

基于动态 MANCOVA 的混合制程虚拟测量算法

潘天红, 杨一力

(江苏大学 电气信息工程学院, 江苏 镇江 212013)

摘要: 在晶圆/液晶面板等批次加工过程中, 产品质量的及时估计与品质管制是提高产能和降低成本的有效途径. 针对“少量多样”的混合制程, 利用逐步回归算法挑选该制程的关键变量, 引入产品的效益因子, 建立混合制程的虚拟测量模型; 为克服系统扰动对模型精度的影响, 以产品效益因子为状态量建立该制程的状态方程, 利用 Kalman 滤波器递归估计模型参数得到动态的 MANCOVA 模型; 最后通过某湿式蚀刻制程的工程应用验证了该算法的有效性.

关键词: 多变量共变异数分析; 卡尔曼滤波算法; 混合制程; 虚拟测量

中图分类号: TP273

文献标志码: A

Virtual metrology based on dynamic MANCOVA for high-mixed manufacturing process

PAN Tian-hong, YANG Yi-li

(School of Electrical and Information Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang 212013, China. Correspondent: PAN Tian-hong, E-mail: thpan@ujs.edu.cn)

Abstract: In the semiconductor/TFT-LCD manufacturing industry, the timely quality estimation and control of products are the key solutions for the throughput improvement and cost reduction. Therefore, a virtual metrology model is present for high-mixed manufacturing processes with variety products under small quantity. By using the stepwise regression, the key variables are selected from the process variables monitored by the fault detection & classification(FDC) system. Then, combined with the product-effect factors, the virtual metrology model is built for multi-products by using the analysis of variance(ANOVA) algorithm. To reduce the disturbance effect, a state estimation method based on ANOVA is developed to estimate the relative states of each product. The method is formulated in the form of a recursive state estimation by using the Kalman filter. Numerical simulations are implemented by using practical production data from a wet etching process of TFT-LCD industry. The results show that proper variable selection and dynamic MANCOVA can improve the precision of prediction models effectively.

Key words: multivariate analysis of covariance(MANCOVA); Kalman filter algorithm; high-mixed manufacturing processes; virtual metrology

0 引言

晶圆和液晶面板厂商都采用统计过程控制技术(SPC)监控生产过程,并由产品质量的例行抽样检测和机台预防性维护来提高生产制程的稳定性,改善加工产品的合格率.然而,产品的抽样检测都是在相关制程完成之后进行的,当生产制程出现异常状况时,极有可能造成大量的不合格产品,从而增加生产成本和降低系统产能.为此,产品品质的测量时延与品质及时估计,是当前晶圆与液晶面板厂商迫切需要解决

的问题之一.

虚拟测量技术(VM)为解决这一问题提供了一种有效的手段.它利用故障侦测与分类系统(FDC),结合数据挖掘技术,建立待加工产品的品质预测模型,实现对产品质量的在线估计与品质监控,从而降低废片率,提高制程的产能.正是由于虚拟测量技术的显著优点,近年来受到人们的广泛关注,并出现了大量的虚拟测量算法^[1].

随着高新技术的发展与企业的生产需求,晶圆加

收稿日期: 2013-07-13; 修回日期: 2014-02-24.

基金项目: 国家自然科学基金项目(61273142); 江苏省自然科学基金项目(BK2011466); 江苏省六大人才高峰项目(2012-DZXX-045); 江苏省高校优势学科建设工程项目(PAPD).

作者简介: 潘天红(1974-),男,教授,博士生导师,从事半导体制程的批间控制设计与虚拟测量算法等研究; 杨一力(1988-),男,硕士生,从事半导体制程的批间控制算法的研究.

工等批次制程的生产模式已由单一产品的生产模式发展为多产品共线形式,亦即:同时在线加工的产品有很多种,且由于生产机台昂贵驱使工程师将生产机台的利用极大化,尽可能地降低机台的空闲时间,所以同一种产品可能在不同机台上加工,同一台生产机台又会加工多种产品,这种产品规格与生产机台种类的组合被称作混合制程^[2-3].理论上,可以为每一种规格产品建立一个虚拟测量模型,但由于混合制程待加工产品“少量多样”的特点,基于线程的建模方法会导致模型数量过多,难以维护;且各种产品加工频率都不相同,对于一些加工频率较低的产品,其模型会由于缺乏建模数据而导致性能不佳.

本文借助于统计学理论,提出一种基于动态多变量共变异数分析(d-MANCOVA)的混合产品虚拟测量模型.首先采用标准逐步回归分析算法^[4],挑选出与品质变量密切相关的关键过程变量,代表当前加工过程的变异信息;然后,引入“产品效益因子”,利用MANCOVA方法^[5]建立多种不同规格的产品预测模型,并利用Kalman滤波算法^[6]及时更新模型参数,克服系统干扰对模型的影响,提高模型的预测精度;最后以一个实际的生产过程来验证本文算法的有效性.

1 虚拟测量算法

目前已有的虚拟测量算法都是假设生产线上只有单一种类的产品(product)被加工,但是在实际的半导体/液晶面板工厂的生产线上,同一种制程中,同时有很多种不同产品在不同机台(tool)上生产,产品种类与生产机台种类的组合称为线程(thread)^[7],如图1所示.

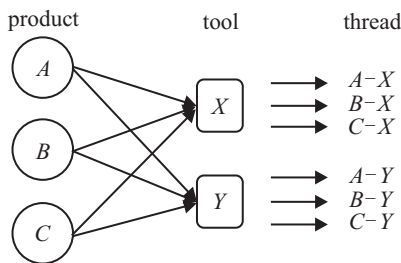


图1 混合制程产品加工 thread 示意

如前所述,基于线程的虚拟测量算法存在诸多缺陷,对此,本文结合MANCOVA算法,提出一种新的混合制程虚拟测量算法.

首先,假设某一生产机台同时加工 J 种规格产品,其产品质量参数可由如下方程表示:

$$y_j[i] = f(x_1[i], x_2[i], \dots, x_M[i]). \quad (1)$$

其中: $y_j[i]$ ($j = 1, 2, \dots, J$) 为在第 i 批次加工 $\#j$ 产品的品质参数, $j[i]$ 表示在 i 批次所加工 $\#j$ 种规格产品

的代号; $x_m[k]$ ($m = 1, 2, \dots, M$) 为FDC系统所侦测的过程变量; f 为未知的品质函数.

由于晶圆/玻璃基片加工是一个高精密的制造过程,FDC系统侦测的过程变量有很多(维度很高),且大多数过程变量的控制很精细(制程变异很小),导致大部分过程变量对品质参数的影响不显著.为此,有必要剔除次要过程变量,在保证计算精度的前提下有效地减少待定系数,提高计算效率.常用的算法有数据压缩(如:PCA、PLS、CCA等)和变量筛选(如stepwise regression)等.本文采用逐步回归方法挑选出影响品质的关键变量.即依据解释能力的大小,逐个检验每一个变量的影响,将对品质参数有贡献的变量挑选出来,同时与已选入模型的变量进行比对,删除影响不明显的变量.如此反复挑选与剔除,直到回归方程和系统均为显著为止^[4].

这样,从原始数据集 $\Omega = \{x_1[i], x_2[i], \dots, x_M[i]\}$ 中挑选出与品质参数密切相关的关键变量 $\Omega^s = \{x_1^s[i], x_2^s[i], \dots, x_P^s[i]\}$,得到回归模型如下:

$$\begin{cases} \hat{y}_{j[i]}^s = \beta_0 + \beta_1 x_1^s[i] + \beta_2 x_2^s[i] + \\ \dots + \beta_P x_P^s[i], \\ e[i] = y_{j[i]} - \hat{y}_{j[i]}^s. \end{cases} \quad (2)$$

其中: $y_{j[i]}$ 为第 i 批次加工第 $\#j$ 种规格产品的品质参数物理测量值; $\hat{y}_{j[i]}^s$ 为其对应的估计值; $x_1^s[i], x_2^s[i], \dots, x_P^s[i]$ 为挑选的关键变量($P < M$,上标 s 表示挑选后的关键变量); $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_P$ 为逐步回归模型的回归系数; $e[i]$ 为品质参数测量值与估计值的误差.

由于 J 种产品的规格不尽相同,且加工频率也有差异,其中,量少产品因抽样检测频率过低,使模型(2)会因缺少建模数据而导致预测精度较低($e[i]$ 较大).实际上,模型(2)的误差 $e[i]$ 可视为不同规格产品的产品效应因子^[9],可利用变异数分析方法(ANOVA)来分析混合制程的加工过程,实现对某一加工机台的统一建模,即

$$e[i] = \mu + \tau_{j[i]}[i]. \quad (3)$$

其中: μ 为所有 J 种规格产品的均值; τ_j 为第 j 种规格产品的产品效应因子,其满足ANOVA约束条件 $\sum_{j=1}^J \tau_j = 0$.

根据批次制程的特性,式(3)可写成如下形式:

$$E = \begin{bmatrix} e[1] \\ e[2] \\ \vdots \\ e[n] \end{bmatrix} =$$

$$Z^T \cdot \alpha = \begin{bmatrix} 1 & \delta_{1[1]}[1] & \cdots & \delta_{J-1[1]}[1] \\ 1 & \delta_{1[2]}[2] & \cdots & \delta_{J-1[2]}[2] \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \delta_{1[n]}[n] & \cdots & \delta_{J-1[n]}[n] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu \\ \tau_1 \\ \vdots \\ \tau_{J-1} \end{bmatrix} \quad (4)$$

其中 $\delta_{j[i]}[i]$ 为克罗内克积, 且满足

$$\delta_{j[i]}[i] = \begin{cases} 1, & j[i] = j \text{ and } j < J; \\ 0, & j[i] \neq j \text{ and } j < J; \\ -1, & j[i] = J. \end{cases} \quad (5)$$

因同一加工机台在每一个第 i 生产批次, 只能有一个产品在线, 故有

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{J-1} \delta_{j[i]}[i] = 1, \\ \sum_{j=J} \delta_{j[i]}[i] = -J + 1. \end{cases} \quad (6)$$

由最小二乘辨识算法可得 J 个产品的效益因子

$$\alpha = (ZZ^T)^{-1}(ZE). \quad (7)$$

2 动态 MANCOVA 模型

尽管模型 (7) 能辨识出产品效益因子, 但在实际的混合制程中, 机台的很多特征数据都存在时间延续性(动态), 如机台老化等. 为适应晶圆/液晶面板的动态加工过程, 克服系统的非线性与未知的噪声干扰, 本文提出了动态 MANCOVA 模型.

首先, 将模型 (7) 用状态方程表示, 即

$$\begin{cases} \alpha[i] = H\alpha[i-1] + \omega[i], \\ E[i] = Z^T\alpha[i] + v[i]. \end{cases} \quad (8)$$

其中: $\omega[i]$ 和 $v[i]$ 为零均值的高斯白噪声, 其协方差矩阵分别为 Q 和 R ; H 为 $J \times J$ 转换矩阵(单位阵).

式 (8) 的观测矩阵为

$$O = (Z^T, Z^T H, Z^T H^2, \dots, Z^T H^{J-1})^T. \quad (9)$$

引理 1 模型 (8) 的输出矩阵 Z 满足约束 (5), 有 O 满秩, 即状态 α 可观测.

证明 在式 (9) 中, H 为单位阵, 因此观测矩阵 O 的秩等同于输出矩阵 Z . 由方程 (4) 的克罗内克积的特性可知, Z 的秩为 J , 即观测矩阵 O 满秩. \square

根据 Kalman 滤波算法, 若已知模型 (8) 在第 $(i-1)$ 时刻的状态 $\alpha[i-1]$ 和其协方差矩阵 $P[i-1]$, 则可由系统的信息估计出第 i 时刻的状态 $\alpha[i]$ 与协方差矩阵 $P[i]$, 即

$$\begin{cases} \alpha[i] = H\alpha[i-1], \\ P[i] = HP[i-1]H^T + Q. \end{cases} \quad (10)$$

如果抽样检测得到加工产品的型号 j 、质量数据

$y_{j[i]}[i]$ 和相应 FDC 系统的过程数据 x , 则模型 (8) 的状态与其方差可由下式更新:

$$\begin{cases} \alpha[i] = \alpha[i-1] + P[i](Z[i])^T \Phi[i]^{-1} \times \\ \quad (E[i] - (Z[i])^T \alpha[i-1]), \\ P[i] = (I - P[i-1](Z[i])^T (\Phi[i] - \\ \quad 1)^{-1} Z[i]) P[i-1], \\ \Phi[i] = (Z[i])^T P[i] Z[i] + R, \\ E[i] = y_{j[i]}[i] - B^T x^s. \end{cases} \quad (11)$$

引理 2 模型 (8) 在引理 1 的条件下, 有局部稳态 Kalman 滤波器. 即 Kalman 滤波器估计的误差是有界的, 模型 (8) 的状态收敛.

引理 2 的证明参见文献 [8], 此处略.

综合式 (2)、(4) 和 (8), 混合制程的虚拟测量模型可表示为

$$\begin{aligned} \hat{y}_{j[i]}[i] &= B^T x^s + (Z[i])^T \alpha[i-1]; \\ \text{s.t. } B &= [\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_P]^T, \\ x^s &= [1, x_1^s[i], x_2^s[i], \dots, x_P^s[i]]^T. \end{aligned} \quad (12)$$

3 实例验证

以某 TFT-LCD 面板厂的蚀刻混合制程为例, 验证本文虚拟测量算法的有效性. 该制程的工艺与流程示意如图 2 所示, 这是一个典型的湿式蚀刻过程, 其结构由酸液循环系统和冲洗蚀刻系统组成, 通过蚀刻剂与待蚀刻材料发生化学反应, 去除没有被光阻剂覆盖及保护的薄膜, 从而将光罩图案转移到薄膜上. 在此过程中, 蚀刻后的线宽(CD 值)受到诸多因素的影响, 例如: 蚀刻剂的类型(CH₃COOH、HNO₃、H₃PO₄等), 蚀刻时间, 蚀刻酸液的温度, 蚀刻酸液的喷洒压强, 蚀刻剂的流速和消耗率等.

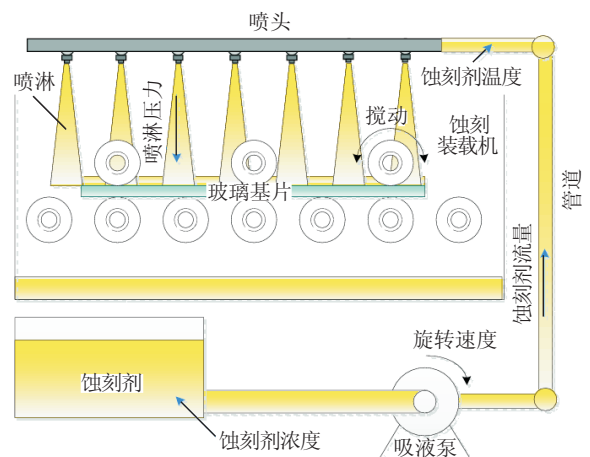


图 2 湿式蚀刻制程示意

在该制程中, 总共加工 94 096 个玻璃基片, 涵盖 6 种规格的产品(其中: 4 种 24 寸的玻璃基片, 一种

32 寸的玻璃基片, 一种 42 寸的玻璃基片), 即 $J = 6$, 抽样测量了 674 片. 由 FDC 系统侦测整个混合制程的过程变量^[9], 经过数据逐步回归分析和与现场工程师讨论分析可知, 当调整蚀刻剂的喷洒流量、蚀刻温度、蚀刻的时间以及喷洒强度时, CD 测量值 y 会随之变动, 因此, 该制程有 4 个关键变量, 即 $P = 4$, 其挑选过程如表 1 所示.

表 1 逐步回归算法的结果 %

	逐步回归算法步骤			
	x_1	x_1, x_2	x_1, x_2, x_3	x_1, x_2, x_3, x_4
R^2	18.53	27.41	35.32	36.43
R_{adj}^2	18.28	27.08	34.94	35.95

由表 1 可知, 若仅依据关键变量建立虚拟测量模型, 则其解释能力较弱 (仅有 35.95%). 为此, 本文借助于 MANCOVA 模型, 并利用 Kalman 滤波算法逐批次更新产品的效益因子 $\alpha[i]$, 以提高虚拟测量模型的预测能力, 其结果如表 2 所示. 这里采用两个性能指标衡量虚拟测量模型的性能: 平均绝对百分比误差 (MAPE) 和最大相对估计误差 (MREE), 即^[9]

$$\begin{cases} \text{MAPE} = \frac{100}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{y_{j[i]}[i] - \hat{y}_{j[i]}[i]}{y_{j[i]}[i]} \right| \%, \\ \text{MREE} = \max_{i=1, \dots, n} \left| \frac{y_{j[i]}[i] - \hat{y}_{j[i]}[i]}{y_{j[i]}[i]} \right| \times 100\%. \end{cases} \quad (13)$$

其中: $y_{j[i]}[i]$ 为第 i 批次加工第 $\#j$ 种规格产品的品质参数物理测量值, $\hat{y}_{j[i]}[i]$ 为其对应的估计值.

表 2 d-MANCOVA 算法的结果 %

型号	固定模型		逐批次更新		逐日更新	
	MAPE	MREE	MAPE	MREE	MAPE	MREE
#1	1.08	7.51	0.99	5.09	1.02	5.99
#2	1.89	3.94	0.87	2.34	0.89	2.70
#3	1.78	6.36	0.80	4.18	1.33	5.69
#4	1.85	5.23	0.89	4.20	0.96	4.58
#5	1.48	4.52	0.52	3.02	0.69	3.32
#6	1.67	6.99	0.74	4.76	0.79	5.50

由表 2 可知, 采用逐批次更新机制的 d-MANCOVA 虚拟测量模型具有较高的预测精度, 在 6 种产品中, 品质参数估计值的最大误差 MAPE 和 MREE 分别为 0.99% 和 5.09%. 为进一步显示 d-MANCOVA 算法的性能, 以抽样 674 片玻璃基片的六分之一为建模数据, 得到静态的 MANCOVA 虚拟测量模型, 并以剩余玻璃基片进行交叉验证, 其结果如表 2 所示. 由此可见, 静态的 MANCOVA 性能较差.

为模拟实际的加工过程, 验证 d-MANCOVA 模型的预测能力, 本文按着加工时间的顺序, 每天选择

1 片玻璃基片更新式 (10) 和 (11) 的 α 与协方差矩阵 P , 用 VM 模型估计该日剩余产品的品质数据, 其结果如表 2 和图 3 所示. 图 3 中 \bigcirc 为抽样的样本点, 总共 84 片, 用来估计剩余 590 片玻璃基片的品质. 相对于逐批次更新机制, 逐日更新机制的精度略有降低, 但在可接受的范围内.

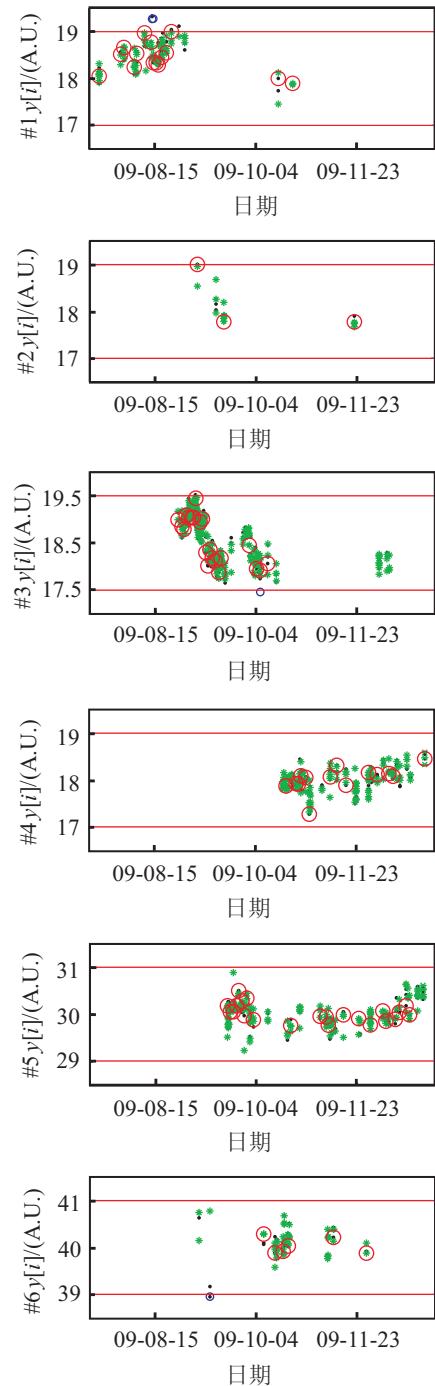


图 3 d-MANCOVA 算法的估计结果

本文提出的虚拟测量模型, 不仅可以用于估计待加工产品的质量, 也可用于监控所有产品的品质, 及时预估出不合格品, 从而降低成本, 减少后续制程的费用. 以 10 月份的 #5 玻璃基片的品质为例, 其效果如图 4 所示, 其中的两条虚线分别代表该产品的上下

限. 若预估产品的品质值超出限定值, 则选择该产品进行物理测量, 以验证其是否为不合格品, 从而降低物理测量的频率, 减少测量费用.

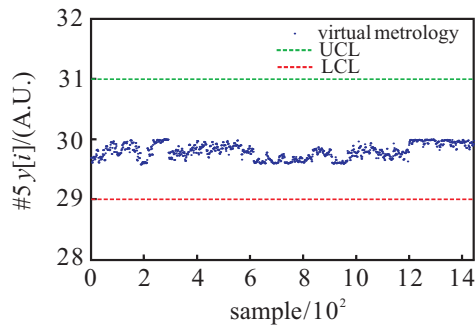


图 4 #5 产品的 d-MANCOVA 算法监控结果

4 结 论

在日益严峻的竞争中, 生产厂商所面临的最大挑战是如何提高产品的合格率, 以及降低生产成本. 本文针对多产品的半导体/TFT-LCD 混合生产过程, 提出了一种基于动态多变量共变异数分析的虚拟测量模型的建模算法. 首先使用逐步回归方法对 FDC 系统所侦测的过程变量进行变量选择, 从而降低虚拟测量模型的输入空间维数, 克服输入变量的共线性与相关性; 然后, 使用变异数分析算法对各个产品的效益因子进行估计, 建立了多产品的虚拟测量模型; 最后在获取混合制程加工信息的基础上, 使用 Kalman 滤波器及时估计产品的效益因子, 克服了系统未知扰动对估计精度的影响. 通过对某 TFT-LCD 厂湿式蚀刻过程的生产数据分析, 验证了本文算法的有效性.

参考文献(References)

- [1] Lynn S A, Ringwood J, MacGearailt N. Global and local virtual metrology models for a plasma etch process[J]. IEEE Trans on Semiconductor Manufacturing, 2012, 25(1): 94-103.
- [2] Ma M D, Zeng X L, Duan G R. A survey of run-to-run control algorithms for high-mix semiconductor

manufacturing processes[C]. Proc of 2011 Chinese Control Conf(CCC2011). Yantai, 2011: 5474-5479.

- [3] Lee W C, Kuo T W, Ma C T. Combined product and tool disturbance estimator for the mix-product process and its application to the removal rate estimation in CMP process[J]. Int J of Precision Engineering and Manufacturing, 2012, 13(4): 471-481.
- [4] 王心哲, 韩敏. 基于变量选择的转炉炼钢终点预报模型[J]. 控制与决策, 2010, 25(10): 1589-1592. (Wang X Z, Han M. Variable selection based BOF endpoint prediction model[J]. Control and Decision, 2010, 25(10): 1589-1592.)
- [5] Pan T H, Sheng B Q, Wong D S H, et al. A virtual metrology system for predicting end-of-line electrical properties using a MANCOVA model with tools clustering[J]. IEEE Trans on Industrial Informatics, 2011, 7(2): 187-195.
- [6] 杨文, 侍洪波, 汪小帆. 卡尔曼一致滤波算法综述[J]. 控制与决策, 2011, 26(4): 481-488. (Yang W, Shi H B, Wang X F. A survey of consensus based Kalman filtering algorithm[J]. Control and Decision, 2011, 26(4): 481-488.)
- [7] Chang C C, Pan T H, Wong D S H, et al. A G&P EWMA algorithm for high-mix semiconductor manufacturing processes[J]. J of Process Control, 2011, 21(1): 28-35.
- [8] 张鹏, 齐文娟, 邓自立, 等. 协方差交叉融合鲁棒 Kalman 滤波器[J]. 控制与决策, 2012, 27(6): 904-908. (Zhang P, Qi W J, Deng Z L, et al. Covariance intersection fusion robust steady-state Kalman filter[J]. Control and Decision, 2012, 27(6): 904-908.)
- [9] 盛碧琦. 半导体/TFT-LCD 制程统计建模与批间控制研究[D]. 镇江: 江苏大学电气信息工程学院, 2012. (Sheng B Q. Research on statistical modeling and run-to-run control of semiconductor/TFT-LCD manufacturing processes[D]. Zhenjiang: School of Electrical Information & Engineering, Jiangsu Univeristy, 2012.)

(责任编辑: 李君玲)