

RCA 洗浄システムの熱モデルと洗浄液の適応予測温度制御†

黒木 秀一*・西田 健*・信友 宏樹*
坂本 貴子**・三股 充***・伊藤 勝美***

A Thermal Model of the RCA Cleaning System and Adaptive Predictive Temperature Control of Cleaning Solutions†

Shuichi KUROGI*, Takeshi NISHIDA*, Hiroki NOBUTOMO*,
Takako SAKAMOTO**, Mitsuru MIMATA*** and Katsuyoshi ITO***

The RCA cleaning method is the industry standard way to clean silicon wafers, where the temperature control of the cleaning solutions is important for a stable cleaning performance but it involves difficulties such that many of the cleaning solutions show nonlinear and time-varying exothermic chemical reactions, the system has long and fluctuating time lags owing that the cleaning system has special equipments for dealing with corrosive cleaning solutions, and so on. Here, we first present a thermal model of the system, where by means of the DSC (differential scanning calorimetry) method we analyze exothermic chemical reactions of the cleaning solutions such as SPM (sulfuric acid/hydrogen peroxide mixture), APM (ammonia/hydrogen peroxide mixture) and HPM (hydrochloric acid/hydrogen peroxide mixture). To control the temperature of the solutions, we use adaptive predictive controller, where the adaptive method is used to cope with the nonlinear and time-varying exothermic reactions, and the predictive method is for overcoming the problems on the time lags. Further, the objective trajectory is designed for limiting the overshoot and eliminating the steady state error, and a new sampling method called virtual sampling method is introduced for reducing the required memory size and the calculation time. We show the usefulness of the present thermal model and verify the performance of the present controller through computer simulation as well as the control of an actual system.

Key Words: thermal model of the RCA cleaning system, adaptive predictive temperature control

1. はじめに

現在、半導体製造工程のシリコンウエハの洗浄においては、米国 RCA 社 (Radio Corporation of America) で開発された RCA 洗浄法¹⁾が多くの企業で用いられている。この洗浄法においては洗浄液をある一定温度に保つ温度制御が安定した洗浄性能を得るために重要であるが、使用する洗浄液は、SPM (硫酸過水; 硫酸 H_2SO_4 と過酸化水素水 H_2O_2 の混合液)、APM (アンモニア過水; アンモニア NH_3 と過酸化水素水 H_2O_2 と水 H_2O の混合液)、HPM (塩酸過水; 塩酸 HCl と過酸化水素水 H_2O_2 と水 H_2O の混合液) などのように混

合時に発熱化学反応を伴うものが多い。この温度制御においては以下の点に注意する必要がある。

(1) 発熱反応: 洗浄液が発熱反応する場合、その反応は非線形かつ時変である。たとえば、SPM は硫酸と過酸化水素水を制御開始直前に混合するため、まず硫酸と水との水和熱により $100^\circ C$ 前後まで温度が急激に上昇する。さらに加熱して高温になると、硫酸と過酸化水素との発熱反応が発生し、以後、加熱しなくても温度上昇する期間がある。加熱履歴などにより発熱反応は異なり、また他の液体では異なる反応をする。

(2) 機器構成: 液体に腐食されにくい機器を用いて制御系が構成されている。この構成法は工場や工程により幾らか異なるが、本稿で扱う系は、まず赤外線透過性なガラスを通して液体に照射して加熱するハロゲンヒータ装置を用いる。これにより入力電源回路と腐食性の強い液体を分離すると同時に、液体の局所的な温度上昇を抑えかつ即応性に優れた加熱ができる。さらに腐食に強いペローズポンプ (蛇腹式ポンプ) を用いてヒータ装置と洗浄槽の液体を循環させている。ペローズポンプを用いることはヒータ入力か

† International Conference on Neural Information Processing で一部発表 (2000・12)

* 九州工業大学 工学部 北九州市戸畑区仙水町 1-1

** 日本システムウエア (株) 東京都渋谷区桜丘町 31-11

*** 小松エレクトロニクス (株) 平塚市四之宮 3-25-1

* Faculty of Engineering, Kyushu Institute of Technology

** Nippon Systemware Co., Ltd.

*** Komatsu Electronics Inc.

(Received October 25, 2000)

(Revised May 9, 2001)

ら洗浄液槽の温度出力に至る無駄時間が大きくかつ変動することを意味する。またテフロン被覆管に入れた温度計を用いるためこれによる時定数も無視できない。

このような系を制御するために従来からPID制御やその変形が多く使用されている。しかしそれらの方法では様々な液体や異なる動作環境に対してその制御パラメータを調節することが非常に困難である。パラメータのオートチューニング法もいくつか提案されている²⁾がそれらは制御対象が線形であることを仮定しており、上述の非線形時変系に適用して得た値をそのまま用いることはできず、実際現場では最終的には試行錯誤により求めている。一方、非線形系や時変系を扱うロバスト制御や適応制御などの応用も考えられるが、これまでRCA洗浄のための温度制御を研究したものはなく、またこれらの応用展開に不可欠なこのシステムの熱モデルすなわち制御対象のモデルも得られていない。

そこで本論文ではまず2章でこの制御対象のモデルを構築する。このモデルは分布定数系であるRCA洗浄システムを計算の容易な集中定数系としてモデル化するとともに、洗浄液の発熱反応実験を行なうことにより発熱反応が反応次数 r の発熱反応モデルとして近似できることを示す。ここでこのモデル化の困難さと新規性について言及しておく。まず各種洗浄液の化学反応とその定量的な発熱反応を理論的に求めるアプローチは最も基本的であるが、たとえば洗浄液SPMは混合時にいくつかの発熱化学反応を生じるという知見はあるが³⁾、それらの反応の割合を調べ特定の混合比に対する定量的な発熱反応を得ることは困難であった。そこで後述の示差走査熱量計(2.3節参照)を用いる実験を行なうことにより洗浄液SPM, APM, HPMの微小体積の発熱反応を定量的には再現する反応式を同定することができた。一般には各種化学物質の混合においては理論的に非常に多くの発熱反応式が考えられるため、本実験でRCA洗浄の主要な洗浄液の反応式を同定できたことは有用であり、これは本研究で初めて得られたものである。次にこの発熱反応式を提案する洗浄システムの熱モデルに適用したが実システムの実験結果を再現することはできなかった。提案する集中定数系モデルの修正なども検討したが、試行錯誤の結果、上で得られた発熱反応式のパラメータを調整すれば洗浄システムの実験結果をうまく再現できることがわかった。これらの一連の知見は示差走査熱量計の使用や多くの試行錯誤により得られたものであり、容易には得られない新規なものである。

次に3章では洗浄システムを温度制御する適応予測制御の手法を示す。この手法は非線形かつ時変の制御対象を制御するために適応的にパラメータを同定する方法と、無駄時間が大きい系などに有効な予測制御の方法を統合したものである。ここで無駄時間が大きい系について小さなサンプリング周期で通常の離散化を行なうと制御に必要な入力ベクトルの次元が大きくなり、逆に大きなサンプリング周期では非線形時変特性をもつ洗浄システムに対しては制御の即応性に問題が生じる。そこで洗浄システムの応答が遅いことを利用する仮想

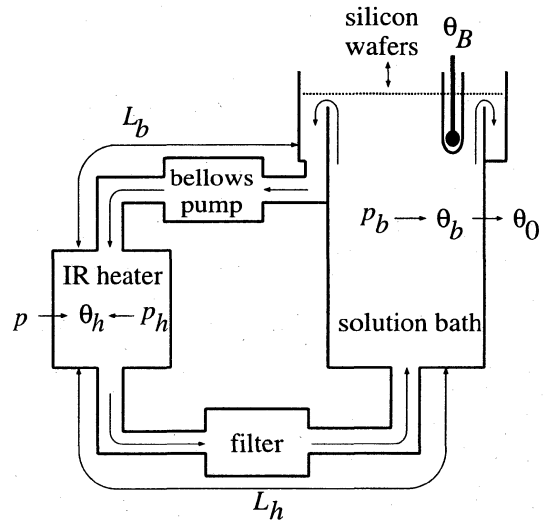


Fig. 1 Diagram of the RCA cleaning system

サンプリング法を提案する。この方法により計算に必要なメモリサイズや計算時間を減らし、かつ十分な制御性能を得ることができた。最後に4章でシミュレーションおよび実機に適用した結果を示す。

2. 洗浄システムのモデル化

ここではまず洗浄システムの構成を説明し、発熱化学反応を含む制御対象のモデルを示す。

2.1 洗浄システムの構成と洗浄行程

本洗浄システムは、洗浄槽、ポンプ、ヒータ、フィルタ、配管により構成され (Fig. 1 参照)、化学的に安定な (使用する液体に腐食されにくい) 機器が使用されている。まず入力熱源として赤外線を透明なガラスを通して液体に照射して加熱するハロゲンヒータを用いる。ハロゲンヒータを用いることにより入力電源回路と液体を分離すると同時に、液体の局所的な温度上昇を抑えかつ即応性に優れた加熱ができる。洗浄槽は石英ガラスでできた内槽と外槽からなり、液体は洗浄槽の下部より流入し、内槽から溢れて外槽に流入し再び循環する。液体が循環する配管は化学的に安定なフッ素樹脂でできており、ポンプは腐食に強いペローズ式 (蛇腹式) が使用される。さらにフィルタは配管内に溜った気体を抜いたり、洗浄により生じたゴミを除去するために設けてある。洗浄槽内の液体温度を計測する温度計は化学的に安定なテフロンで被覆したガラス管に入れる。

洗浄の行程は次の (1)~(4) の手順からなる: (1) 混合すべき液体すなわち洗浄液を生成するための原液を洗浄槽に順に流し込む, (2) ポンプを起動して洗浄液を循環させる, (3) ヒータ出力を操作量, 洗浄槽の温度計温度を制御量とする制御を開始する, (4) 制御量が設定温度に到達したら洗浄液にウエハを浸して洗浄する。

2.2 制御対象モデル

制御対象である液体温度系は本来は分布定数系であるが、

Table 1 Description of variables

p [W]	input power
p_h, p_b [W]	power by exothermal reaction at the heater and the bath
θ_h, θ_b [K]	temperature at the heater and the bath
θ_B [K]	temperature measured
θ_O [K]	temperature of the outside
V_h, V_b [m ³]	volume of the heater and the bath
L_h, L_b [m]	pipe length between the heater and the bath
t_h, t_b [s]	time lag between the heater and the bath
q [m ³ s ⁻¹]	flow rate
S [m ²]	cross sectional area of the pipes
ρ [kgm ⁻³]	density of the solution
C [cal kg ⁻¹ K ⁻¹]	thermal capacity of the solution
τ_B [s]	time constant of the thermometer
κ_O [s ⁻¹]	thermal conductivity from the outside to the bath

計算上の取り扱いが簡単な集中定数系としてモデル化し、入出力関係を近似的に求める。まず全液体をヒータ内部およびヒータから洗浄槽の入口までの液体部分（以後、ヒータ部と呼ぶ）と残りの液体部分（洗浄槽部と呼ぶ）とに分割し、各部分の温度は一樣であるとする。モデルを記述するための主な変数を Table 1 で定義するが、長さ L_h はポンプとフィルタの体積も断面積 S をもつ配管として換算し実際の配管の長さに加えたものである。また配管の体積を含むヒータ部と洗浄槽部の体積をそれぞれ $v_h = V_h + L_h S$ と $v_b = V_b + L_b S$ で表わす。すると各部の熱の出入りを考えることにより、次式が成立する。

$$v_h \rho C \frac{d\theta_h}{dt} = (-\theta_h + \theta_b(t - t_b))q\rho C + p + p_h, \quad (1)$$

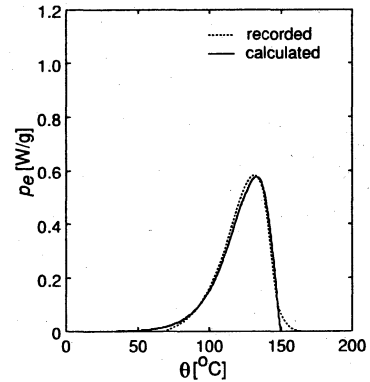
$$v_b \rho C \frac{d\theta_b}{dt} = (-\theta_b + \theta_h(t - t_h))q\rho C + (\theta_O - \theta_b)\kappa_O v_b \rho C + p_b, \quad (2)$$

$$\tau_B \frac{d\theta_B}{dt} = -\theta_B + \theta_b(t - t_B). \quad (3)$$

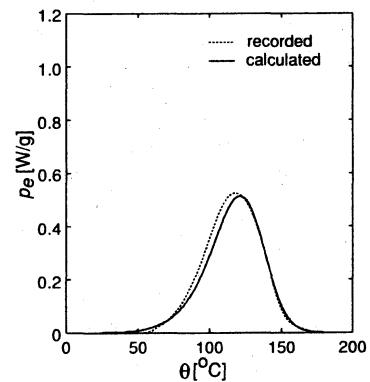
さてヒータ部と洗浄槽部の化学反応による発熱量 p_h と p_b は洗浄液により異なり、その詳細は、これまで、明らかにされてなかったが、本研究においては次節による解析を行なった。

2.3 洗浄液の発熱反応のモデル

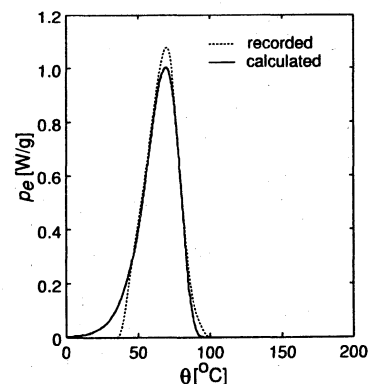
RCA 洗浄に用いる SPM, APM, HPM などの混合液は混合直後から発熱反応を伴う様々な化学反応を起こし、最終的には化学的平衡状態に落ち着く（たとえば文献⁴など参照）。一方、このような発熱反応のダイナミクスを解析する装置として示差走査熱量計（DSC; Differential Scanning Calorimetry）がある⁵。この装置は小さな密閉容器に解析しようとする液体を入れて混合し、その混合液をある速度で加熱していくときの液体の発熱量を計測することにより、発熱反応のパラメータ値を DSC の理論⁵に基づいて自動的に同定することができる。この装置を用いて、SPM, APM,



(a) For SPM ($\text{H}_2\text{SO}_4:\text{H}_2\text{O}_2=5:1$), the parameter values identified are $\ln K_o = 18.15$, $E_a = 76.85$ [kJ/mol], $r = 0.63$, $H_o = 124.6$ [J/g].



(b) For APM ($\text{NH}_3:\text{H}_2\text{O}_2:\text{H}_2\text{O}=1:1:5$), the parameter values identified are $\ln K_o = 18.19$, $E_a = 74.89$ [kJ/mol], $r = 1.19$, $H_o = 145.8$ [J/g].



(c) For HPM ($\text{HCl}:\text{H}_2\text{O}_2:\text{H}_2\text{O}=1:1:5$), the parameter values identified are $\ln K_o = 23.46$, $E_a = 78.99$ [kJ/mol], $r = 0.93$, $H_o = 181.8$ [J/g].

Fig. 2 Results of the DSC analysis. The curves recorded were obtained with raising the temperature of the solutions at 10°C/min.

HPM の発熱反応を、反応次数 r の発熱反応⁵)

$$\frac{d\alpha}{dt} = K(\theta)(1 - \alpha)^r \quad (4)$$

としてモデル化し、この式のパラメータを同定した結果を Fig. 2 に示す。なお (4) 式の α は反応率（反応した液体部分の液体全体に対する質量比）を表わし、速度定数 $K(\theta)$ は

Arrhenius の式⁴⁾ $K(\theta) = K_0 \exp(-E_a/R\theta)$ に従うとする。ここで θ [K] は液体温度, E_a [J/mol] は活性化エネルギー, $R = 8.31$ [J/mol K] は気体定数, および K_0 は頻度因子と呼ばれる定数である。また反応速度 $d\alpha/dt$ にある定数 H_0 [J/kg] を乗じたものがその時刻における単位質量当たりの発熱量 p_e [W/kg] になる。Fig. 2 の結果は各洗浄液のおおまかな発熱反応は (4) 式のモデルで近似できることを示している。

さて, (4) 式と洗浄システムにおける洗浄液の循環を考慮すると, ヒータ部と洗浄槽部における反応率 α_h と α_b は次のように変化すると考えられる。

$$\frac{d\alpha_h}{dt} = K(\theta_h)(1 - \alpha_h)^r + \frac{(\alpha_h - \alpha_b)q}{v_h}, \quad (5)$$

$$\frac{d\alpha_b}{dt} = K(\theta_b)(1 - \alpha_b)^r + \frac{(\alpha_b - \alpha_h)q}{v_b}. \quad (6)$$

ここで各式の右辺第1項は化学反応速度の瞬時値を示し, 各部分での発熱量 p_h と p_b はこれらに比例し,

$$p_h = K(\theta_h)(1 - \alpha_h)^r v_h \rho H_0, \quad (7)$$

$$p_b = K(\theta_b)(1 - \alpha_b)^r v_b \rho H_0, \quad (8)$$

になると考えられる。

以上, (1)~(3) および (5)~(8) 式が, 発熱反応を考慮した制御対象のモデルとなるが, このモデルに Fig. 2 のパラメータ値をそのまま用いても実システムの実験結果をうまく再現することはできなかった。これは実際の洗浄システムは分布定数系であり, また実システムの断熱性や実システムで使用する洗浄液の混合比などは Fig. 2 の実験とは異なることなどに起因すると考えられる。しかし (4) 式のパラメータ値を調整すると実システムの実験結果をほぼ再現することができることを次節で述べる。

2.4 制御対象モデルのパラメータ同定

上記モデルの妥当性を確かめるためパラメータの同定実験を行なった。まず洗浄液 SPM に対する実システムでの加熱実験を次の (1)~(3) の手順で行なった: (1) 液温が設定温度 (135°C) の 80% (加熱開始時の温度を 0% とする) に達するまで最大ヒータ出力で加熱し, (2) 次に液温が上昇して減少し再び 80% の温度になるまでヒータ出力を 0 とし, (3) 最後に後述の制御アルゴリズムで設定温度への制御を行なった。この結果を Fig. 3 に示す。この図の実線 p はヒータ出力 (単位はヒータの最大出力に対する百分率 p/p_{\max} [%]), 破線 " θ_B measured" は測定された液温 (単位は°C) を表わす。ここで加熱は時刻 $t = 454$ 秒から行なったが, この時刻以前に液温が約 80°C まで達しているのは硫酸と水 (過酸化水素水中の水または配管中に残っていた水) との水和熱によると考えられるものであり, 以後, 初期発熱または水和熱による初期発熱という。この初期発熱により上昇する液温は配管を水で洗浄した後などは非常に高くなるが, この初期発熱はすぐに (百秒程度で) 終了するという特性を持っており, 本研究ではこの反応のモデル化は試みていない。

次にこの結果を再現するように次の (1)~(3) の手順でパラメータ値を同定した: (1) まず Table 1 のパラメータの値を

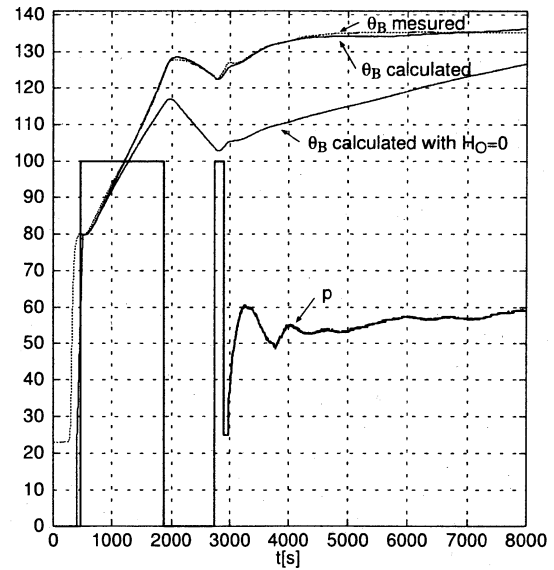


Fig. 3 Trajectories of the temperatures measured and calculated, where the percentage power p , which generated " θ_B measured", was used to obtain " θ_B calculated" and " θ_B calculated with $H_0=0$ ".

実システムの構成要素から概算して設定し, (2) 次に (4) 式に含まれるパラメータ値を Fig. 2 の値に設定し, (3) 最後に実験結果をできるだけ再現するように各パラメータを試行錯誤により変化させて調整した。Fig. 3 の実線 " θ_B calculated" は同定したパラメータを用いて再現した結果である。この図より, 同じ入力 p に対する実システムの応答とモデルの出力はほぼ一致することがわかる。なお同定された (4) 式に含まれるパラメータ値は $\ln K_0 = 16.0$, $E_a = 76.85$ [kJ/mol], $r = 0.80$, $H_0 = 74.0$ [J/g] であったが, Fig. 2 の値との違いは前述したようにパラメータ値の空間分布, 洗浄液の混合比, 熱系の断熱性などの違いによると考えられる。

さて上と同一条件で $H_0 = 0$, すなわち発熱反応がないとしたときのモデルの出力を実線 " θ_B calculated with $H_0 = 0$ " で表わす。同じ入力 p に対し, 発熱反応がある場合とない場合の温度差は 20°C 程度になる。さらにこの温度差の原因となる発熱反応の量は加熱や液体温度の履歴に依存するので, 反応時の温度制御の困難さがうかがえる。

洗浄液として SPM の他に HPM および水について, また異なる日時, 配管長, 流速などに対して, 同様の実験を行ないパラメータを同定したが, いずれもパラメータ値を適切に決定することにより, 実システムの特性に近い結果が得られることを確認した。

以上のモデルは, 実際の制御対象をエミュレート (模擬) するモデルとして, 制御パラメータの決定や制御性能の評価などに用いることができる。ここで, 制御工学の立場からはある程度は自明ではあるが, 以下のことを注意しておく。もしこのモデルを用いず実システムを用いた実験だけを行なうと, 消耗品となる洗浄液などの経費がかかる, 実験にかなり長い実時間 (制御実験 1 試行に 2 時間程度, 洗浄槽冷却

に半日程度を費やす)を要する, 手作業による洗浄液の扱いには危険が伴う, 動作条件の変動(制御開始時刻, 配管中に残っていた液量, 室温, 湿度などの変動)のため再現性のあるデータを得ることが難しい, さらに実験装置が特殊かつ高価でありどこでも行なうことはできない. このような諸問題を解決あるいは補助する意味でここで構築したモデルは非常に有用である. ただし, Fig.3からもわかるように, 実システムの実験データとモデルによる計算結果には厳密には誤差が存在するので, 実システムへの応用に際しての検討は十分行なう必要がある.

3. 適応予測制御 (APC)

筆者らは上記モデルに適用して良い結果を示したニューラルネットワークを用いる制御方法⁶⁾も開発中であるが, 現在使用中のコントローラに搭載している CPU チップには 2K バイトの RAM 領域しか確保できないという制約があり, その手法は実機には適用できていない. そこで実機に適用可能であり, かつ十分な制御性能が得られた手法の原理を以下に示す.

まず無駄時間が大きい制御対象にも有効な手法として知られている一般化予測制御 (GPC; generalized predictive controller)⁷⁾を用いるとともに, 制御対象が時変かつ非線形なので, GPC で用いられる線形係数パラメータを逐次的に最小二乗法で同定する手法(以下, 適応同定と呼ぶ)を用いた. さらに計算に必要なメモリサイズを節約するための仮想サンプリング法と, オーバershoot と定常偏差を抑えるための目標軌道を導入した. 以下, この制御法の詳細を示すが, 基本的に適応同定と予測制御を組み合わせたものなので, 適応予測制御 (APC; Adaptive Predictive Control) と呼ぶ.

3.1 離散時間モデル

前節で示した連続, 非線形かつ時変の洗浄システムをデジタル計算機を用いて離散時間で適応同定するため, まず制御対象が次の線形モデルで表わされ, そのパラメータが緩やかに変化すると仮定する. すなわち離散時刻 $k = 0, 1, 2, \dots$ の制御対象の入出力を $u(k)$ と $y(k)$ とするとき,

$$y(k) = Ax(k) + d(k) \quad (9)$$

となり, $1 \times n$ 次元の実係数行列 A は緩やかに変化するとする. ここで $d(k)$ は雑音を表わし, $x(k)$ は

$$x(k) = (1, y(k-1), \dots, y(k-n_y), u(k-1), \dots, u(k-n_u))^T \quad (10)$$

で与えられ, n_y と n_u はそれぞれ非負整数であり, ベクトル $x(k)$ の次元は $n = 1 + n_y + n_u$ となる. なおこの $x(k)$ の第 1 成分を 1 としたのは線形モデル (9) 式のバイアス項を生成するためである.

3.2 線形モデルの逐次的更新 (適応同定)

いま, (9) 式を $1 \times n$ 次元行列 M を用いて,

$$\hat{y}(k) = Mx(k) \quad (11)$$

により近似するとすると, 近似誤差の二乗和は

$$E = \sum_{i=0}^k \|y(i) - Mx(i)\|^2 \quad (12)$$

となる. この E を最小化する M は次の更新手続きにより各時刻 k において逐次的に求めることができる⁸⁾.

$$M := M + \frac{(y - Mx)x^T \Psi}{1 + x^T \Psi x}, \quad (13)$$

$$\Psi := \Psi - \frac{\Psi x x^T \Psi}{1 + x^T \Psi x}, \quad (14)$$

ここで $y = y(k)$, $x = x(k)$ であり, $:=$ は代入を表わす. また $n \times n$ 行列 Ψ の初期値は $\Psi = aI$ とし, I は単位行列, a はある程度大きな定数であり, 後述のシミュレーションでは $a = 1000$ とした. M の初期値は零行列とした.

3.3 一般化予測制御 (GPC)

GPC は現時刻を k とするとき, コスト関数

$$J = \sum_{j=N_1}^{N_2} \hat{e}^2(k+j) + \lambda_u \sum_{j=1}^{N_u} \Delta \hat{u}^2(k+j-1) \quad (15)$$

を最小化する予測入力 $\hat{u}(k+j-1)$ ($j = 1, 2, \dots, N_u$) を計算し, 制御対象への入力 $u(k) = \hat{u}(k)$ として使用する手法である. ここで第 1 項は目標軌道 $y_d(k+j)$ と予測出力 $\hat{y}(k+j)$ の差, すなわち予測される追従誤差 $\hat{e}(k+j) = y_d(k+j) - \hat{y}(k+j)$ を小さくするための項であり, 第 2 項は予測入力の変動 $\Delta \hat{u}(t+j-1) = \hat{u}(t+j-1) - \hat{u}(t+j-2)$ を抑制するための項である. いま $j = 1, 2, \dots$ に対して予測入力 $\hat{u}(k+j-1)$ を順次与えると, 予測出力 $\hat{y}(k+j)$ が

$$\hat{y}(k+j) = M\hat{x}(k+j) \quad (16)$$

により計算できるとする. ここで $\hat{x}(k+j)$ は (10) 式において, k を $k+j$ とし, その要素 $y(k+j-i)$ は $k+j-i > k$ のとき $\hat{y}(k+j-i)$ に置き換え, 要素 $u(k+j-i)$ は $k+j-i \geq k$ のとき $\hat{u}(k+j-i)$ に置き換えたものである. すると, 上のコスト関数は, GPC の手法⁷⁾を用いて,

$$J = \|y_d - G\Delta \hat{u} - y_0\|^2 + \lambda_u \|\Delta \hat{u}\|^2 \quad (17)$$

と変形することができる. ここで

$$y_d = (y_d(k+N_1), \dots, y_d(k+N_2))^T \quad (18)$$

$$y_0 = (y_0(k+N_1), \dots, y_0(k+N_2))^T \quad (19)$$

$$\Delta \hat{u} = (\Delta \hat{u}(k), \dots, \Delta \hat{u}(k+N_u-1))^T \quad (20)$$

であり, $y_0(k+j)$ ($j = N_1, N_1+1, \dots$) は時刻 k 以降の操作量 $\hat{u}(k+j-1)$ を $u(k-1)$ と等しくして計算した場合の第 $(k+j)$ 時刻における制御対象の出力である. 行列 $G \in \mathbb{R}^{(N_2-N_1+1) \times N_u}$ の第 ij 成分は $G_{ij} = g_{i-j+N_1}$ であり, g_l ($l = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots$) は $y(i) = u(i) = 0$ ($i < 0$) および $u(i) = 1$ ($i \geq 0$) としたときのこの制御対象の出力 $y(l)$ すなわち単位ステップ応答である. すると J を最小にする $\Delta \hat{u}(k)$ は

$$\Delta \hat{u} = (G^T G + \lambda_u I)^{-1} G^T (y_d - y_0) \quad (21)$$

となり, その時刻 k の操作量を $u(k) = u(k-1) + \Delta \hat{u}(k)$ として求めることができる.

3.4 仮想サンプリング法

連続時間 t における制御対象の入力 $p(t)$ と出力 $\theta_B(t)$ を離散化することを考える。まず連続モデルの (1) 式と (2) 式は無駄時間 t_h と t_b を含み、現在使用中のサンプリング周期 T よりもかなり大きい。たとえば Fig. 3 の場合は $t_h \approx t_b \approx 10$ 秒および $T = 0.25$ 秒であった。さらに主にベローズポンプを用いて洗浄液を循環させることから、この無駄時間がかなり変動することにも注意すると、離散モデル (9) 式がこのシステムの入出力関係を表現するための最も単純な十分条件のひとつは、ベクトル $\mathbf{x}(k)$ がこれらの無駄時間の和以上の時間に対応する次元を持つことである。したがって、もし通常の 0 次ホールドによるサンプリングによる離散化を行なう、すなわち $y(k-j) = \theta_B((k-j)T)$ および $u(k-j) = p((k-j)T)$ とすると、 $\mathbf{x}(k)$ が無駄時間の和 $t_h + t_b$ を含むようにするには、 $\mathbf{x}(k)$ の次元を非常に大きくしなければならない。たとえば上例では $(t_h + t_b)/T \approx 80$ となる。これは計算機のメモリを消費するとともにパラメータの同定速度を遅らせることになる。

そこでこのベクトル $\mathbf{x}(k)$ の次元を減らすため以下の仮想サンプリング法を提案する。まず、 $z(t)$ は $p(t)$ または $\theta_B(t)$ を表わし、これらは時間的に緩やかに変化するとする。さらに $T_v = K_v T (> t_h + t_b)$ を仮想サンプリング周期といい、 K_v は正の整数定数とする。いま、 $L = 0, 1, 2, \dots$ に対して、変数 z_L を考え、時刻 $t = kT = LT_v + iT$ ($i = 0, 1, \dots, K_v$) のとき、

$$z_L := \begin{cases} 0.5z(kT), & k = LK_v \\ z_L + z(kT), & LK_v < k < (L+1)K_v \\ (z_L + 0.5z(kT))/K_v, & k = (L+1)K_v \end{cases} \quad (22)$$

を計算すると、この期間における $z(kT)$ を台形公式により積分して平均した値が時刻 $kT = (L+1)T_v$ において求まる。 $z(t)$ が緩やかに変化するとすると、時刻 $kT = LT_v + iT$ において $j = 1, 2, \dots$ に対する

$$\begin{aligned} \tilde{z}(kT - jT_v) &= \left(\frac{1}{2} + \frac{i}{K_v}\right) z_{L-j} \\ &+ \left(\frac{1}{2} - \frac{i}{K_v}\right) z_{L-j-1} \end{aligned} \quad (23)$$

は $z(kT - jT_v)$ を良く近似すると考えられる (Fig. 4 参照)。すると、 $z(k-j) = z(kT - jT_v)$ とおき、すなわちベクトル $\mathbf{x}(k)$ の要素を

$$y(k-j) = \tilde{\theta}_B(kT - jT_v), \quad (24)$$

$$u(k-j) = \tilde{p}(kT - jT_v). \quad (25)$$

とおくことができる。これが仮想サンプリング法による離散化であり、この方法を用いると任意の時刻 kT において m 個の近似 $\tilde{z}(kT - T_v), \tilde{z}(kT - 2T_v), \dots, \tilde{z}(kT - mT_v)$ を得るには $m+2$ 個の変数 $z_L, z_{L-1}, z_{L-2}, \dots, z_{L-m-1}$ の値のみを記憶すれば良いことがわかる。また以下のシミュレーションでは $T_v = 80$ 秒、 $n_y = 2$ 、 $n_u = 1$ として十分な制御性能が得

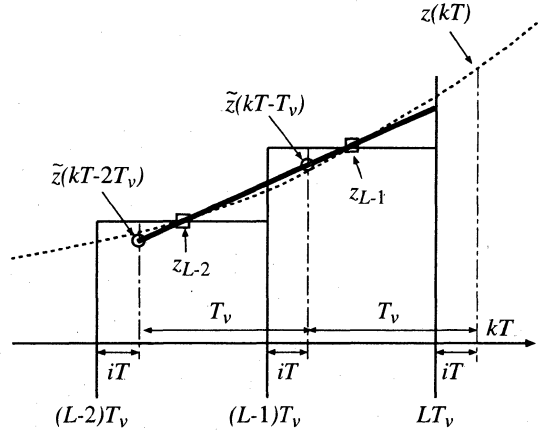


Fig. 4 Virtual sampling method. The dotted curve shows $z(t)$ and the heavy solid line segment indicates the linear approximation of $z(t)$ using z_{L-1} and z_{L-2} .

られたので、 $\mathbf{x}(k)$ の次元は $n = 1 + n_y + n_u = 4$ と非常に小さくすることができたことになる。

ところで $\mathbf{x}(k)$ の次元を減らすための別の方法としてサンプリング周期 T を大きくすることも考えられるが、その場合、制御の即応性に問題が生じることが考えられる。より詳細に SPM と水の熱モデルを用いてシミュレーション実験した結果、 T を大きくする方法は、発熱反応のない水については問題なかったが、SPM については無駄時間や温度計の時定数が変化すると最適なサンプリング周期が変化したり、オーバーシュートや振動を抑えることができなくなった⁹⁾。

3.5 目標軌道

非線形かつ時変の発熱反応に対処するため、3.2節で適応同定の手法を導入したが、この同定の速度が発熱反応に追いつかないと、オーバーシュートが大きくなる可能性がある。また洗浄槽では常に蒸発が起こっており、これによる洗浄槽の熱伝達率 κ_O や液量が時間的に変化し続け定常偏差が生じる可能性がある。そこで目標軌道 $y_d(k)$ は設定値 $r(k)$ に除々に近づいていく軌道 $y_{d1}(k)$ と、定常偏差をなくするための軌道 $y_{d2}(k)$ の和、

$$y_d(k) = y_{d1}(k) + y_{d2}(k), \quad (26)$$

$$y_{d1}(k) = c_1 y_{d1}(k-1) + (1-c_1)r(k), \quad (27)$$

$$y_{d2}(k) = y_{d2}(k-1) + (1-c_2)(r(k) - y(k)), \quad (28)$$

を用いた。ここで $c_1 = 1 - 4T/\tau_1 \approx \exp(-4T/\tau_1)$ および $c_2 = 1 - 4T/\tau_2 \approx \exp(-4T/\tau_2)$ とすると、 τ_i ($i = 1, 2$) は $\tau_i \gg 4T$ を満たす定数である。また $y_{d1}(k)$ の初期値は制御開始時刻を $k = 0$ とすると $y_{d1}(0) = y(0)$ とし、 $y_{d2}(k)$ は、ある正定数 $D (\leq |r(0) - y(0)|)$ に対してはじめて $|r(k) - y(k)| \leq D$ となった時刻を $k = k_D$ とすると、 $y_{d2}(k_D) = 0$ として計算を開始した。これは $y_{d2}(k)$ は設定値付近での定常偏差を積分する変数でありその初期値を 0 としたことに相当する。

4. シミュレーションと実機実験

4.1 準備

シミュレーションおよび実機実験を行なう前に, Fig. 3 の特性を示す SPM に対する制御対象モデルを用いて, 制御区間 8000 秒を 1 試行として合計 5 試行の制御シミュレーション実験を行なった. これにより (11) 式の離散モデル M の更新を行ない, この更新後の M を初期値として下述のシミュレーションおよび実機実験を行なった. ここで第 2 試行目以降は下述の結果と同程度の制御性能が得られたので M は第 1 試行終了時にほぼ収束したと考えられる. さらに全試行において (27) 式の τ_1 の値をある程度以上大きくしないと制御量が許容誤差範囲以上のオーバーシュートを起こした. 一方, 本手法よりも同定速度の速いニューラルネットを用いたモデル切り替え型の適応同定手法を用いた実験では τ_1 を用いなくても十分な制御性能を得ることができた⁶⁾. 以上から 3.2 で説明した適応同定は第 2 試行目で制御性能が改善されたことによりその有効性が確認できたが, 各試行においてはその適応速度が発熱反応に追いつかなかつたと言える. また以下では (10) 式のベクトル $x(k)$ の次元を $n = 4$ ($n_y = 2, n_u = 1$), および (15) 式のパラメータを $N_1 = 1, N_2 = 4, N_u = 2, \lambda_u = 0.002$ とした結果を示す. 変数 n, N_2, N_u の値を大きくすると多くのメモリが必要となるので, より小さい値でかつ十分な制御性能が得られる値をシミュレーション実験を繰り返して行ない試行錯誤的に選んだ. またサンプリング周期 $T = 0.25$ 秒は固定とし, 仮想サンプリング周期 $T_v = 80$ 秒を試行錯誤により選んだ.

4.2 シミュレーション

Fig. 3 の特性を示す制御対象モデルを制御した結果を Fig. 5(a) に示す. ここでの計算は制御を開始した $t = 454$ 秒以後のデータを用いて行ない, それ以前の図中のデータは意味がないことを注意しておく. また $t = 5000$ 秒において, 外乱として液温と液体の性質を強制的に変化させた. これはこれと同程度の温度降下 (約 4°C) がシリコンウエハを洗浄液に浸したときに生じるのでこの応答を調べるためのものである. 比較のため, 従来実機に使用していた PID コントローラを修正したものによる制御結果を同図 (b) に示す. この修正 PID はより速く液温を上昇させるために制御開始後からしばらく操作量が最大になり, その後液温が設定値のある近傍内に入ったら, PID 制御を開始するようにしてある. ここで PID の各ゲインの値はオートチューニング²⁾により求めた値ではうまく制御できず, その値から出発して試行錯誤的に求めた. 提案手法 APC による, 外乱入力前の整定時間 (制御開始時刻から液温が許容誤差範囲 $135 \pm 2^\circ\text{C}$ 以内に至るまでの時間) は 1639 秒, オーバーシュートは 0.54°C , アンダーシュートは 0.88°C であり, 修正 PID についてはそれぞれ 1639 秒, 0.06°C , 0.94°C であった. これらは許容温度範囲を考えるとほぼ同等の制御性能であると言える. しかし Fig. 5(b) からわかるように修正 PID の外乱からの復帰

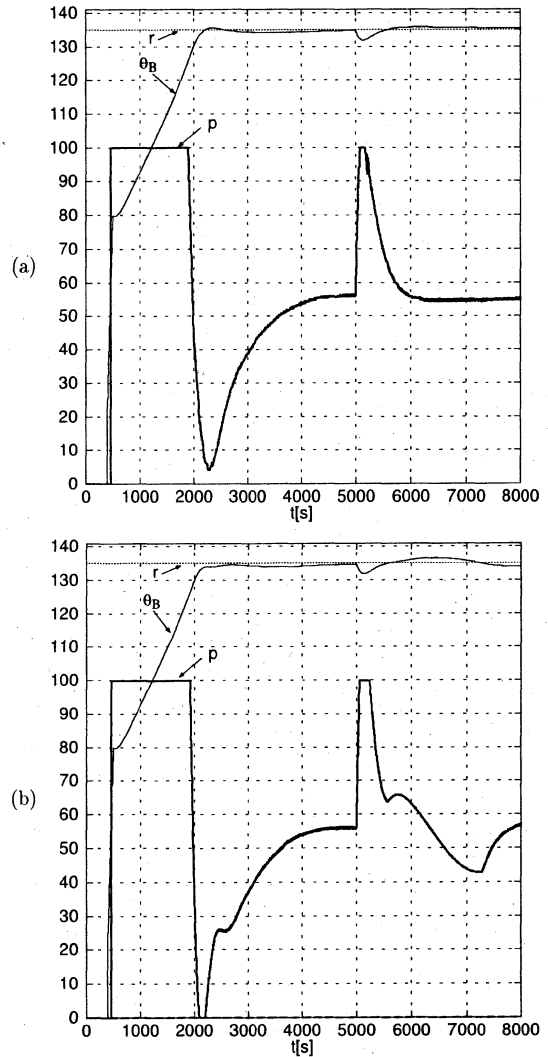


Fig. 5 Responses of the SPM controlled by (a) the APC with $\tau_1 = 2100$ and $\tau_2 = 6000$, and (b) the modified PID controller with $K_P = 0.12$, $K_I = 0.000042$, and $K_D = 0.10$.

は APC よりもかなり遅くなっている. また修正 PID の性能は動作条件によりかなり変化することもわかった. たとえば Fig. 5 においては洗浄槽の熱伝達率は $\kappa_O = 2.82 \times 10^{-4} [\text{s}^{-1}]$ であるが, これが $\kappa_O = 2.04 \times 10^{-4} [\text{s}^{-1}]$ に低下すると, 修正 PID によるオーバーシュートは 2.43°C , アンダーシュートは 2.44°C , 整定時間は 3264 秒となった. これに対し APC によるオーバーシュートは 1.76°C , アンダーシュートは 1.03°C , 整定時間は 1473 秒であった.

4.3 実機実験

提案アルゴリズムを実機に組み込み SPM に対する実験を行なった. ユーザからの要求仕様によると実機の動作環境においては, 硫酸と過酸化水素水の混合比を変更する可能性がある, 制御開始時刻がばらつく可能性がある, 配管内を洗浄する場合としない場合がありそれぞれの場合における SPM 混合直後の水和熱による初期発熱が変化する可能性がある,

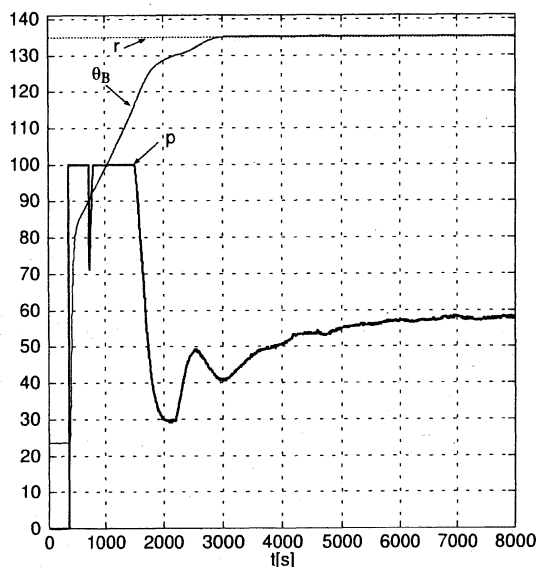


Fig. 6 Responses of the SPM controlled by the APC with $\tau_1 = 2614$ and $\tau_2 = 2400$ for the real RCA system.

などということである。さらに本実験システムは簡易のものであり室温や湿度などがあまり安定でなく、これらはモデルの熱伝達率 κ_0 (モデル簡略化のためこの値に蒸発による放熱なども含ませてある) に影響を与える。以上の理由によりこの実機実験においては、それらの変動値をモデルに設定してシミュレーションし、ある程度の安全余裕をもつ制御パラメータ値を設定した。この実験結果を Fig. 6 に示す。ここで操作量 p は制御開始後しばらくは最大値のままであるが、いったん ($t = 716$ 秒付近) 小さくなり、さらにその後また最大値に復帰している。ここで p が小さくなったのは、この実験では混合直後の水和熱の発生が終了する以前、すなわち液温が室温 (23.7°C) と同じ時に制御を開始したため、水和熱により急激に上昇する液温が目標軌道よりも高くなったからである。しかしそのまま制御開始時に設定した目標軌道を用いると整定までの時間が長くなるので、液温が目標軌道よりもある温度以上高くなるとこの水和熱の現象が生じたと判断し、目標軌道を初期化するようにした。これにより最大入力への復帰が起こったものである。液温は $\theta_B = 130^\circ\text{C}$ に到達する以前にその上昇が緩やかになりその後再び速くなっている。この緩やかになっている部分は (27) 式の目標軌道による発熱反応を抑える機構が働いたからであり、再度速くなっている部分は (28) 式の定常偏差の補正機構が働いたからである。これらの影響は $t = 2135 \sim 3000$ 秒の区間における操作量 p の小山状の変化としても現れている。

なおこの実験システムをうまく制御する修正 PID コントローラのパラメータ値を得ることはできていない。これはこの実験システムのパラメータは上述のように変動するうえ、非線形時変系に対して PID ゲインを決定する手法の確立が非常に困難であるからである。

5. おわりに

本稿では RCA 洗浄システムの熱モデルおよび適応同定と予測制御に基づく洗浄液の温度制御法を提案し、シミュレーションと実験によりその性能を確かめた。提案した熱モデルを用いたシミュレーションを行なうことにより、手作業による実液の扱いに伴う危険性や非再現性などを回避して、洗浄システムの挙動を近似的に求めることができることを述べた。一方、非線形時変系に対して線形パラメータを逐次的に同定する本稿の適応法は、初めの数試行の制御で制御性能が改善されたことによりその有効性が確認できたが、各試行においては適応速度が発熱反応に追いつかず、洗浄槽温度が許容誤差範囲以上のオーバーシュートを起こした。そこで目標軌道を徐々に設定値に近づける方法を導入したが、この方法は目標軌道を決定するパラメータの選定が重要であり、動作条件などを十分に考慮して設定する必要があった。筆者らはこのような目標軌道を用いずに適応制御する方法として、複数の線形モデルを学習し切り替えながら制御するニューラルネットの手法を開発中である⁶⁾。また計算に必要なメモリサイズを小さくするために導入した仮想サンプリング法の解析をこれまでいくらか行なっているが⁹⁾、まだ不十分であり今後さらに検討する予定である。

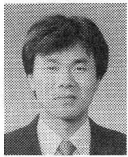
本研究を実施するに当たり、神奈川県産業技術総合研究所の内田剛史氏には DSC の実験を実施して頂きました。ここにお礼を申し上げます。また本研究の一部は小松エレクトロニクス (株) の奨学寄付金および文部省科研費 (課題番号 12680389) の援助を受けました。ここに感謝致します。

参考文献

- 1) W. Kern and D. Puotinen: Cleaning solutions based on hydrogen peroxide for use in silicon semiconductor technology, RCA Review, **31**, 187/206 (1970)
- 2) 重政, 市川: デジタルプロセス制御系の閉ループ系オートチューニング方法, 計測自動制御学会論文集, **20-7**, 592/599 (1984)
- 3) 斎藤一夫: 無機化合物, 裳華房 (1969)
- 4) F. A. Cotton and G. Wilkinson: Basic inorganic chemistry, Jhon Wiley & Sons (1976)
- 5) R. N. Rogers: Differential scanning calorimetric determination of kinetics constants of systems that melt with decomposition, Thermochemica Acta, **3**, 437/447 (1972)
- 6) S. Kurogi, T. Nishida, T. Sakamoto, K. Ito and M. Mimata: A simplified competitive associative net and a model-switching predictive controller for temperature control of chemical solutions, ICONIP 2000, **2**, 791/796 (2000)
- 7) D. W. Clarke and C. Mohtadi. Properties of generalized predictive control, Automatica, **25-6**, 859/875 (1989)
- 8) 谷萩隆嗣: デジタル信号処理の理論 3, コロナ社 (1986)
- 9) 信友宏樹: 仮想サンプリング周期を用いる温度制御, 九州工業大学工学部卒業論文 (2000)

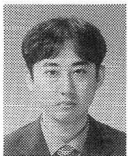
[著者紹介]

黒木 秀一 (正会員)



1980年九州工業大学工学部電気工学科卒業、82年東京工業大学大学院総合理工学研究科システム科学専攻修士課程修了、85年同大学院総合理工学研究科システム科学専攻博士課程修了、同年九州工業大学工学部制御工学科助手を経て91年同助教授。主にニューラルネットの研究に従事。工学博士。日本神経回路網学会、電子情報通信学会などの会員。

西田 健 (学生会員)



1998年九州工業大学工学部設計生産工学科卒業、99年同大学大学院工学研究科博士前期課程修了(設計生産工学専攻)、同年同博士後期課程に進学し現在に至る。主にニューラルネットによるパターン認識の研究に従事。

信友 宏樹



2000年九州工業大学工学部設計生産工学科卒業、同年同大学大学院工学研究科博士前期課程に進学し現在に至る。主にニューラルネットによる温度制御の研究に従事。

坂本 貴子



1998年九州工業大学工学部設計生産工学科卒業、2000年同大学大学院工学研究科博士前期課程修了(設計生産工学専攻)、同年日本システムウエア(株)入社。

三股 充



1980年九州工業大学工学部電気工学科卒業、同年(株)小松製作所入社、現在、小松エレクトロニクス(株)機器事業部機器開発部機器開発グループ所属。

伊藤 勝美



1973年小松エレクトロニクス(株)入社。現在、機器事業部機器開発部所属。