

Д. т. н. Ю. А. ДОЛГОВ

Молдова, г. Тирасполь, Приднестровский госуниверситет
им. Т. Г. Шевченко
E-mail: dolax@mail333.com

Дата поступления в редакцию
12.01 2004 г.

Оппонент к. т. н. О. Л. СМЕРНОВ
(ГУАП, г. С.-Петербург)

ВЫЯВЛЕНИЕ РЕЗЕРВОВ ПРОИЗВОДСТВА МЕТОДАМИ СТАТИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПО ПАССИВНЫМ ДАННЫМ

Предложенные методы позволяют использовать цеховую контрольно-измерительную информацию для получения модели конкретного технологического процесса (операции).

Необходимость массового (крупносерийного) выпуска многономенклатурных однотипных изделий (например, интегральных микросхем) вынуждает промышленность прибегать к гибким автоматизированным производствам с групповым характером технологии. Однако из практики известно, что подобные производства не всегда эффективно используют сырьевые и энергетические ресурсы, могут иметь достаточно низкий процент выхода годных изделий при существенной неоднородности их параметров внутри одной партии, межоперационный контроль может быть малоэффективен — как из-за отсутствия подходящего метода, так и вследствие необъективной системы выбора контролируемых параметров, и т. п. Для уменьшения этих и других недостатков требуется управление технологическим процессом, которое будет наиболее эффективным лишь на основе математического моделирования, базирующегося на использовании накопленной контрольно-измерительной информации, полученной с помощью эффективного метода контроля по количественному признаку для конкретных типов изделий, изготовленных с помощью конкретного технологического процесса.

Методы математического моделирования, рассмотренные в большинстве работ на эту тему (например [1]), справедливо указывают на громадные преимущества свертки информации в виде математической модели, которая не только позволяет исследовать малознакомое явление (кибернетический подход к объекту как к «черному ящику»), но и прогнозировать его поведение в достаточно обширной области факторного пространства. К таким методам относится широко известный полный факторный эксперимент и множество других, являющихся дальнейшим его развитием.

Помимо чисто статистических предпосылок, все эти методы имеют общие черты: заранее созданный план эксперимента, который предусматривает изменение любого фактора по воле экспериментатора в необходимых пределах и в любых сочетаниях. Такое активное воздействие на входные показатели «чер-

ного ящика» с целью исследования реакции выходного показателя вполне уместно и допустимо в лабораторных условиях.

Однако нередко случается, когда объект изучения характеризуется множеством показателей, которые можно измерить и зафиксировать, но нельзя произвольно изменять. Такие задачи встречаются при исследовании конкретных технологических процессов производства изделий, показателей состояния организма людей, химических и физико-механических показателей сельскохозяйственной продукции и т. п. Так, при поточном производстве изделий съем данных непосредственно в цехе исключает любые раскочки производственных факторов больше поля допуска. Чаще всего экспериментатор вынужден ограничиваться уже имеющейся информацией, полученной в ходе пооперационного контроля при прохождении изделий по цепочке технологического процесса.

В этих случаях приходится прибегать к пассивному эксперименту.

Под *пассивным экспериментом* понимают наблюдение и фиксацию числовых значений параметров (факторов) и целевой функции (функций) технологического процесса или другого объекта исследования при его естественном ходе — без искусственного вмешательства экспериментатора.

Под *результатом пассивного эксперимента* понимают таблицу, строки которой представляют собой конкретное числовое значение целевой функции при конкретном числовом наборе факторов, а столбцы — числовые значения каждого фактора в отдельности, т. е. выборки факторов определенного объема. Такая таблица, как правило, является результатом длительных контрольных измерений выходного показателя качества однородной продукции и сопутствующих ему факторов, например, режимов технологических операций или параметров самого изделия на предшествующих операциях.

Таблица пассивного эксперимента представляет собой основу для решения достаточно сложной в теоретическом и практическом планах задачи по извлечению из нее скрытой информации, конечная цель которой — получение математической модели исследуемого объекта в виде уравнения многомерной регрессии. Эти трудности обусловлены следующими обстоятельствами.

Во-первых, никакого искусственного изменения (управления) факторов в достаточно широких пределах нет, а имеет место лишь естественное производственное варьирование, как правило, в пределах допуска на фактор, т. е. сравнительно малое. Это озна-

часть, что изменение целевой функции может быть также небольшим, и чтобы отличить его от шумовых флюктуаций, необходимо иметь достаточно длинную таблицу, в которой возможный эффект воздействия конкретного фактора на целевую функцию проявился бы в полной мере. Опытным путем установлено, что таблица результатов пассивного эксперимента будет достаточно длинной, если на каждый исследуемый в ней фактор приходится 10—15 строк, но не более 350 строк всего, т. к. в силу неизбежной, хотя и очень слабой, корреляции при дальнейшем увеличении объема выборки будет возрастать ошибка результата [2, с. 43].

Во-вторых, при составлении первоначального списка факторов у исследователя нет информации о конкретном влиянии каждого фактора на целевую функцию. Исследования показали, что, как правило, таблицы исходных данных представляют собой так называемые сверхнасыщенные планы, часть факторов которых не влияет на целевую функцию и, в конце концов, уйдет в шум эксперимента. Отсев таких факторов может производиться на основе объективных (например, метод случайного баланса) или субъективных (разные методы экспертных оценок) [3] методов, в результате чего размерность факторного пространства сокращается в 2—5 раз без существенной потери информации.

В-третьих, в первоначальном списке факторы могут быть сильно коррелированы между собой. Естественно, что каждая пара таких факторов должна быть разбита, т. е. один из факторов должен быть отброшен как не дающий дополнительной информации в будущей модели, а другой оставлен для дальнейшей работы. Наиболее подходящим для этого методом является метод корреляционных плеяд, описанный в [4]. При этом размерность факторного пространства сокращается еще в 2—5 раз без существенной потери информации.

В результате получается таблица некоррелированных (точнее, слабокоррелированных) данных, которая и является исходной для любых методов математического моделирования. Обработка такой таблицы может производиться несколькими методами. Наиболее удачным из них является модифицированный метод случайного баланса (ММСБ), т. к. хорошо работает в условиях гетероскедастичности (при неравных дисперсиях), самоочищается от помех в каждой строке плана на каждом этапе расчетов [3].

Модифицированный метод случайного баланса (ММСБ)

Требование активного эксперимента во всех факторных планах связано с желанием получить точки факторного пространства, расположенные в вершинах гиперкуба, вписанного в гиперсферу определенного радиуса, тем самым равномерно охватить базовую точку (центр исследования) и получить возможно меньшую дисперсию оценок коэффициентов регрессии. Поэтому таблицу экспериментальных данных, полученных при пассивном эксперименте, можно рассматривать как таблицу координат беспорядочно расположенных точек факторного пространства и откликов целевой функции в этих точках. Естественно, что все такие точки не могут лежать в вершинах гиперкуба или хотя бы на гиперсфере одного радиуса, однако с приемлемой ошибкой можно выбирать некоторые из них. При этом бессмысленно пытаться отыскать в таблицах экспериментальных данных точные координаты вершин гиперкуба, и даже если таковые найдутся по одному фактору, то по другим факторам они не совпадут с нужными значениями. Для получения приемлемого плана эксперимента предлагается следующий прием.

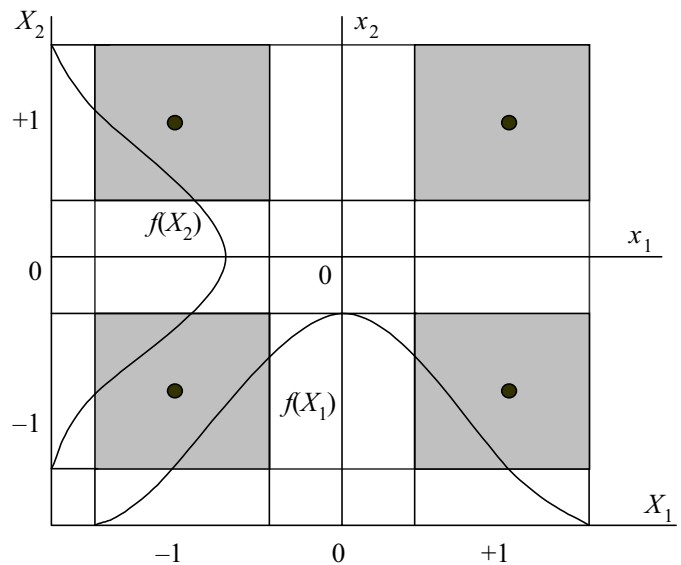


Схема преобразования координат факторов

Любые факторные планы, в том числе ММСБ, одним из предварительных этапов в планировании имеют переход от координат с абсолютными единицами измерения факторов к координатам с относительными единицами, где единичной мерой служит достаточно произвольно выбранный шаг ΔX_k , свой для каждого фактора. Тем самым достигается преобразование координат таким образом, что в факторном пространстве получают концентрические гиперсферы, а не другие фигуры, а выбор вершин гиперкуба в качестве точек проведения активного эксперимента автоматически обеспечивает выбор только одной гиперсферы.

В случае пассивного эксперимента каждый фактор X_k имеет в таблице экспериментальных данных целый диапазон значений от X_{kmin} до X_{kmax} и, следовательно, может быть рассмотрен как выборка с центром \bar{X}_k . По-видимому, разбиение этого диапазона на две части (т. е. все $X_k > \bar{X}_k$ относятся к области $x_k = +1$, а все $X_k < \bar{X}_k$ относятся к области $x_k = -1$) является слишком грубым. Гораздо целесообразнее всю область $X_{kmax} - X_{kmin}$ разбить на три части — приблизительно (но необязательно) одинаковые по вероятности попадания в них, причем за центр всей группировки принять среднюю арифметическую \bar{X}_k , высчитанную по большому количеству данных. Поскольку в большинстве случаев факторы распределены по законам, близким к нормальному, то границами областей могут стать точки $\bar{X}_k - zS_k$ и $\bar{X}_k + zS_k$, где S_k — среднеквадратическое отклонение значений фактора X_k . Тогда все значения $X_k \leq \bar{X}_k - zS_k$ отнесем к области $x_k = -1$, все значения $X_k \geq \bar{X}_k + zS_k$ отнесем к области $x_k = +1$, а все значения $\bar{X}_k - zS_k < X_k < \bar{X}_k + zS_k$ отнесем к области $x_k = 0$.

Схема преобразования координат факторов из именованной области в относительную приведена на рисунке. Здесь символом X_k обозначаются значения k -го фактора в абсолютных единицах, x_k — в относительных, а величина z может меняться в пределах 0,25—0,5 по желанию исследователя.

Таким образом, вершины гиперкуба превратились из точек в довольно обширные, хотя и строго локализованные, области, что эквивалентно утолщению оболочки гиперсферы. Следовательно, необходимая точность выделения значимых факторов для построения модели может быть обеспечена только за счет увеличе-

ния числа опытов в каждой такой локализованной области факторного пространства. Последнее требование легко выполняется, т. к. при пассивном эксперименте можно накапливать опытные данные достаточно долго.

Проделав работу по преобразованию координат факторов, получаем из таблицы экспериментальных данных таблицу планирования квазиактивного эксперимента, каждая строка которой представляет собой координату точки факторного пространства в виде набора относительных величин $-1, 0, +1$ и результат эксперимента в этой точке Y . При этом вопрос о порядке реализации строк плана отпадает, а рандомизацию можно проводить только косвенно, т. е. нужно стараться, чтобы в план попали строки, реализованные достаточно далеко друг от друга во времени.

Число строк плана может быть очень большим, что затрудняет его обработку, причем часть работы будет проделана явно зря в силу исходной идеи о сверхнасыщенности плана и обязательном отсеивании части факторов. Поэтому при большом объеме целесообразнее сначала строить не весь план, а часть его, на котором провести предварительный этап выделения существенных факторов и парных взаимодействий (эффект взаимодействий более высокого порядка искать нецелесообразно в силу сознательного огрубления оболочки гиперсферы, т. е. увеличения шума эксперимента).

Предварительный план можно составить из двух контрастных по выходной величине групп строк, одна из которых содержит значения Y в границах, например, $(\bar{Y} - 1,5S_y) - (\bar{Y} - 1,0S_y)$, а другая — в границах $(\bar{Y} + 1,0S_y) - (\bar{Y} + 1,5S_y)$. Такое построение плана отсекает области слишком маленьких и слишком больших значений (которые могут быть следствием случайных грубых промахов), а также области вокруг центра распределения (которая ничего не говорит о влиянии раскочки факторов). Границы контрастных областей, безусловно, могут быть и другими, но общая идея создания предварительного контрастного плана должна сохраняться.

Последнее общее требование факторных планов — гомоскедастичность (при равных дисперсиях) — в квазиактивном плане ММСБ нарушается, поэтому для расчетов оценок коэффициентов регрессии b_k и их дисперсии D_k следует использовать специальные выражения, учитывающие поправки на это нарушение гомоскедастичности (гетероскедастичность) и являющиеся в этих условиях более эффективными, чем другие оценки.

Оптимальную оценку будем искать в виде

$$b_k = \alpha_{1k}\mu_{1k} - \alpha_{2k}\mu_{2k},$$

где α_{1k} и α_{2k} — некоторые положительные, подлежащие определению весовые коэффициенты, для которых справедливо равенство $\alpha_{1k} + \alpha_{2k} = 1$.

Установлено [3, с. 145], что оценку b_k можно подсчитать по формуле

$$b_k = \frac{\left(\frac{D_{2k} + 2m_k^2}{N_{2k}}\right)\mu_{1k} - \left(\frac{D_{1k} + 2m_k^2}{N_{1k}}\right)\mu_{2k}}{\frac{D_{1k}}{N_{1k}} + \frac{D_{2k}}{N_{2k}} + 4m_k^2}, \quad (1)$$

а ее дисперсию — по формуле

$$D_k = \frac{\frac{D_{1k}}{N_{1k}} \frac{D_{2k}}{N_{2k}} + \left(\frac{D_{1k}}{N_{1k}} + \frac{D_{2k}}{N_{2k}}\right)m_k^2}{\frac{D_{1k}}{N_{1k}} + \frac{D_{2k}}{N_{2k}} + 4m_k^2}, \quad (2)$$

$$\text{где } \mu_{1k} = \frac{1}{N_{1k}} \sum_{j=1}^{N_{1k}} Y_j^{(1k)};$$

$$\mu_{2k} = \frac{1}{N_{2k}} \sum_{j=1}^{N_{2k}} Y_j^{(2k)};$$

$\{Y_j^{(1k)}\}_{N_{1k}}$ — подмножество элементов из общей выборки выходной величины, для которых знак x_{kj} положителен;
 $\{Y_j^{(2k)}\}_{N_{2k}}$ — то же для случая, когда знак x_{kj} отрицателен;

N_{1k} и N_{2k} — объемы соответствующих подмножеств, причем $N_k = N_{1k} + N_{2k}$ — общий объем выборки выходной величины для k -го фактора;

$j = 1 \dots N$ — номер строки плана эксперимента;

m_k — оценка математического ожидания всего эксперимента —

$$m_k = \frac{1}{N_k} (\mu_{1k} N_{1k} + \mu_{2k} N_{2k});$$

D_{1k}, D_{2k} — дисперсии выходной величины соответственно при положительных и отрицательных значениях фактора x_k —

$$D_{1k} = \frac{1}{N_{1k} - 1} \sum_{j=1}^{N_{1k}} (Y_j^{(1k)} - \mu_{1k})^2;$$

$$D_{2k} = \frac{1}{N_{2k} - 1} \sum_{j=1}^{N_{2k}} (Y_j^{(2k)} - \mu_{2k})^2.$$

Такая оценка коэффициентов регрессии (математической модели) имеет минимальную систематическую и случайную ошибки, при этом никаких ограничений на равенство (неравенство) дисперсий частных выборок не накладывается.

Поскольку методика позволяет одновременно с оценками b_k находить и их дисперсии D_k , то для отсеивания незначимых факторов (выделения значимых) можно воспользоваться известной процедурой нахождения критерия Стьюдента и сравнения его с табличным значением —

$$t_k = \frac{|b_k|}{\sqrt{D_k}} \geq t_{\text{табл}}(q; \nu_k) \quad (3)$$

с уровнем значимости q и числом степеней свободы $\nu_k = N_k - 2$ (где N_k — число строк плана, определенных для фактора x_k). Выполнение условия (3) определяет значимость k -го фактора (или соответствующего парного взаимодействия).

Если из первоначальной матрицы планирования изъять столбцы, соответствующие незначимым факторам, то новая матрица планирования, как правило, перестает быть сверхнасыщенным планом. Кроме того, у новой матрицы появляются совпадающие строки. Такие строки необходимо совместить. Практически это означает появление в столбце результатов неодинакового количества измерений, или, другими

Таблица 1

Экспериментальные данные

X_1	X_2	X_3	Y	X_1	X_2	X_3	Y	X_1	X_2	X_3	Y	X_1	X_2	X_3	Y
245	256	29,4	64,2	249	271	20,4	65,3	199	311	26,8	65,2	209	237	16,9	56,0
274	268	22,5	68,2	151	282	17,5	54,7	282	335	27,5	78,0	299	311	23,2	76,5
318	282	21,2	75,0	238	229	24,2	59,4	255	178	14,6	53,9	195	285	24,1	61,2
232	315	24,5	69,3	300	245	32,8	47,1	207	268	18,2	59,7	299	316	24,1	77,3
243	198	23,5	56,1	212	157	21,4	47,1	211	254	22,0	59,0	152	304	18,4	57,7
153	330	25,2	61,9	193	304	28,0	63,8	235	299	17,3	66,7	300	302	19,3	75,0
251	320	25,9	72,3	195	202	24,7	51,0	324	331	25,9	82,1	248	364	24,8	77,2
197	234	22,0	54,9	219	260	20,0	60,4	312	273	24,3	73,5	238	219	25,3	58,3
217	244	27,4	59,1	258	247	27,4	64,4	243	223	15,8	58,1	292	267	22,0	70,1
223	246	18,6	59,0	230	248	25,8	61,0	236	278	23,5	65,1	238	322	24,0	70,8
274	279	25,0	69,9	144	288	21,9	55,2	228	181	20,0	51,8	343	309	24,5	82,0
193	257	18,0	56,7	172	341	24,7	65,5	272	260	23,4	28,2	274	248	17,4	65,1
145	315	21,7	58,6	220	246	18,4	58,6	309	251	18,7	69,8	265	309	26,3	72,2
225	293	21,7	65,4	278	215	27,5	62,8	194	240	24,9	55,6	309	303	19,2	76,2
319	234	27,2	70,0	208	284	21,6	62,3	169	304	27,1	60,8	263	194	17,4	57,2
215	266	26,8	61,5	204	280	23,0	61,5	197	275	21,2	59,8	323	298	32,1	78,9
299	286	18,5	72,9	273	231	30,8	64,6	194	198	24,4	50,4	205	319	34,8	67,9
192	287	19,8	60,5	180	286	23,3	59,4	245	251	22,8	62,7	215	253	22,6	59,4
207	242	21,5	57,0	199	233	24,4	55,3	190	316	25,4	64,5	286	300	25,8	74,0
255	182	20,5	55,1	289	309	22,0	74,9	256	278	22,9	67,4	177	294	19,1	59,5
277	260	21,0	67,4	256	263	18,2	64,9	230	198	24,0	54,6	216	195	22,6	52,4
209	314	20,9	66,0	164	289	18,9	57,3	258	325	24,9	73,6	253	225	19,0	60,0
222	275	22,8	63,0	158	317	24,7	60,8	202	229	24,6	55,2	175	262	22,8	55,8
176	317	20,7	62,4	251	253	24,9	64,0	289	336	33,2	79,7	203	324	34,0	68,2
213	273	26,4	62,1	172	299	20,3	59,7	203	259	22,4	58,7	157	288	20,4	56,6
255	221	22,4	60,2	254	239	19,3	61,9	146	307	20,1	57,6	203	292	24,1	63,0
283	293	17,2	71,7	210	356	24,6	71,7	343	313	25,9	82,3	258	272	20,2	66,5
206	324	26,3	67,5	229	254	20,1	60,9	262	296	17,1	69,5	142	292	22,9	55,6
252	223	30,5	61,1	195	264	20,5	58,2	181	242	22,0	54,0	202	251	16,6	56,8
294	263	21,0	69,8	294	286	28,4	73,5	218	302	17,7	65,1	205	281	30,6	62,7
241	265	19,9	63,6	288	254	33,2	69,5	195	268	20,9	58,7	265	260	23,4	66,3
221	263	16,0	60,5	292	268	12,3	69,0	190	223	25,6	53,1	273	230	32,3	64,7
186	312	26,6	63,7	242	267	22,9	64,4	157	291	17,6	56,6	205	255	16,8	57,7
222	276	29,8	64,0	278	240	24,3	65,5	330	316	24,0	65,3	340	207	31,6	65,3
241	280	24,2	66,0	319	284	24,5	75,7	238	236	23,7	60,2	188	253	19,6	55,8
261	303	24,8	71,3	324	311	23,2	78,3	226	213	17,9	55,2	215	255	22,2	59,6
341	301	17,6	79,5	278	229	30,7	64,9	336	301	17,7	79,0	185	337	25,4	66,5
260	266	21,1	66,1	160	295	22,2	58,0	241	222	19,1	58,2	149	288	17,1	55,2
214	286	18,8	62,8	260	262	17,4	65,2	129	282	20,0	52,5	338	281	24,7	77,6
195	302	25,6	63,4	167	278	18,3	56,2	165	333	27,9	64,0	228	228	29,3	58,9
201	248	21,3	57,0	293	286	22,6	72,7	228	202	23,9	54,8	300	323	24,4	78,3
270	281	23,4	69,4	215	242	21,1	57,9	228	244	19,8	59,5	205	243	26,7	57,5
301	299	22,1	75,2	270	224	17,8	61,7	211	261	26,3	60,4	255	279	21,2	67,1
172	337	25,2	65,0	328	299	24,6	78,7	214	281	27,5	63,4	252	292	22,5	68,6

словами, строки матрицы планирования имеют разные объемы выборок результатов m_j .

Поскольку исходный план реализовывался всего лишь однократно, то в результатах эксперимента могли быть грубые промахи, которые, естественно, остались незамеченными. Теперь же, имея в каждой строке новой матрицы выборку объемом m_j , можно все их проверить на однородность (отсутствие аномальных результатов) любым из известных способов. В очищенных от грубых промахов строках плана вычисляются средние арифметические и дисперсии однородных результатов. Полученные значения можно использовать при проверке на воспроизводимость опытов, которую — в силу неодинакового объема выборок строк m_j — следует проводить по критерию Бартлетта [5, с. 271]. При этом средняя дисперсия опытов может быть принята равной средневзвешенной $S^2\{Y\} = S_p^2$.

По данным новой матрицы планирования и уточненным результатам эксперимента вновь по формулам (1) и (2) вычисляют оценки коэффициентов регрессии b_k и их дисперсии D_k и проверяют найденные оценки на значимость по формуле (3). Если при этом происходит отсеивание хотя бы одного фактора, то процедура с изъятием столбцов матрицы, соответствующих этим незначимым факторам, с объединением совпадающих строк, повторной проверкой на однородность и перерасчетом оценок коэффициента регрессии повторяется. Если же при очередной проверке на значимость ни одна оценка коэффициентов регрессии не отвергнута, то математическая модель считается найденной, причем оценки ее коэффициентов берутся из последнего цикла расчетов.

Из плана эксперимента можно извлечь дополнительную информацию о влиянии парных взаимодействий, которые иногда могут быть больше влияния каждого фактора в отдельности. С этой целью в план эксперимента включаются столбцы парных взаимодействий, каждая координата которых получается простым перемножением кодов координат исходных факторов. Проверка парных взаимодействий на значимость ничем не отличается от соответствующей процедуры для каждого из основных факторов. Рассматривать взаимодействия более высокого порядка (тройные, четверные и т. д.) не имеет смысла, т. к. их влияние на входную величину заведомо меньше шумового фона.

Таким образом, оценки коэффициентов значимых факторов и их парных взаимодействий составят модель вида

$$\hat{Y} = b_0 + \sum_{i=1}^n b_i x_i + \sum_{i \neq j}^n b_{ij} x_i x_j, \quad (4)$$

которую необходимо проверить на адекватность с помощью критерия Фишера. Дисперсию эксперимента $S^2\{Y\}$ заменит средневзвешенная дисперсия S_p^2 , а дисперсия адекватности можно подсчитать по формуле

$$S_{ад}^2 = \frac{1}{\sum_{j=1}^N m_j - d} \sum_{j=1}^N m_j (\bar{Y}_j - \hat{Y}_j)^2, \quad (5)$$

где число степеней свободы $v_{ад} = \sum_{j=1}^N m_j - d$.

Все вышесказанное относится к классическому случаю, когда выходная величина распределена по нормальному закону. Однако в условиях пассивного эксперимента нередки случаи, когда выходная величина, будучи унимодальной (одновершинной), отличается от нормального закона. Правила требуют, чтобы она была приведена к нормальному закону распределения путем некоторого преобразования (логарифмирования, возведения в степень и т. д.). Однако при ближайшем рассмотрении оказывается, что требование нормального закона связано в основном с проверкой адекватности модели по критерию Фишера, который очень чувствителен к отклонению от него.

Исследования показали, что процедура ММСБ дает хорошие результаты даже при значительном отклонении распределения выходной величины от нормального закона как по мере косости (асимметрии), так и по мере крутости (экссесс), лишь бы само распределение оставалось унимодальным. При этом для проверки адекватности модели вместо критерия Фишера необходимо воспользоваться каким-нибудь другим критерием, не так тесно связанным с нормальным законом, например, критерием χ^2 Пирсона, который в этом случае примет вид

$$\chi^2 = \sum_{j=1}^N \frac{m_j (\bar{Y}_j - \hat{Y}_j)^2}{\hat{Y}_j} \leq \chi_{табл}^2 (q; v = N - 1), \quad (6)$$

где m_j — число экспериментальных данных в j -й строке плана.

Выбор способа проверки математической модели на адекватность зависит от исследователя.

Для иллюстрации возможностей ММСБ и последующих методов рассмотрим ряд производственных примеров на одном и том же статистическом материале (табл. 1), который представляет собой таблицу экспериментальных данных (результат контрольных измерений) некоторой технологической операции производства кристаллов ИМС после сокращения размерности факторного пространства до трех слабокоррелированных между собой факторов X_k (без указания их конкретных названий и размерностей, в данном случае это несущественно) и процента выхода годных кристаллов Y для каждой пластины (строки).

Пример 1. Используя данные табл. 1, найти математическую модель процента выхода годных кристаллов интегральных микросхем.

Решение. Прежде всего необходимо построить план квазиактивного эксперимента, для чего потребуются предварительно решить три задачи: определить вид закона распределения выходной величины, найти грубые промахи (если есть) и выбрать величину z для определения границ области $x_k=0$.

Исследование показало, что процент выхода кристаллов Y табл. 1 распределен по закону, отличному от нормального, но это отличие невелико, поэтому преобразования Y для приведения его к нормальному закону делать не будем. В качестве грубого промаха величины Y следует принять значение 28,2%, что ясно из гистограммы, если ее построить. Это — первая очистка данных. Величину z выберем равной $z=0,5$. Тогда области $x_k=-1$

и $x_k=+1$ определяются из выражения $\bar{X}_k = \pm 0,5 S_k$, а план эксперимента и расслоение его результатов по строкам после удаления грубых промахов получится таким, как представлено в табл. 2. Здесь мы не воспользовались приемом построения предварительного плана, т. к. число факторов и длина исходной таблицы сравнительно невелики:

Факторы	Области	
	$x_k = -1$	$x_k = +1$
X_1	$\leq 212,7$	$\geq 262,4$
X_2	$\leq 252,3$	$\geq 290,7$
X_3	$\leq 20,9$	$\geq 25,0$

Выходная величина Y расслоилась в табл. 2 на строчные выборки, с помощью которых можно провести дополнительную проверку на выявление и устранение скрытых грубых промахов, не замеченных при построении гистограммы. Проверку можно проводить любым из известных [6] способов. Так, к грубым промахам можно отнести число 71,7 в 8-й строке, число 47,1 в 21-й строке.

Так как число попаданий результатов эксперимента в различные строки плана m_j неодинаково, то проверку воспроизводимости делаем по критерию Бартлетта [5, с. 271]

$$Q = \frac{1}{1,055} [330,74 - 305,82] = 23,62 < \chi^2_{\text{табл}}(5\%; 18) = 28,87.$$

Полученное неравенство свидетельствует о том, что все строчные дисперсии однородны и имеют лишь случайное отклонение от средневзвешенной дисперсии опыта $S_p^2 = 10,44$ с $v=141$ числом степеней свободы. В свою очередь, доказанная однородность строчных дисперсий означает, что результаты опытов правильно отражают реальную картину исследуемого объекта, могут быть

повторно воспроизведены при новых измерениях и их можно использовать для дальнейших расчетов.

Для нахождения оценок коэффициентов, их дисперсий и определения их значимости воспользуемся формулами (1) — (3). Результаты расчетов представлены в табл. 3.

Величины m_k для каждого k -го фактора будут своими, и в силу этого оценку b_0 следует искать как среднее арифметическое всех значений выходной величины Y , полученных экспериментальным путем, кроме выявленных грубых промахов.

Поскольку значимыми факторами следует признать x_1, x_2, x_3 и x_1x_2 , а величина $b_0=63,94$, то искомая модель может быть представлена в виде

$$\hat{Y} = 63,94 + 6,50x_1 + 5,25x_2 + 2,40x_3 + 2,68x_1x_2.$$

Проверку адекватности полученной модели необходимо проводить по критерию Пирсона [7] в силу отклонения выходной величины Y от нормального закона:

$$\chi^2 = \sum_{j=1}^{27} m_j \frac{(\bar{Y}_j - \hat{Y}_j)^2}{\hat{Y}_j} = 10,24 < \chi^2_{\text{табл}}(5\%; 26) = 38,89.$$

Таким образом, найденная модель правильно отражает экспериментальные данные и может быть использована для анализа работы и для оптимизации исследуемого объекта.

Таблица 2

План ММСБ, результаты эксперимента и их частичная обработка

j	x_1	x_2	x_3	Y_{ji}	m_j	\bar{Y}_j	S_j^2	\hat{Y}_j	$m_j(\bar{Y}_j - \hat{Y}_j)^2$
1	—	—	—	56,0; 56,8	2	56,4	—	52,47	30,89
2	—	—	0	54,9; 57,0; 57,0; 51,0; 55,3; 54,0; 55,2; 55,6; 50,4	9	54,5	5,54	54,87	1,23
3	—	—	+	57,5; 53,1	2	55,3	—	57,27	7,76
4	—	0	—	56,7; 60,5; 54,7; 57,3; 58,2; 56,2; 56,6; 57,7; 55,8; 55,2; 52,5; 58,7; 59,7	13	56,9	4,62	55,04	44,97
5	—	0	0	55,2; 62,3; 61,5; 59,4; 61,2; 55,8; 58,7; 59,8	8	59,2	6,73	57,44	24,78
6	—	0	+	62,7	1	62,7	—	59,84	8,18
7	—	+	—	66,0; 62,4; 56,6; 59,7; 57,7; 59,5; 57,6	7	59,9	10,78	57,61	36,71
8	—	+	0	58,6; 60,8; 71,7; 58,0; 63,0; 55,6	5	59,2	7,94	60,01	3,28
9	—	+	+	61,9; 67,5; 63,7; 63,4; 65,0; 63,8; 65,5; 67,9; 68,2; 66,5; 64,0; 60,8; 64,5; 65,2	14	64,8	4,72	62,41	79,97
10	0	—	—	59,0; 55,1; 59,5; 58,6; 61,9; 55,2; 60,0; 53,9; 58,2; 51,8; 58,1	11	57,4	9,03	56,29	13,55
11	0	—	0	56,1; 60,2; 59,4; 47,1; 57,9; 52,4; 60,2; 62,7; 54,6; 54,8	10	56,5	20,8	58,69	47,96
12	0	—	+	59,1; 61,1; 64,4; 61,0; 58,3; 58,9	6	60,5	5,03	61,09	2,09
13	0	0	—	63,6; 60,5; 62,8; 65,3; 60,4; 64,9; 60,9; 65,2; 66,5	9	63,3	5,34	61,54	27,88
14	0	0	0	63,0; 66,0; 66,1; 64,0; 64,4; 59,4; 59,6; 67,1; 67,4; 59,0; 65,1	11	63,7	9,67	63,94	0,63
15	0	0	+	64,2; 61,5; 62,1; 64,0; 60,4; 63,4	6	62,6	2,29	66,34	83,93
16	0	+	—	65,1; 66,7	2	65,9	—	66,79	1,58
17	0	+	0	69,3; 65,4; 77,2; 70,8; 68,6; 73,6	6	70,8	17,01	69,19	15,55
18	0	+	+	72,3	1	72,3	—	71,59	0,50
19	+	—	—	61,7; 65,1; 57,2; 69,8	4	63,4	28,39	60,11	43,30
20	+	—	0	65,5	1	65,5	—	62,51	8,94
21	+	—	+	70,0; 47,1; 62,8; 64,6; 64,9; 64,7; 69,7	6	66,1	8,94	64,91	8,50
22	+	0	—	72,9; 69,0	2	70,9	—	68,04	16,36
23	+	0	0	68,2; 75,0; 69,9; 67,4; 69,8; 69,4; 75,7; 72,7; 70,1; 66,3; 77,6; 73,5	12	71,3	12,60	70,44	8,88
24	+	0	+	73,5; 69,5	2	71,5	—	72,84	3,59
25	+	+	—	71,4; 79,5; 79,0; 75,0; 76,2; 69,5	6	75,1	15,74	75,97	4,54
26	+	+	0	71,3; 75,2; 65,3; 74,9; 78,3; 78,7; 76,5; 82,0; 78,3	9	75,6	23,90	78,37	69,06
27	+	+	+	77,3; 72,2; 78,9; 74,0; 82,3; 79,7; 82,1; 78,0	8	78,1	12,73	80,77	57,03

Таблица 3
Расчет оценок коэффициентов модели

Параметр оценки	Факторы и взаимодействия					
	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3
N_{1k}	50	58	46	36	38	40
μ_{1k}	72,25	69,11	66,44	68,60	64,11	65,0
D_{1k}	22,42	46,84	39,15	108,80	69,56	56,69
N_{2k}	61	51	56	37	29	29
μ_{2k}	59,24	58,61	61,64	63,23	66,48	64,56
D_{2k}	13,40	16,11	35,41	8,39	30,28	39,78
m_k	65,10	64,20	63,80	65,88	65,14	64,85
b_k	6,50	5,25	2,40	2,68	-1,18	0,25
D_k	0,17	0,28	0,37	0,81	0,72	0,70
t_k	15,91	9,90	3,94	2,57	1,40	0,30
$t_{\text{табл}}$	1,98	1,98	1,98	1,99	2,00	2,00

Любопытно отметить, что в данном случае критерий Фишера также подтвердил правильность нахождения модели. С учетом всех измерений

$$S_{\text{ад}}^2 = \frac{\sum_{j=1}^N m_j (\bar{y}_j - \hat{y}_j)^2}{\sum_{j=1}^N m_j - d} = \frac{651,64}{173 - 5} = 3,88$$

и

$$F = \frac{S_{\text{ад}}^2}{S_p^2} = \frac{3,88}{10,44} < 1.$$

Если считать только по средним арифметическим строк плана, то

$$S_{\text{ад}}^2 = \frac{\sum_{j=1}^N (\bar{y}_j - \hat{y}_j)^2}{N - d} = \frac{120,67}{27 - 5} = 5,49$$

и

$$F = \frac{5,49}{10,44} < 1.$$

Метод наименьших квадратов с предварительной ортогонализацией факторов (МНКО)

Математические модели, найденные с помощью ММСБ, в большинстве практических случаев удовлетворяют задачам прогнозирования выходного показателя качества управления технологическим процессом. Однако, как всякая неполная квадратическая модель, выражение типа (4) перестает правильно работать в области факторного пространства, близкой к экстремуму, т. е. когда необходимо переходить к планированию второго порядка. Кроме того, утолщение гиперболы в ММСБ заведомо огрубляет коэффициенты регрессии, следовательно, уменьшает точность аппроксимации выходной величины исследуемого объекта найденной моделью. Наконец, необходимость работать не с именованными факторами X_k , а с их кодированными значениями x_k , может вызывать затруднения у рабочих-операторов соответствующих технологических линий. Таким образом, имеется необходимость в поиске еще одного метода моделирования по пассивным данным, свободного от указанных особенностей.

Среди множества методов обработки экспериментальных данных наибольшее распространение получил классический метод наименьших квадратов (МНК), разработанный Гауссом и Лежандром. В основу расчетов коэффициентов регрессионного уравнения по МНК положена минимизация квадрата отклонений наблюдаемых значений Y_j от эмпирической линии регрессии $M\{Y_j/X_1, X_2, \dots, X_n\}$:

$$\sum_{j=1}^N [Y_j - M\{Y_j / x_1, x_2, \dots, x_n\}]^2 = \min. \quad (7)$$

При этом обязательно должно соблюдаться общее для всех методов регрессионного анализа условие независимости (некоррелированности) факторов.

Однако при обработке результатов пассивного эксперимента, в отличие от результатов специальным образом спланированного активного эксперимента, вследствие неортогональности пассивного планирования коэффициенты регрессии, полученные МНК, становятся комплексными характеристиками всей совокупности аргументов и не могут быть признаны эффективными (т. е. полученными с минимальной дисперсией). В этом случае оценка значимости коэффициентов регрессии по критерию Стьюдента становится некорректной, а признание незначимым и отбрасывание какого-либо из найденных коэффициентов регрессии требует пересчета оставшихся коэффициентов заново. Предпринимались попытки упростить и упорядочить процедуру нахождения коэффициентов модели, но дело ограничилось некоторыми частными случаями. Естественно, такая громоздкая процедура крайне нежелательна в системах оперативного анализа ситуации и управления технологическим процессом.

Проблема существенного упрощения процедуры определения коэффициентов регрессии может быть решена путем подбора для каждой регрессионной задачи своей специальной системы линейно-независимых функций $\Psi(X)$ — таких, чтобы матрица системы нормальных уравнений $X^T X$ была единичной.

Рассмотрим применение ортогональных полиномов Чебышева для случая многомерной регрессии [3, с. 183—192]. Неизвестную нам связь между выходной величиной Y и факторами X_i будем искать в виде следующего полинома, включающего эффекты факторов и их взаимодействия:

$$\hat{Y} = b_0 + \sum_{i=1}^n b_i X_i + \sum_{\substack{i,g=1 \\ i \neq g}}^n b_{ig} X_i X_g + \dots + \sum_{i=1}^n b_{ii} X_i^2 + \dots = \sum_{k=0}^m b_k z_k, \quad (8)$$

где n — количество рассматриваемых факторов;
 m — количество рассматриваемых эффектов.

С учетом предварительной ортогонализации исходный полином (8) может быть представлен в следующем виде:

$$Y = A_0 \Psi_0(Z) + A_1 \Psi_1(Z) + \dots + A_m \Psi_m(Z) = \sum_{k=0}^m A_k \Psi_k(Z), \quad (9)$$

где $m+1$ — число членов уравнения регрессии.

Число $m+1$ в общем случае может быть равно числу всех n факторов во всех степенях от 0 до p плюс число всех $C_n^2 C_p^2$ парных взаимодействий, плюс соответствующее число тройных взаимодействий, плюс — и т. д. до исчерпания всего списка факторов. На практике, однако, имея в виду обработку пассивной контрольно-измерительной информации, степень p каждого фактора X_i не превышает 2, а число взаимодействий ограничивается парными, т. е. общее число членов уравнения регрессии, как правило, не

превышает $m+1 \leq 1+2n+C_n^2$. При этом для удобства работы следует произвести замену переменных и вместо эффектов факторов X_i и их взаимодействий различных порядков ввести единую переменную Z_k , $k=0 \dots m$.

Следует отметить, что степень полинома $\Psi_k(Z)$ совпадает с номером столбца k рассматриваемых эффектов Z_k в матрице исходных данных. Тогда именно на полиномы $\Psi_k(Z)$ следует наложить условие ортогонализации

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^N \Psi_{kj}(Z) \Psi_{ij}(Z) = 0; & k, i = \overline{0, m}; & k > i; \\ \sum_{j=1}^N [\Psi_{kj}(Z)]^2 \neq 0, \end{cases} \quad (10)$$

где j — номер строки таблицы данных.

Решением системы уравнений (10) будет достаточно простая итеративная процедура

$$\begin{cases} \Psi_0(Z) \equiv 1; \\ \Psi_{kj}(Z) = Z_{kj} - \sum_{i=0}^{k-1} \xi_{ki} \Psi_{ij}(Z), & k = \overline{1, m}; & k > i, \end{cases} \quad (11)$$

где

$$\xi_{ki} = \frac{\sum_{j=1}^N Z_{kj} \cdot \Psi_{ij}(Z)}{\sum_{j=1}^N [\Psi_{ij}(Z)]^2}; \quad k, i = \overline{0, m}; \quad k > i. \quad (12)$$

Задача определения оценок коэффициентов b_k уравнения (8) сводится к нахождению коэффициентов A_k при ортогональных полиномах в (9) исходя из условий минимизации остаточной суммы квадратов —

$$SS = \sum_{j=1}^N \left[Y_j - \sum_{k=0}^m A_k \Psi_{kj}(Z) \right]^2 \rightarrow \min. \quad (13)$$

Дифференцируя (13) по каждому коэффициенту A_k и приравнявая результат дифференцирования к нулю, получаем систему $(m+1)$ линейных уравнений, решением которой будет выражение для расчета A_k

$$A_k = \frac{\sum_{j=1}^N Y_j \Psi_{kj}(Z)}{\sum_{j=1}^N [\Psi_{kj}(Z)]^2}; \quad k = \overline{0, m}. \quad (14)$$

Из полученной формулы видно, что все коэффициенты A_k определяются независимо друг от друга, т. е. рассматриваются на основе ортогональных полиномов различных порядков. Следовательно, вопрос о включении в уравнение (9) каждого коэффициента A_k может решаться в индивидуальном порядке по критерию Стьюдента. Для этого предварительно рассчитывается среднеквадратическое отклонение очередного коэффициента A_k :

$$S(A_k) = \sqrt{\frac{S^2(Y)}{\sum_{j=1}^N [\Psi_{kj}(Z)]^2}}, \quad (15)$$

где $S^2(Y)$ — средняя (или средневзвешенная) дисперсия выходной величины по неповторяющимся строкам плана (может быть определена специальными дублирующими экспериментами в любой точке изучаемой области факторного пространства, лучше всего в центре). В крайнем случае, для оценки средней дисперсии можно взять эмпирическую дисперсию распределения выходной величины, деленную на 4 (минимальное число равнодействующих составляющих, которые может иметь нормальное распределение).

Величина $S(A_k)$ подставляется в выражение для расчетного критерия Стьюдента —

$$t_k = \frac{|A_k|}{S(A_k)} \geq t_{\text{табл}}(q, v), \quad (16)$$

которая сравнивается с табличным при q уровне значимости и $v=N-1$ числе степеней свободы. При выполнении условия (16) коэффициент A_k признается значимым и должен быть включен в уравнение (9), в противном случае — нет.

Проверка адекватности уравнения (9) экспериментальным данным осуществляется, как обычно, с помощью критерия Фишера. В случае положительного решения можно совершить обратный переход в декартову систему координат, т. е. переходить к отысканию оценок b_k в уравнении (8).

Простейшим методом отыскания b_k является метод подстановок соответствующих конкретных значений $\Psi_k(Z)$ в (9) и приведение подобных членов. Выражения, стоящие перед каждым Z_k , и являются искомыми оценками коэффициентов b_k .

Необходимо отметить, что с ростом числа членов уравнения (9) поиск коэффициентов b_k усложняется. При этом следует обратить внимание на то обстоятельство, что если в уравнении (9) часть полиномов $\Psi_i(Z)$ оказались незначимыми, то это вовсе не означает, что соответствующие им коэффициенты b_i тоже окажутся незначимыми. Вполне возможно, что они войдут в конечное выражение модели в декартовых координатах, проникнув туда опосредованно за счет других членов:

$$b_k = A_k - \sum_{i=k+1}^m b_i \xi_{ik}; \quad i, k = \overline{m, 0}; \quad i > k. \quad (17)$$

Анализ особенностей метода наименьших квадратов с предварительной ортогонализацией факторов (МНКО), как в теоретическом плане, так и в плане практического применения, позволяет обратить внимание на следующее.

1. В условиях пассивного эксперимента оценки коэффициентов b_k , в отличие от A_k , являются смешанными. Однако по сравнению с МНК предложенный метод позволяет точно оценить независимый вклад каждого эффекта в соответствующий коэффициент b_k . Это обстоятельство обуславливает более высокую чувствительность МНКО по сравнению с МНК, которая

тем выше, чем больше количество исследуемых факторов, причем в этот список факторов могут входить как сильно-, так и слабодействующие.

2. Эффективность метода возрастает в случае расположения факторов в таблице данных в порядке убывания степени их влияния на выходную величину.

3. Расчет по МНКО в условиях активного плана является частным случаем определения коэффициентов регрессии по результатам пассивного эксперимента.

4. Поскольку оценки МНКО получены на основе тех же предпосылок, что и оценки МНК, то они обладают одинаковыми свойствами, т. е. несмещенности и эффективности.

5. Здесь же следует подчеркнуть, что поскольку МНК выведен для закона нормального распределения факторов и выходной величины, то, по-видимому, эти же требования в значительной степени относятся и к МНКО.

6. Существенной особенностью и преимуществом МНКО является то обстоятельство, что в силу перехода данных в заведомо ортогональную систему координат можно получать оценки коэффициентов и для коррелированных факторов, и для квадратных членов.

7. Другой существенной особенностью и преимуществом МНКО является то, что для получения модели не требуется слишком длинной таблицы исходных данных, как в ММСБ, лишь бы координаты точек факторного пространства были бы достаточно далеки друг от друга.

Пример 2. Используя данные табл. 1, найти математическую модель процента выхода годных кристаллов ИМС методом МНКО.

Решение. В силу большого объема табл. 1 расчет проводился на ПЭВМ по специальной программе. Получились следующие адекватные модели:

— в ортогональных полиномах:

$$\hat{Y} = 63,89 + 0,109\psi_1(Z) + 0,124\psi_2(Z);$$

— в декартовых координатах:

$$\hat{Y} = 3,77 + 0,113X_1 + 0,124X_2.$$

Напоминаем, что последняя модель дана в абсолютной (именованной) системе единиц, а все уравнение представляет собой обычное алгебраическое выражение, коэффициенты которого не являются весами факторов. Следует отметить также, что длина таблицы исходных данных не играет существенной роли в МНКО, разница только в трудоемкости обработки, однако при наличии ПЭВМ и соответствующего программного обеспечения трудоемкость получения модели для оператора практически одинакова (техника ручного расчета приведена в примере 4).

Комбинированный метод моделирования по пассивным данным (КММП)

Из сравнения ММСБ и МНКО ясно, что в случае достаточно большой выборки (длинной таблицы исходных пассивных данных) ММСБ может служить для выделения значимых факторов и оценки их весов, а следовательно, и приоритетов при управлении технологическим процессом. В то же время МНКО позволяет получать нужные зависимости более точно и в более привычной для цеховых работников алгебраической форме, однако точность эта зависит от

правильной ранжировки весов факторов, что обеспечивает как раз ММСБ. Другими словами, оба метода достаточно плотно переплетены между собой и дополняют друг друга. И мы стали искать метод, который объединял бы достоинства ММСБ и МНКО.

Таким методом может быть метод моделирования, основанный на применении метода МНКО, однако не по исходной, а по специально подготовленной таблице данных. Суть сводится к тому, что таблицу исходных многомерных экспериментальных данных сначала рассматривают, как в ММСБ, однако числовые значения факторов не кодируют, а оставляют как есть. Это позволяет по каждому фактору иметь строчную выборку, которую можно проверить на наличие скрытых грубых промахов и устранить их. Такую дополнительную очистку невозможно произвести никаким другим способом. Дополнительно очищенная таблица исходных данных затем может обрабатываться МНКО обычным порядком. Интуитивно ясно, что модель при этом получается более точной, с меньшим коридором разброса.

Следующий шаг — еще одно преобразование таблицы исходных данных: после расслоения первоначальной таблицы по методу ММСБ и дополнительной очистки строчных выборок по каждому фактору сформировать таблицу средних арифметических и дисперсий этих строчных выборок. Такая таблица позволяет произвести третью очистку данных — проверку на однородность строчных выборок факторов и выходной величины можно использовать таблицу строчных средних арифметических факторов и выходной величины как свернутую исходную таблицу данных для МНКО. Полученная на ее основе модель будет наилучшим образом отражать исследуемые процессы. Такой метод и есть комбинированный метод моделирования по пассивным данным (КММП).

Пример 3. Используя данные табл. 1 и результаты их расслоения по ММСБ (пример 1), найти математическую модель процента выхода годных кристаллов интегральных микросхем методом МНКО.

Решение. Прежде всего, используя граничные значения областей $x_k = \pm 1$, расслоим табл. 1 по образцу табл. 2, оставив все числовые значения факторов. Для сокращения места приведем только две строки такой расслоенной таблицы.

j	X_1	X_2	X_3	Y
1	(-) 209; 202	(-) 237; 251	(-) 16,9; 16,6	56,0; 56,8
2	(-) 197; 207; 201; 195; 199; 181; 202; 194; 194	(-) 234; 242; 248; 202; 233; 242; 229; 240; 198	(0) 22,0; 21,5; 21,3; 24,7; 24,4; 22,0; 24,6; 24,9; 24,4	54,9; 57,0; 57,0; 51,0; 55,3; 54,0; 55,2; 55,6; 50,4
...

В каждой клетке такой таблицы образуется выборка, элементы которой следует подвергнуть проверке на наличие (отсутствие) грубых промахов (кроме уже очищенных клеток Y), при этом мы произведем их вторую очистку.

Теперь можно переходить к поиску адекватной модели по МНКО, которая будет выглядеть следующим образом:

— в ортогональных полиномах:

$$\hat{Y} = 63,92 + 0,114\psi_1(Z) + 0,120\psi_2(Z);$$

— в декартовых координатах:

$$\hat{Y} = 4,49 + 0,115X_1 + 0,120X_2.$$

Пример 4. Используя данные таблицы из примера 3, найти математическую модель процента выхода годных кристаллов интегральных микросхем методом КММП.

Решение. Сформируем таблицу данных для КММП. С этой целью вместо каждой выборки очищенной расслоенной таблицы примера 3 в соответствующую клетку поставим их средние арифметические и дисперсии. Для сокращения места приведем только две строки такой свернутой таблицы.

j	Объем строчной выборки, n_j	\bar{X}_{1j}	$S_{x_{1j}}^2$	\bar{X}_{2j}	$S_{x_{2j}}^2$	\bar{X}_{3j}	$S_{x_{3j}}^2$	\bar{Y}_j	$S_{Y_j}^2$
1	2	205,5	—	244,0	—	16,75	—	56,40	—
2	9	196,7	52,75	229,8	318,19	23,31	2,41	54,5	5,54
...

Полученная таблица позволяет произвести третью проверку качества экспериментальных данных — проверку на однородность выборок. Действительно, для каждого фактора и выходной величины имеем N выборок объема n_j , каждая со своими дисперсиями $S_{x_{1j}}^2$ и $S_{Y_j}^2$, соответственно. Следовательно, можно определить однородность всех одноименных выборок по критерию Бартлетта и вычислить средневзвешенную дисперсию S_p^2 . В случае отрицательного ответа выявленную неоднородность следует устранить.

Очищенная от всех выявленных грубых промахов свернутая таблица исходных экспериментальных данных, а также их обработка по формулам (10) — (16) представлены в **табл. 4**.

Вспомогательные коэффициенты ξ_{ki} :

k	i		
	0	1	2
1	238,6		
2	264,5	0,1306	
3	23,06	0,0018	0,0158

Расчет оценок коэффициентов регрессии:

	Z_0	Z_1	Z_2	Z_3
A_k	64,50	0,117	0,0541	-0,0166
$S\{A_k\}$	0,552	0,0123	0,0104	0,129
t_k	117	9,58	5,18	0,128

Тогда уравнение регрессии (модель) в пространстве ортогональных полиномов имеет вид

$$\hat{Y} = 64,50 + 0,117\psi_1(Z) + 0,054\psi_2(Z).$$

Проверка на адекватность по Фишеру —

$$F = \frac{S_{ад}^2}{S_p^2} = \frac{7,49}{8,23} < 1$$

четко указывает на адекватность модели экспериментальным данным. Обратный переход в пространство декартовых координат дает уравнение

$$\hat{Y} = 23,92 + 0,110X_1 + 0,054X_2.$$

Таблица 4

Очищенные и свернутые пассивные экспериментальные данные и их обработка методом МНКО

j	Код			Средние данные в абсолютных единицах						Расчет полиномов			Расчет адекватности	
	x_1	x_2	x_3	\bar{X}_{1j}	\bar{X}_{2j}	\bar{X}_{3j}	n_j	\bar{Y}_j	S_Y^2	$\psi_{1j}(Z)$	$\psi_{2j}(Z)$	$\psi_{3j}(Z)$	\hat{Y}_j	$(\bar{Y}_j - \hat{Y}_j)^2$
1	—	—	—	205,5	244,0	16,75	2	56,40	—	-33,12	-216,1	-2,83	48,93	55,87
2	—	—	0	197,0	233,75	23,18	8	55,00	3,64	-41,62	-25,29	0,59	58,26	10,60
3	—	—	+	197,5	233,0	26,15	2	55,30	—	-41,12	-26,10	3,58	58,27	8,82
4	—	0	—	176,3	273,8	18,92	13	56,91	4,62	-62,31	17,44	-4,30	58,14	1,52
5	—	0	0	188,2	277,4	22,54	8	59,24	6,73	-50,37	19,48	-0,74	59,65	0,17
6	—	0	+	205,0	281,0	30,60	1	62,70	—	-33,62	20,92	7,27	61,69	1,01
7	—	+	—	169,9	303,7	19,59	7	59,93	10,8	-68,77	48,22	-4,11	59,05	0,77
8	—	+	0	161,6	302,2	23,12	5	59,20	7,94	-77,02	47,79	-0,56	58,06	1,30
9	—	+	+	182,1	320,9	26,27	12	64,32	3,4	-56,54	63,83	2,30	61,33	8,93
10	0	—	—	236,0	232,25	18,49	8	58,81	3,63	-2,62	-31,88	-4,06	62,47	13,37
11	0	—	0	235,4	211,3	23,47	7	56,81	9,76	-3,19	-52,77	1,25	61,27	19,87
12	0	—	+	234,2	237,2	27,04	5	60,34	6,17	-4,42	-26,69	4,41	62,54	4,83
13	0	0	—	238,6	266,2	19,0	9	63,34	5,34	-0,07	1,76	-4,09	-64,59	1,55
14	0	0	0	236,7	267,1	22,75	11	63,74	9,67	-1,90	2,87	-0,35	64,43	0,49
15	0	0	+	220,0	268,8	27,70	6	62,60	2,29	-18,62	6,79	4,57	62,69	0,01
16	0	+	—	226,5	300,5	17,50	2	65,90	—	-12,12	37,61	-6,13	65,12	0,62
17	0	+	0	241,0	309,4	23,52	5	69,54	9,04	2,38	44,62	-0,25	67,19	5,51
18	0	+	+	251,0	320,0	25,90	1	72,30	—	12,38	53,92	1,96	68,87	11,78
19	+	—	—	284,3	241,0	17,97	3	65,53	16,5	45,71	-29,44	-4,71	68,26	7,46
20	+	—	0	278,0	240,0	24,30	1	65,50	—	39,38	-29,61	1,64	67,51	4,05
21	+	—	+	274,5	230,0	31,27	2	64,75	—	36,88	-39,28	8,24	66,70	3,79
22	+	0	—	295,5	277,0	15,25	2	70,95	—	56,88	5,11	-8,00	71,44	0,24
23	+	0	0	293,8	273,7	22,97	12	71,30	12,6	55,21	1,99	-0,23	71,08	0,05
24	+	0	+	291,0	270,0	30,80	2	71,50	—	52,38	-1,31	7,66	70,57	0,87
25	+	+	—	313,8	300,0	18,20	5	76,28	10,1	75,18	25,72	-5,41	74,70	2,49
26	+	+	0	308,3	308,9	23,64	9	75,61	23,9	69,71	35,32	-0,10	74,58	1,06
27	+	+	+	300,0	317,6	26,28	5	77,72	21,1	61,38	45,12	2,39	74,13	12,86

Оценка качества моделей

Как известно, на одном и том же массиве исходных данных можно построить несколько математических моделей, причем необязательно с одним и тем же перечнем значимых факторов. В силу адекватности все эти модели имеют право на существование, однако точность описания или выходной величины различна. Наилучшей оценкой качества модели признается ее информационная емкость, т. е. количество информации, которое модель выбрала из таблицы данных [3, с. 241—246].

Пример 5. Рассчитать информационные емкости адекватных математических моделей, полученных на основе одной исходной таблицы пассивных экспериментальных данных.

Решение. В примерах 1—4 найдены адекватные математические модели, полученные при обработке экспериментальных данных табл. 1 четырьмя различными методами. Пользуясь подробной методикой расчета, приведенной в [3], определим информационные емкости упомянутых четырех моделей и для наглядности сведем результаты в таблицу.

Табл. 1 пассивных данных	Метод	Источник	Математическая модель	Система координат	Информационная емкость, %
Первичная очистка	ММСБ	Пример 1	$\hat{Y} = 63,94 + 6,50x_1 + 5,25x_2 + 2,40x_3 + 2,68x_1x_2$	Относительная декартова	12,3
Исходная таблица ММСБ без кодировки факторов	МНКО	Пример 2	$\hat{Y} = 63,89 + 0,109\psi_1(Z) + 0,124\psi_2(Z)$	Ортогональные полиномы	25,0
			$\hat{Y} = 3,77 + 0,113x_1 + 0,124x_2$	Абсолютная декартова	
То же после вторичной очистки	МНКО	Пример 3	$\hat{Y} = 63,92 + 0,114\psi_1(Z) + 0,120\psi_2(Z)$	Ортогональные полиномы	62,2
			$\hat{Y} = 4,49 + 0,115x_1 + 0,120x_2$	Абсолютная декартова	
Свернутая таблица ММСБ после проверки на однородность	КММП	Пример 4	$\hat{Y} = 64,50 + 0,117\psi_1(Z) + 0,054\psi_2(Z)$	Ортогональные полиномы	77,7
			$\hat{Y} = 23,92 + 0,110x_1 + 0,054x_2$	Абсолютная декартова	

Следует обратить внимание, что вторичная очистка данных от грубых промахов имеет принципиальное значение для информационной емкости (следовательно, и для точности, эффективности) модели, а метод КММП по качеству модели сравнялся с активными методами планирования типа полного факторного эксперимента.

Выводы

Предложенные в этой статье методы математического моделирования по пассивным данным позволяют использовать уже имеющуюся накопленную контрольно-измерительную информацию, полу-

ченную при пооперационном или финишном контроле, для нахождения математической модели конкретного технологического процесса (ТП). Это означает, что без дополнительных финансовых и других затрат технолог может:

1) получить математическую модель (ММ), пригодную для управления ТП, и, в конечном счете, оптимизировать его по максимуму выхода годных изделий (на практике на ряде крупнейших предприятий при моделировании ТП производства кристаллов ИМС удалось увеличить съём годных кристаллов в 2—4 раза при том же исходном запуске);

2) получить список параметров изделия (факторов, вошедших в ММ), по которым только и стоит производить отбраковочный контроль, что позволит в 2—5 раз снизить количество контрольных операций и тем самым уменьшить производственные затраты (на практике там же удалось снизить количество отбраковочных контрольных операций с 35—40 до 3—6);

3) получить ММ неблагоприятных технологических операций и тем самым устранить неоднородность процесса с одновременным значительным повышением коэффициента точности тиража, что дает дополнительное количество годных изделий;

4) построить комплексную информационную измерительную систему, совмещенную с системой статистического регулирования и оптимизации ТП, адаптирующуюся к изменениям условий производства, что позволяет дать документальную оценку качества самого ТП.

Все изложенные методы получены и опробованы в научно-исследовательской лаборатории «Математическое моделирование» Приднестровского государственного университета им. Т. Г. Шевченко. Разработан пакет из 19 компьютерных программ в интегрированной среде визуального программирования BORLAND C++ BUILDER 5.0 как приложение для ОС WINDOWS. Пакет позволяет решить все задачи моделирования технологических процессов при производстве кристаллов ИМС, однако может легко адаптироваться к решению аналогичных задач моделирования по пассивным данным в любой отрасли науки и техники.

ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ИСТОЧНИКИ

1. Адлер Ю. П., Маркова Е. В., Грановский Ю. В. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий.— М.: Наука, 1976.
2. Эльясберг П. Е. Измерительная информация: Сколько ее нужно? Как ее обрабатывать?— М.: Наука, 1983.
3. Долгов Ю. А. Статистическое моделирование.— Тирасполь: ПГУ, 2002.
4. Дружинин Г. В. Методы и оценки прогнозирования качества.— М.: Радио и связь, 1982.
5. Джонсон Н., Лион Ф. Статистика и планирование эксперимента в технике и науке: методы обработки данных.— М.: Мир, 1980.
6. Львовский Е. Н. Статистические методы построения эмпирических формул.— М.: Высшая школа, 1988.
7. Митропольский А. К. Техника статистических вычислений.— М.: Наука, 1971.