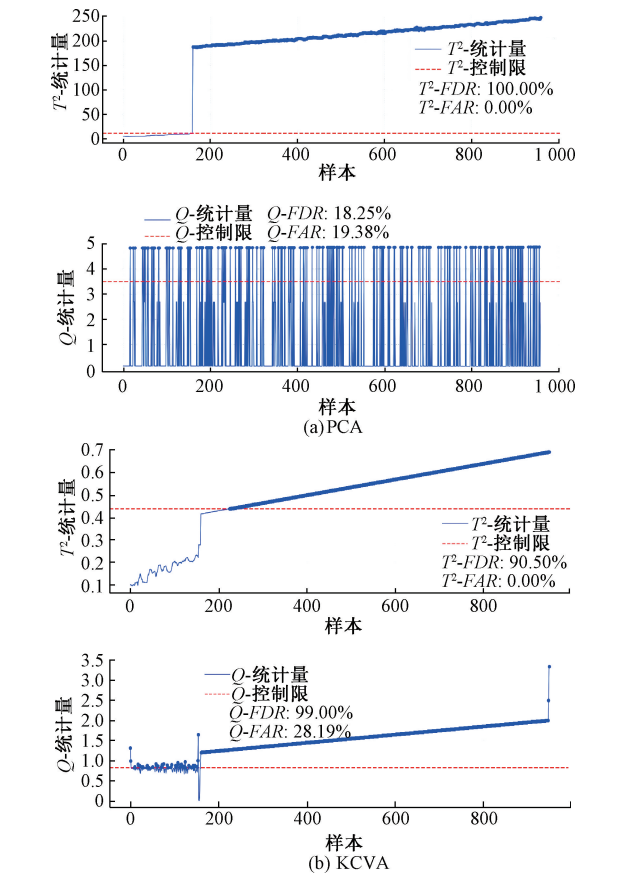
表 2 不同算法的故障 FDR
Table 2 FDR of different algorithms (%)

故障 编号	PCA		KCVA		NPE-PPCA		NPE-DPCA		CVA-KLD		HC-NPE-FDCVA	
	T^2	Q	T^2	Q	T^2	Q	T^2	Q	T^2	Q	T^2	Q
故障 1	100.0	18.25	90.50	99.00	100.00	48.50	100.00	100.00	100.00	89.61	99.25	99.50
故障 2	100.0	23.62	98.62	99.12	84.09	100.00	100.00	95.50	100.00	100.00	99.00	99.50
故障 3	100.0	100.00	98.62	99.25	100.00	100.00	100.00	58.25	100.00	100.00	99.25	99.75

表 3 不同算法的故障 FAR
Table 3 FAR of different algorithms (%)

故障 编号	PCA		KCVA		NPE-PPCA		NPE-DPCA		CVA-KLD		HC-NPE-FDCVA	
	T^2	Q	T^2	Q	T^2	Q	T^2	Q	T^2	Q	T^2	Q
故障 1	0.00	19.38	0.00	28.19	1.25	17.50	8.75	4.38	5.29	5.29	0.67	4.70
故障 2	26.25	25.00	0.00	46.31	0.00	17.50	40.00	5.00	6.35	6.35	0.00	2.68
故障 3	59.38	25.00	0.00	48.99	1.25	18.12	31.87	86.25	10.05	10.05	0.00	0.67

故障 1 的监测结果如图 6 所示,图 6 中虚线表示控制限,实线表示统计值。



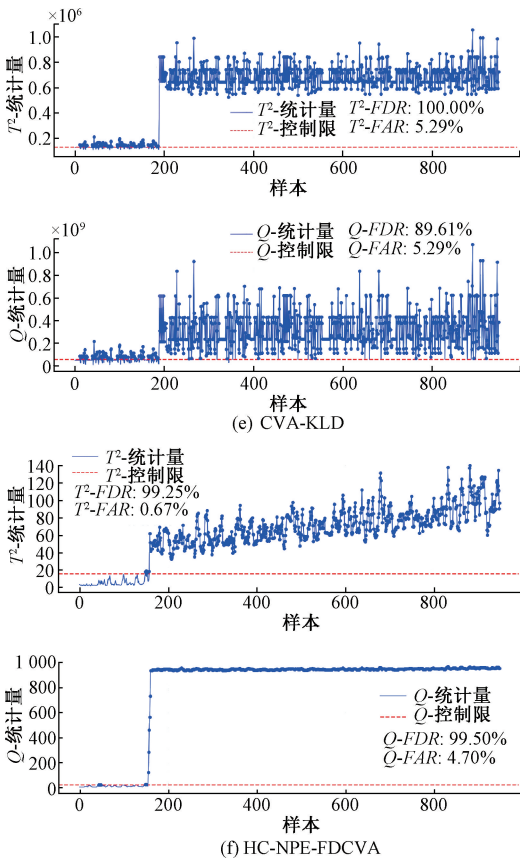


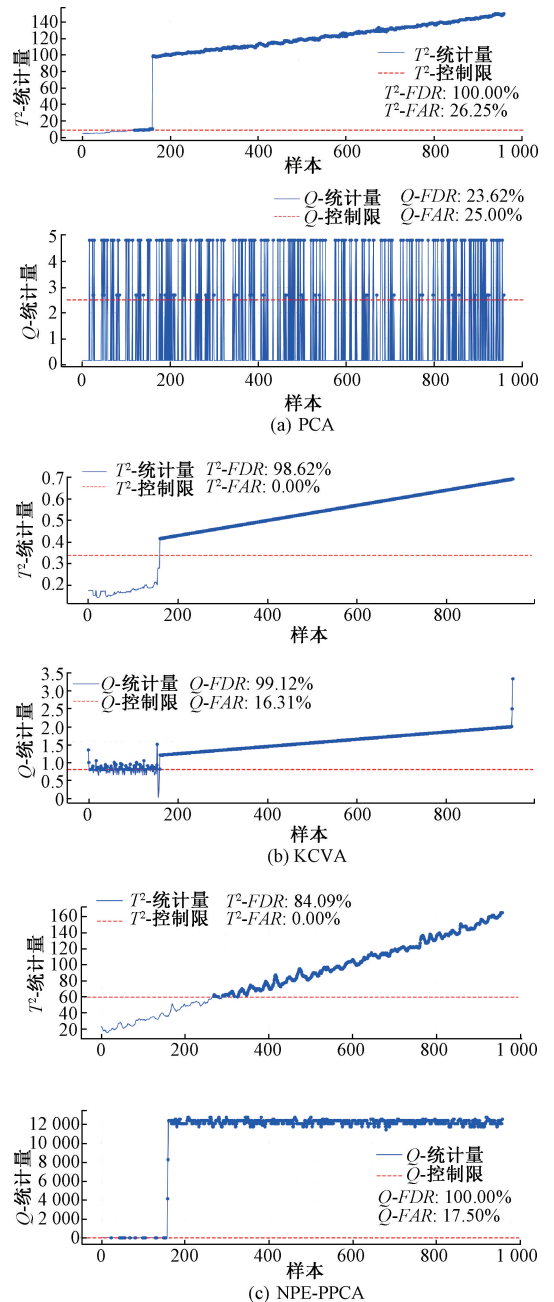
图6 故障1发生时PCA、KCVA、NPE-PPCA、NPE-DPCA、CVA-KLD、HC-NPE-FDCVA的统计监测图

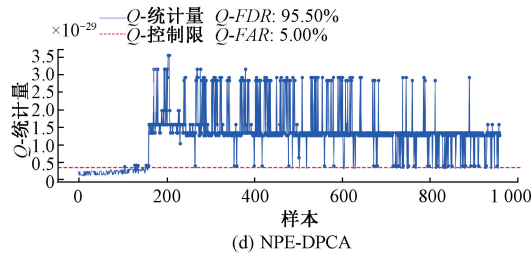
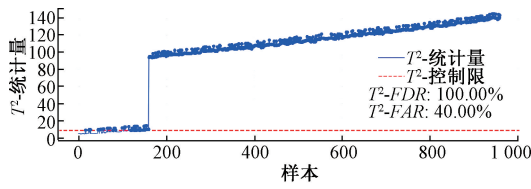
Fig. 6 Statistical monitoring charts of PCA, KCVA, NPE-PPCA, NPE-DPCA, CVA-KLD, and HC-NPE-FDCVA when fault 1 occurs

在晶升位置传感器异常监测中,PCA的 Q 统计量监测率仅为18.25%,说明其对全局方差变化敏感,却无法捕捉局部非线性扰动特征。KCVA的 T^2 监测率仅有90.50%,显示出其核映射能刻画非线性特征,却存在过拟合风险,导致部分正常与故障样本混淆。NPE-PPCA的 Q 统计量为48.50%,说明其局部保持能力有限,部分异常特征被削弱。NPE-DPCA的监测率表现较优,但其误报率在 T^2 统计量下高达45%,表明其过度敏感,容易将正常波动误判为异常。CVA-KLD的 T^2 和 Q 监测率分别为100%和89.50%,虽能捕捉到动态特征,但误报率仍维持在5.37%左右,主要受限于KLD对噪声敏感。相比之下,本文所提模型实现了 T^2 监测率99.25%、 Q 监测率99.50%,而误报率仅为0.67%和4.70%,其优势在于HC-NPE对邻域结构的优化使得晶升异常被快速区分,而FDCVA通过Fisher准则增强类间分离度,有效抑制了由噪声和波动带来的误报,体现出对该类动态故障的高敏感性与稳定性。

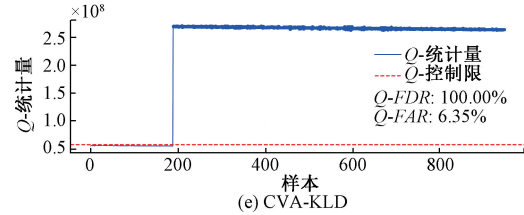
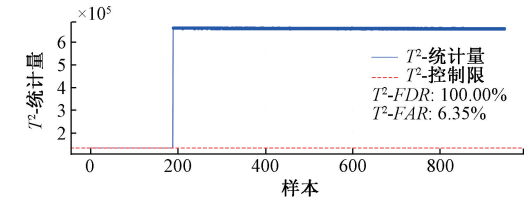
如图7所示,在故障2(坩埚转速传感器异常)监测中,PCA依旧保持 T^2 监测率100%,但 Q 统计量仅

52.50%,表现出与故障1类似的局限性,即对动态特征缺乏捕捉能力。KCVA在 T^2 和 Q 统计量上监测率分别为98.62%和99.12%,说明其在非线性映射下能够捕捉转速阶跃特征,但其 Q 统计量误报率达到46.31%,限制了应用价值。NPE-PPCA在 Q 统计量下实现了100%的监测率,但 T^2 仅84.09%,且误报率仍有17.50%,显示其在多模态动态场景下特征提取不足。NPE-DPCA的 T^2 监测率100%, Q 为95.50%,但误报率分别达到40.00%与5.00%,说明其对异常过度敏感。CVA-KLD的 T^2 与 Q 均达到100%,但误报率仍维持在5.37%左右,噪声影响未能完全消除。与之相比,本文所提模型在故障2中保持了 T^2 监测率99.00%、 Q 监测率99.50%,误报率

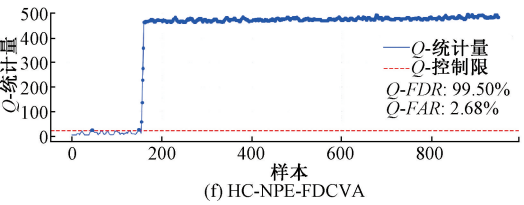
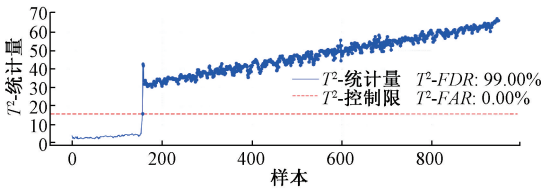




(d) NPE-DPCA



(e) CVA-KLD



(f) HC-NPE-FDCVA

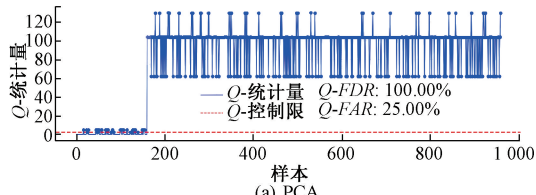
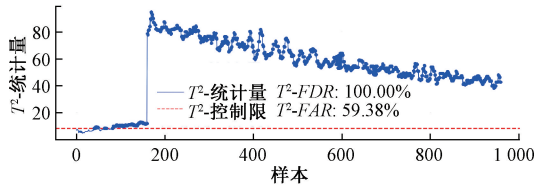
图 7 故障 2 发生时 PCA、KCVA、NPE-PPCA、NPE-DPCA、CVA-KLD、HC-NPE-FDCVA 的统计监测图

Fig. 7 Statistical monitoring charts of PCA, KCVA, NPE-PPCA, NPE-DPCA, CVA-KLD, and HC-NPE-FDCVA when fault 2 occurs

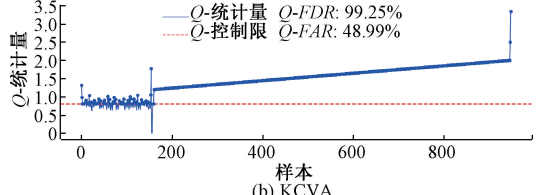
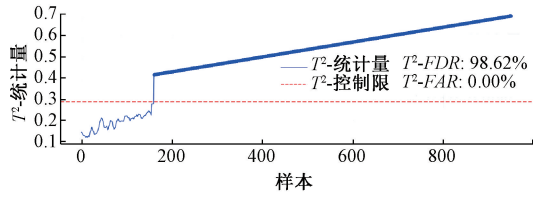
仅 0.00% 和 2.68%,说明该方法在动态异常发生初期即可捕捉到特征漂移,并且通过 Fisher 优化将正常与异常在主元空间中清晰区分,实现了高监测率与低误报的平衡,完全适配工业实际对可靠性的要求。

如图 8 所示,在故障 3 (加热器温度异常) 监测中,PCA 与 NPE-PPCA、NPE-DPCA 的 T^2 与 Q 监测率均保持

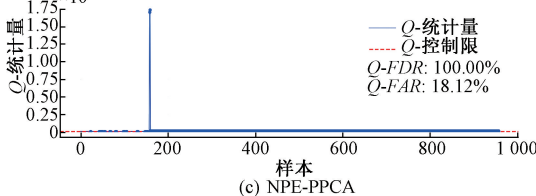
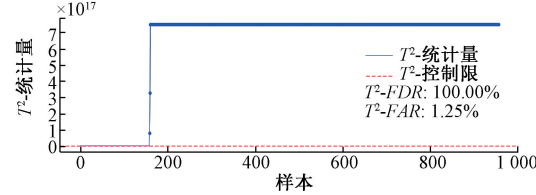
在 100%,但误报率却差异显著。PCA 在 T^2 统计量下的误报率高达 59.38%,说明其对温度扰动过度敏感。NPE-PPCA 在 T^2 下误报率 1.25%, Q 为 18.12%,表现中等。而 NPE-DPCA 的 Q 统计量监测率仅 58.25%,误报率则高达 86.25%,显示出该方法在强非线性场景下鲁棒性极差。KCVA 在 T^2 与 Q 上监测率分别为 98.62% 和 99.25%,但误报率接近 49%,几乎失去实际应用意义。CVA-KLD 维持了 100% 的监测率,但误报率依然在 10% 左右,说明其对噪声扰动有一定敏感性。相比之下,本文所提模型在故障 3 中实现了 T^2 监测率 99.25%、 Q 监测率 99.75%,且误报率仅为 0.00% 与 0.67%,说明在温度类故障这种较容易识别的场景中,该方法不仅保证了接



(a) PCA



(b) KCVA



(c) NPE-PPCA

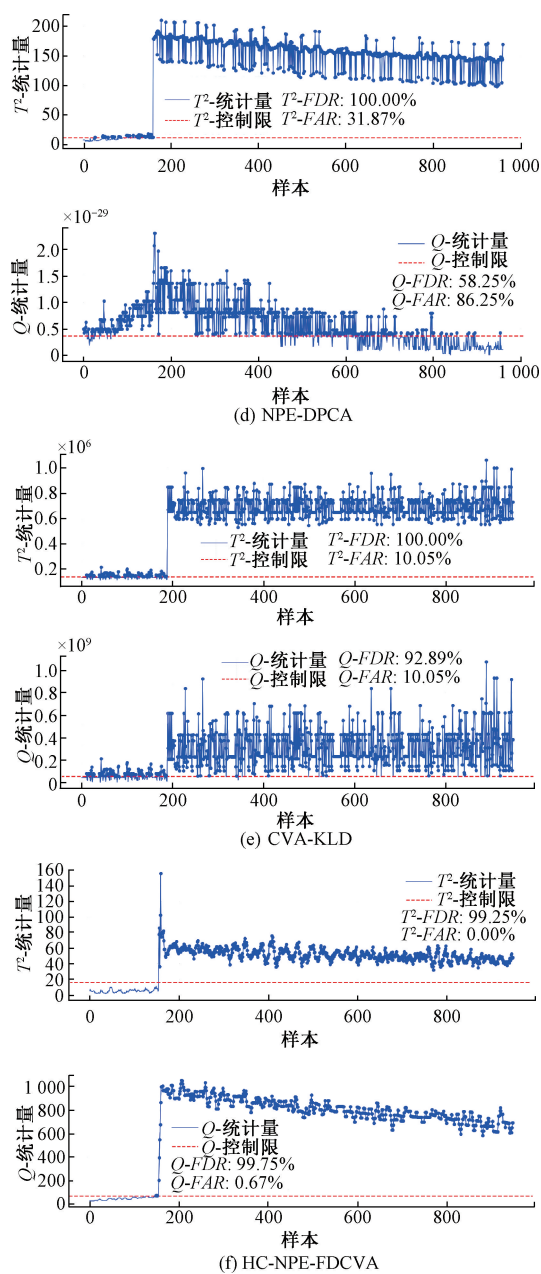


图8 故障3发生时 PCA、KCVA、NPE-PPCA、NPE-DPCA、CVA-KLD、HC-NPE-FDCVA 的统计监测图

Fig.8 Statistical monitoring charts of PCA, KCVA, NPE-PPCA, NPE-DPCA, CVA-KLD, and HC-NPE-FDCVA when fault 3 occurs

近满分的监测率,还进一步抑制了误报,将监测性能保持在最优水平。这对于要求高度可靠性的工业过程监控尤为关键。

为验证各模块的性能增益,选取故障1作为代表进行消融研究,其实验结果图9所示。

定量对比结果表明,随着混合余弦-邻域保持嵌入与基于 Fisher 判别的典型变量分析模块的逐步引入,模型

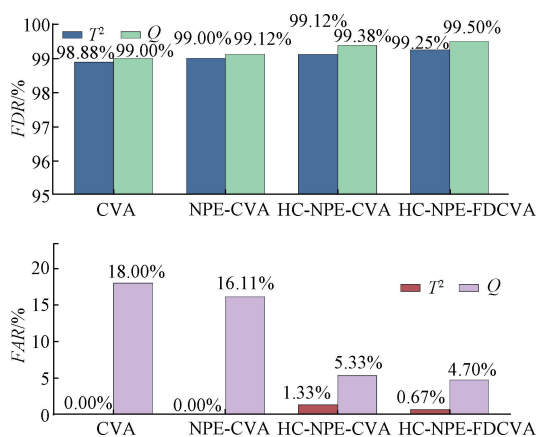


图9 不同模块消融实验的结果对比

Fig.9 Comparison plot of results from different module ablation experiments

的监测率稳步提升且误报率维持在较低的值。相比于基础的 CVA 与常规 NPE-CVA 算法,HC-NPE 模块通过融合多维距离度量,有效增强了模型对局部微小异常特征的捕捉能力。最终的 HC-NPE-FDCVA 方法利用判别优化进一步最大化了异常状态的可分性,在所有消融实验中取得了最优的综合监测性能,充分验证了所提特征增强与判别优化架构的有效性。

3 结 论

针对直拉硅单晶生长过程中多变量动态监测的复杂性,本文提出了一种基于特征增强与判别优化的过程监测方法——HC-NPE-FDCVA。该方法在传统邻域保持嵌入的基础上引入余弦相似度机制,保证了高维数据局部与全局结构,提升了特征提取能力;结合基于 Fisher 判别的典型变量分析模型,进一步强化了主元空间的判别性能,构建出具有更强判别力状态子空间,在复杂动态过程中实现更高鲁棒性与灵敏度的监测性能。

将所提方法应用于直拉硅单晶生长过程。结果表明,该 HC-NPE-FDCVA 在故障监测率和误报率等关键性能指标上展现出了优秀的综合能力。与传统的 PCA、KCVA、改进的 NPE-PPCA 及 NPE-DPCA、CVA-KLD 等模型相比,该方法不仅保持了较高的异常监测率,而且显著抑制了由工艺参数波动带来的干扰,大大降低了误报率。此外,考虑到工业部署中对在线实时性要求高,相较于计算复杂度高的深度学习模型,本文方法在保障高精度监测的同时具有更低的在线计算负荷。总体而言,该方法有效平衡了监测的灵敏度与鲁棒性,表现出良好的泛化能力,充分验证了其在复杂动态工业过程中的实用性与可靠性。

参考文献

- [1] 马向阳,原帅,赵统,等. 大尺寸半导体硅单晶品质管控理论与技术的挑战与对策[J]. 科学通报, 2025, 70(Z1):544-548.
- MA X Y, YUAN SH, ZHAO T, et al. Challenges and countermeasures in theory and technology for quality control of large-size semiconductor silicon single crystals[J]. Chinese Science Bulletin, 2025, 70(Z1):544-548.
- [2] HUO K D, HUANG D X, SHANG CH. A novel white component analysis for dynamic process monitoring[J]. Journal of Process Control, 2023, 127:102998.
- [3] WU ZH Y, LI Y T, ZHANG G Y. The condition monitoring scheme for industrial IoT scenario: A distributed modeling for high-dimensional nonstationary data[J]. Computers & Industrial Engineering, 2024, 197:110545.
- [4] 曾豫宁,行鸿彦. 基于改进独立成分分析的雨声信号盲源分离研究[J]. 仪器仪表学报, 2025, 46(5): 135-145.
- DZENG Y N, XING H Y. Research on blind source separation of rain acoustic signals based on improved independent component analysis[J]. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2025, 46(5): 135-145.
- [5] 符恬恬,郑斌琪,李成娟,等. 基于 PCA 和非线性映射改进的 MFCC 特征提取方法[J]. 电子测量技术, 2025, 48(10): 93-99.
- FU T T, ZHENG B Q, LI CH J, et al. Improved MFCC feature extraction method based on PCA and nonlinear mapping[J]. Electronic Measurement Technology, 2025, 48(10): 93-99.
- [6] KONG X Y, LUO J Y, FENG X W, et al. A general quality-related nonlinear process monitoring approach based on input-output kernel PLS[J]. IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement, 2023, 72: 3238692.
- [7] KONG X Y, HE Y M, SONG ZH H, et al. Deep probabilistic principal component analysis for process monitoring[J]. IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, 2025, 36(4):7422-7436.
- [8] 张珂,蔡圣福,石怀涛,等. 基于改进的动态独立成分分析故障检测方法[J]. 电子测量技术, 2021, 44(16): 79-85.
- ZHANG K, CAI SH F, SHI H T, et al. Fault detection method based on improved dynamic independent component analysis[J]. Electronic Measurement Technology, 2021, 44(16): 79-85.
- [9] LYU F Y, YU SH J, YE H W, et al. Incipient fault detection and isolation with Cauchy-Schwarz divergence: A probabilistic approach[J]. Journal of the Franklin Institute, 2024, 361(15):107114.
- [10] HARROU F, KADRI F, CHAABANE S, et al. Improved principal component analysis for anomaly detection: Application to an emergency department[J]. Computers & Industrial Engineering, 2015, 88:63-77.
- [11] BODDU Y, MANIMARAN A. Maximizing forecasting precision: Empowering multivariate time series prediction with QPCA-LSTM[J]. Computational Economics, 2024, 66(4):2755-2790.
- [12] ZHANG SH M, BAO X L, WANG S J. Common canonical variate analysis (CCVA) based modeling and monitoring for multimode processes[J]. Chemical Engineering Science, 2023, 271:118581.
- [13] 张谦谦,王文标,郝友维. 基于动态加权差分主成分分析的故障检测[J]. 科学技术与工程, 2023, 23(36):15522-15529.
- ZHANG Q Q, WANG W B, HAO Y W. Fault detection based on dynamic weighted difference principal component analysis[J]. Science Technology and Engineering, 2023, 23(36): 15522-15529.
- [14] 闫建红,段运会. 动量余弦相似度梯度优化图卷积神经网络[J]. 计算机工程与应用, 2024, 60(14): 133-143.
- YAN J H, DUAN Y H. Momentum cosine similarity gradient optimized graph convolutional neural network[J]. Computer Engineering and Applications, 2024, 60(14): 133-143.
- [15] LI D Y, ZHANG H J, AN L SH, et al. A quality-related fault detection method based on deep spatial-temporal networks and canonical variable analysis for industrial processes[J]. IEEE Sensors Journal, 2024, 24(18): 29047-29055.
- [16] 原健辉,赵荣珍,邓林峰. 半监督超边界 Fisher 分析的转子故障数据降维算法[J]. 振动、测试与诊断, 2025, 45(3): 543-550, 624.
- YUAN J H, ZHAO R ZH, DENG L F. Rotor fault data dimensionality reduction algorithm based on semi-supervised hyper-margin Fisher analysis[J]. Journal of Vibration, Measurement & Diagnosis, 2025, 45(3): 543-550, 624.
- [17] 陈新,潘东辉,杨文志. 融合概率信息与稀疏规范变量分析的化工过程微小故障检测[J]. 控制与决策, 2025, 40(7): 2271-2280.
- CHEN X, PAN D H, YANG W ZH. Incipient fault detection for chemical processes integrating probabilistic information and sparse canonical variate analysis[J]. Control and Decision, 2025, 40(7): 2271-2280.

- [18] 张浩, 齐光磊, 侯小刚, 等. 基于改进 Fisher 准则的深度卷积生成对抗网络算法[J]. 光学 精密工程, 2022, 30(24): 3239-3249.
- ZHANG H, QI G L, HOU X G, et al. Deep convolutional generative adversarial network algorithm based on improved Fisher's criterion[J]. Optics and Precision Engineering, 2022, 30(24): 3239-3249.
- [19] CHEN Y Q, BAI J J, ZOU H B. An enhanced DPCA fault diagnosis method based on hierarchical cluster analysis[J]. The Canadian Journal of Chemical Engineering, 2023, 102(1): 366-382.
- [20] 万银, 刘丁, 任俊超, 等. 基于栈式自编码网络的直拉硅单晶生长过程 V/G 软测量建模[J]. 仪器仪表学报, 2020, 41(10): 277-286.
- WAN Y, LIU D, REN J CH, et al. V/G soft measurement modeling of Czochralski silicon single crystal growth process based on stacked autoencoder network [J]. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2020, 41(10): 277-286.
- [21] NISHIZAWA S I. Relationship between temperature gradient and growth rate during CZ silicon crystal growth[J]. Journal of Crystal Growth, 2025, 649: 127942.

- [22] 刘斌, 白红艳, 何璐瑶, 等. 面向涡轮的 PCA-POA-LSTM 数据驱动建模及故障预警方法[J]. 电子测量与仪器学报, 2025, 39(1): 145-155.

LIU B, BAI H Y, HE L Y, et al. Data-driven modeling and fault early warning method for turbine based on PCA-POA-LSTM[J]. Journal of Electronic Measurement and Instrumentation, 2025, 39(1): 145-155.

作者简介



黄伟超 (通信作者), 2007 年于西安工程大学获得学士学位, 2012 年和 2018 年于西安理工大学分别获得硕士学位和博士学位, 现为西安理工大学副教授, 主要研究方向为复杂系统建模及优化、故障诊断与健康

管理。

E-mail: huangwc@xaut.edu.cn

Huang Weichao (Corresponding author) received his B. Sc. degree from Xi'an Polytechnic University in 2007, his M. Sc. and Ph. D. degrees both from Xi'an University of Technology in 2012 and 2018, respectively. He is currently an associate professor at Xi'an University of Technology. His main research interests include complex system modeling and optimization, fault diagnosis and health management.