Министерство высшего и среднего специального образования СССР

Московское ордена Ленина, ордена Октябрьской Революции
и ордена Трудового Красного Знамени
высшее техническое училище им. Н. Э. Баумана

В. Г. Алексеев, Е. В. Кротова

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

по курсовому и дипломному проектированию
по курсу «Автоматизация проектирования конструкций
и техпроцессов ЭВА и РЭА»

Раздел «Автоматизация проектирования процесса нанесения
гальванических защитных покрытий печатных плат»

Москва 1983

Данные методические указания издаются в соответствии с учебным планом.

Рассмотрены и одобрены кафедрой П-8 02.11.81 г., методической комиссией факультета П и учебно-методическим управлением.

Рецензент д.т.н. проф. Норенков И.П.

Редактор Л.П.Кистанов Корректор Л.И.Малютина

Заказ 1577 Объем 1,75п.л.+1вкл.(1,6уч.-изд.) Тираж 400 экз.
Бесплатно Подписано к печати 05.10.82 г. План 1982 г., № 81

Типография МВТУ. 107005, Москва, Б-5, 2-я Бауманская, 5.

Вступление

Вопросы нанесения защитных, защитно-декоративных и функциональных покрытий приобретают большое значение в связи с повышением требований к качеству изделий и сроку их службы. Совершенствование гальванических процессов при изготовлении печатных плат (ПП) и многослойных печатных плат (МПП) вызвано новыми конструктивными разработками ПП и МПП для сверхбыстродействующих ЭВМ, браком на ряде основных операций в действующих технологических процессах (ТП), внедрением АСУ ТП, требованиями к повышению качества на отдельных операциях.

От условий выполнения гальванического наращивания меди на поверхности заготовки, получения защитного гальванического покрытия и травления меди с пробельных мест зависит точность выполнения проводников.

Требуемые геометрические размеры печатных проводников можно получить надежной защитой их металлорезистом, обеспечивающим минимальный растрав краев проводников и его отсутствие под защитным покрытием, минимальную скорость травления самого защитного покрытия в травильном растворе. Надежность защиты металлорезистов проводников ПП определяется составом, структурой (плотностью) и равномерностью нанесения защитного покрытия на поверхность ПП.

Металлический резист, наносимый на токоведущие поверхности при изготовлении ПП и МПП, должен удовлетворять следующим основным требованиям: препятствовать окислению медной фольги и обеспечивать способность к пайке в течение длительного складирования в неблагоприятных климатических условиях; повышать антикоррозионную стойкость в сложных климатических условиях; способность к пайке, надежную защиту проводников от растравливания и экономичность процесса травления; увеличивать сопротивление механическому износу и предельно допустимые токи в схеме.

В качестве металлического резиста применяются: золото, никель-золото, серебро, олово, олово-свинец, олово-никель, олово-висмут, олово-цинк и др.

Широкое применение в современном приборостроении для защиты от коррозии изделий, подвергаемых пайке, получили электролитические покрытия сплавом олово-свинец. Они характеризуются повышенной коррозионной стойкостью, меньшей по сравнению с чистым оловом, пористостью, лучшей пайкой.

Электроосаждение сплава олово-свинец осуществляется из борфтористоводородного, кремнефтористоводородного, фенолсульфолового, пирофосфатного, сульфаминного, хлористого электролитов. Чтобы защитное покрытие сплавом олово-свинец обеспечивало хорошую паяемость ПП, требуется получить гальваническое покрытие сплавом олово-свинец по составу, близкому к эвтектическому, обладающему наименьшей температурой плавления. Это дает возможность сократить время пайки, увеличить скорость установки пайки волной припоя и в свою очередь уменьшить порообразование в диэлектрике, окружающем отверстия, так как за короткое время воздействия температуры припоя на ПП диэлектрик не успевает прогреться до стадии активного газовыделения, способствующего образованию больших пор, а также уменьшает температуру и время оплавления ПП.

Несмотря на то, что сплав олово-свинец применяется давно, кинетика этого процесса еще мало изучена, не ясен механизм совместного и раздельного осаждения этих металлов, а по вопросам, например, влияния плотности тока, концентраций компонентов электролита на состав сплава, его структуру (плотность и мелкозернистость), равномерность, скорость осаждения существуют различные точки зрения. Отсутствуют данные, позволяющие рассчитывать состав сплава при любых концентрациях компонентов электролита. Обеспечивать нужное процентное содержание олова и свинца в покрытии, равномерность покрытия по толщине и составу можно при помощи стабилизации всех параметров процесса на оптимальном уровне в течение всего времени, или изменяя плотность тока по определенному закону для конкретных начальных условий процесса. В первом случае можно использовать регрессионные модели, построенные по данным активных экспериментов, во втором случае необходимо построить динамическую модель процесса, изучив физику происходящих явлений.

Выбор математической модели и метода ее построения

Любую технологическую операцию можно представить в виде многомерного объекта, блок-схема которого представлена на рис. 1,

где $X(t)=x_1(t),\ldots,x_n(t)$ – вектор входных переменных, к которым относятся характеристики, например, химический состав электролитов, механические свойства, стоимость сырья или заготовок, размеры ПП;

$Z(t) = z_1(t), \ldots, z_e(t)$ – параметры, характеризующие условия протекания технологической операции, к которым относятся температура, давление, скорость;

$Y(t) = y_1(t), \ldots, y_m(t)$ – вектор выходных переменных, т.е. характеристики полученного продукта (химический состав, размеры, стоимость, количество и т.д.).

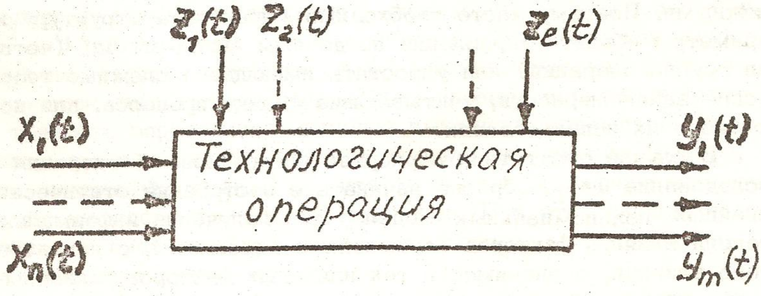

Рис. 1

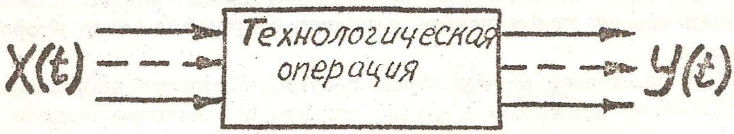

Рис. 2

Чаще всего $X(t)$ включает в себя и параметры, характеризующие условия протекания процесса. В этом случае (рис. 2) технологическую операцию можно представить как объект преобразования случайных функций $X(t)$ в случайные функции $Y(t)$. В качестве входных и выходных переменных выбирают наибольшую часть основных переменных, а остальные относят к неконтролируемым случайным воздействиям. Выбор входных и выходных переменных обычно диктуется возможностью измерения и управления ими в ходе технологической операции.

По наличию априорной информации все операции могут быть разделены на следующие группы: операции, для которых известны описывающие их уравнения вплоть до приблизительных значений коэффициентов; операции, для которых известны описывающие их уравнения, а численные значения коэффициентов неизвестны; операции, для которых конкретный вид уравнения и численные значения параметров неизвестны, но имеется априорная информация о принадлежности операции к определенному известному классу; операции, относительно которых отсутствуют априорные сведения, вид уравнения неизвестен.

На практике оказывается, что для многих технологических операций уравнения связи между входными и выходными переменными или отсутствуют совсем, или являются чрезвычайно сложными. Поэтому часто необходимо определить структуру и параметры объекта управления по данным "вход-выход" (четвертая группа операций) или упростить имеющиеся сложные теоретические закономерности, учитывающие физику процесса, для конкретного их использования.

В случае отсутствия априорной информации об операции ее исследование целесообразно начинать с построения статических линейных полиномиальных моделей для получения информации о степени влияния факторов на выходные параметры, о направлении этого влияния, о значимости тех или иных факторов, а затем переходить к полиномиальным моделям более высоких порядков.

При исследовании действующей технологической операции для получения оптимальных режимов ее проведения построение модели можно сразу начать с полиномиальной модели второго порядка.

В настоящей работе предлагается, используя экспериментально-статистические методы, строить статические модели процесса, связывающие критерии качества с технологическими параметрами.

Построение статической модели процесса, как правило, - первый этап исследования и проектирования ТП. В этом случае задача обычно ставится следующим образом: на входе и выходе операции измеряются соответственно значения вектора входных переменных $X = \{x_1, \ldots, x_n\}$ и значения выходной переменной y, предполагается существование неизвестной заранее функциональной зависимости $y = F(X)$ - статической модели операции. Требуется построить такую аппроксимацию $\tilde{y} = F(X)$ функции $F(X)$, у которой заданный критерий качества аппроксимации $P(y, \tilde{y})$ принимал бы экстремальное значение [1].

Построение полиномиальной математической модели второго порядка

В этом случае адекватная математическая модель - полином второго порядка

$$y=a_0+\sum_{i=1}^{k}a_ix_i+\sum_{\substack{j,i=1\\ i\neq j}}^{k}a_{ij}x_i\cdot x_j+\sum_{i=1}^{k}a_{ii}x_i^2. \quad (1)$$

Задача: найти оценки $\hat{a}_j$ неизвестных коэффициентов a_j регрессионного уравнения (1). Если предположить, что [2] значения выходного параметра y в каждом опыте матрицы планирования эксперимента представляют независимые нормально распределенные случайные величины, дисперсии выходного параметра $S^2\{y\}$ в различных опытах матрицы однородны или пропорциональны некоторой функции от X, значения уровней факторов не являются линейной комбинацией от уровней остальных факторов, точность определения значений выходного параметра значительно выше точности определения величины уровня фактора, то для нахождения оценок $\hat{a}_j$ коэффициентов a_j можно воспользоваться методом наименьших квадратов. При этом оценки коэффициентов регрессии будут самостоятельными, несмещенными, эффективными и достаточными.

После обработки результатов эксперимента по методу наименьших квадратов и схеме регрессионного анализа получается зависимость оценки условного математического ожидания $\hat{y}(x)=y$ (случайная нормально распределенная величина) от K -факторов, т.е.

$$\hat{y}=\hat{a}_0+\sum\hat{a}_ix_i+\sum\hat{a}_{ii}x_i^2+\sum_{i<j}\hat{a}_{ij}x_ix_j \quad (2)$$

или $[\hat{y}]=[X][A]$,

где $\hat{a}_0, \hat{a}_i, \hat{a}_{ij}, \hat{a}_{ii}$ – оценки коэффициентов регрессии – случайные нормально распределенные величины;

$[\hat{y}]$ – вектор расчетных значений параметров выхода размерности $(N\cdot 1)$;

$[A]$ – вектор оценок коэффициентов регрессии размерности $(k\cdot 1)$.

По методу наименьших квадратов составляется система нормальных уравнений, при решении которой находится значение вектора оценок коэффициентов

$$([X]^T\cdot[X])[A]=[X]^T[Y];$$

$$[A]=([X]^T[X])^{-1}[X]^T[Y]=N^{-1}[M]^{-1}[X]^T[Y]=$$
$$=[Д][X]^T[Y],$$

$[X]^T$– транспонированная матрица $[X]$;

$[Y]$ – вектор экспериментальных значений параметров выхода размерности $(N \cdot 1)$;

$[M] = \frac{1}{N}[X]^T \cdot [X]$ – нормированная по числу опытов информационная матрица плана, составленная из неизвестных сумм в левой части нормальных уравнений размерности $(K \cdot K)$;

$[Д] = \frac{1}{N}[M]^{-1}$ – ковариационная матрица плана размерности $(K \cdot K)$ с диагональными c_{ii} и внедиагональными элементами c_{ij}.

Ковариационная матрица $[Д]$ задает матрицу дисперсий-ковариаций оценок коэффициентов $[A]$, независимую от вектора $[Y]$. Матрица математических ожиданий вектора $([A]-[\beta])$ с учетом истинной среднеквадратичной ошибки эксперимента σ определяется

$$M\left\{([A]-[\beta])([A]-[\beta])^T\right\} = M\left\{\begin{bmatrix} a_0-\beta_0 \\ a_1-\beta_1 \\ a_2-\beta_2 \\ \vdots \\ a_K-\beta_K \end{bmatrix}\left[(a_0-\beta_0),\right.\right.$$

$$\left.\left.(a_1-\beta_1), \ldots, (a_K-\beta_K)\right]\right\}.$$

Диагональные элементы c_{ii} ковариационной матрицы задают значения дисперсий оценок коэффициентов регрессии $S^2\{a_i\} = c_{ii} \cdot S_э^2$, а внедиагональные c_{ij} – ковариации коэффициентов a_i и a_j, позволяющие определить коэффициент корреляции $\rho\{a_i; a_j\}$ между a_i и a_j,

$$\rho\{a_i a_j\} = cov\{a_i a_j\}(\sigma^2\{a_i\} \cdot \sigma^2\{a_j\})^{-\frac{1}{2}} = c_{ij}\sqrt{c_{ii} c_{jj}}.$$

Расчетную модель (1) можно записать в виде

$$[\hat{Y}] = [X][Д][X]^T[Y].$$

До постановки эксперимента необходимо провести анализ ковариационной матрицы и подобрать такое расположение точек, чтобы коэффициенты корреляции были возможно меньше. Полное отсутствие корреляции будет тогда, когда ковариационная матрица, а, следовательно, и информационная матрица окажутся диагональными. Только диагональные элементы содержит информационная матрица $([X]^T[X])$ ортогонального плана

$$[X]^T[X] = \begin{pmatrix} \Sigma x_0^2 & \dots & 0 \\ 0 & \Sigma x_1^2 \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots \Sigma x_k^2 \end{pmatrix}.$$

Обратная матрица имеет вид

$$([X]^T[X])^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\Sigma x_0^2} & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{\Sigma x_1^2} \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 \dots & \frac{1}{\Sigma x_k^2} \end{pmatrix}.$$

Так как $[A]=([X]^T[X])^{-1}[X]^T[Y]$, то возможность нахождения матрицы коэффициентов регрессии зависит от того, существует ли обратная матрица, т.е.

$$|[X]^T[X]| = \prod_{i=1}^{k} X_k \neq 0$$

условие существования обратной матрицы.

Построение математической модели начинается с формулирования цели и задачи и изучения априорной информации, на основе которых выбирается τ — критериев оценки качества данной технологической операции y_i и K — основных факторов. Определение положения центра эксперимента проводится по формуле

$$x_{i\,осн} = \frac{x_{i\,max} + x_{i\,min}}{2},$$

где $x_{i\,осн}$ – основной уровень фактора;
$x_{i\,max}$ – верхний уровень;
$x_{i\,min}$ – нижний уровень.

Полуинтервал варьирования ΔX по каждому i -му фактору равен

$$\Delta x_i = \frac{x_{i\,max} - x_{i\,min}}{2}.$$

Переход от действительных значений факторов к кодированным

$$\tilde{X}_i = \frac{x_i - x_{i\,осн}}{\Delta x_i},$$

где $\tilde{X}_i$ – кодированное значение факторов.

Выбор плана эксперимента

С выбором плана эксперимента связан вопрос точности построения модели. В математической теории планирования эксперимента исследование точности предсказания выхода ведется не по величине $S^2\{\hat{Y}\}$, а по функции

$$d = [X]^T [M] [X],$$

которая при расчете $S^2\{\hat{y}\}$ учитывает свойства плана $[x]$

$$S^2\{\hat{y}\} = [X]^T [Д] [X_p] S_э^2 =$$

$$= [X]^T [M]^{-1} [X] S_э^2 N^{-1} = d S_э^2 N^{-1}.$$

Функция d используется при выборе плана эксперимента с определенным критерием оптимальности:

Q – критерий, т.е. $\min d = \sum_{i=1}^{N} [X_p]^T [M]^{-1} [X_p]$ обеспечивает минимум средней дисперсии оценки $\min \bar{S}^2\{\hat{y}\}$;

G – критерий, т.е. $\min \max d$ соответствует минимуму максимального значения дисперсии оценки $\min (S^2\{\hat{y}\})_{max}$;

критерий ротатабельности, т.е. $d = f(\rho)$ обеспечивает постоянство дисперсии предсказания на равных расстояниях от центра эксперимента.

Выбору того или иного плана эксперимента должен предшествовать анализ используемых планов с точки зрения различных критериев.

Перед проведением экспериментов целесообразно провести анализ следующих величин, характеризующих возможности выбранного плана эксперимента:

определителя нормированной информационной матрицы, M;

следа нормированной ковариационной матрицы, $tr\,Д$;

средней по областям a (куб) и b (шар) дисперсии оценки модели

$$\bar{d} = \int_{x} f^T(x) Д f(x) dx = \int_{x} d(x) dx;$$

максимального собственного значения ковариационной матрицы $x_{max}\,Д$,

максимального в областях a и b значения функции дисперсии оценки модели

$$\max_{x} f^T(x) Д f(x) = \max d(x) = d_{max};$$

максимального по модулю коэффициента корреляции оценок параметров, $|\rho|_{max}$.

В работе [3] представлены результаты сравнения планов второго порядка по этим шести критериям.

Чтобы оценить все коэффициенты математической модели, надо иметь план, в котором переменная варьировалась хотя бы на трех разных уровнях, и соответствующая матрица нормальных уравнений была бы невырожденной. Этому требованию отвечают ортогональные центральные композиционные планы (ОЦКП). Композиционный план для квадратичной модели можно получить добавлением некоторого количества точек к "ядру" плана, образованного планом для линейной модели [4]. Квадратичная модель в виде полинома второго порядка имеет вид

$$y = a_0 + a_1 x_1 + , \ldots , + a_n x_n + a_{n+1} \cdot x_1^2 + \ldots + \\ + a_{2n} \cdot x_n^2 + a_{2n+1} \cdot x_1 x_2 + \ldots + a_k x_{n-1} x_n . \qquad (3)$$

Свойство ортогональности плана второго порядка можно обеспечить выбором величины плеча α композиционного плана. Для этого необходимо преобразовать модель (3) к виду

$$\left.\begin{aligned} & y = b_0 + a_1 x_1 + \ldots + a_n x_n + a_{n+1}(x_1^2 - \beta) + \ldots + \\ & + a_{2n}(x_n^2 - \beta) + a_{2n+1} \cdot x_1 \cdot x_2 + \ldots + a_k x_{n-1} x_n ; \\ & \beta = \frac{\sum_{j=1}^{N} (x_i^j)^2}{N} = \frac{2^{n-p} + \alpha^2}{N} , \end{aligned}\right\} \qquad (4)$$

где N – общее число точек плана;
2^{n-p} – число точек ядра плана.

Общее число опытов в ОЦКП зависит от числа факторов

$$N = N_я + N_з + N_ц .$$

Ядро плана представляет ПФЭ 2^n при $n < 5$ или ДФЭ 2^{n-p} при $n \geqslant 5$ с числом опытов $N_я$.

$N_з$ – число опытов в звездных точках при определенном звездном плече α;

$N_ц$ – число опытов в центре плана.

Для перехода от модели (3) к (4) свободный член a_0 определяется по формуле

$$a_0 = b_0 - \beta \sum_{i=1}^{n} a_{n+i} . \qquad (5)$$

Матрица F ОЦКП имеет вид, приведенный в табл. 1.

Общее число точек плана $N = 2^{n-p} + 2n + 1$.

Условие для выбора значения α, обеспечивающего ортогональность плана, следующее

$$\alpha = \sqrt{2^{\frac{n-p}{2}-1} (\sqrt{N} - 2^{\frac{n-p}{2}})} . \qquad (6)$$

Таблица 1

	Номер опыта	x_0	Матрица F									
			Матрица x плана									
			x_1	x_2	...	x_n	$x_1^2-\beta$	...	$x_n^2-\beta$	x_1x_2	...	$x_{n-1}x_n$
Ядро плана	1	1	+1	+1	...	+1	$1-\beta$		$1-\beta$	1	...	1
	2	1	−1	+1		+1	$1-\beta$		$1-\beta$	1		1
	3	1	+1	−1		+1	$1-\beta$		$1-\beta$	1		.
	4	1	−1	−1		+1	.		.	.		.
	⋮	.	.	.		.	.		.	.		.
	2^{n-p}	.	.	.	...	.	$1-\beta$		$1-\beta$	...	...	...
Звездные точки	$2^{n-p}+1$	1	$+\alpha$	0	...	0	$\alpha^2-\beta$		$-\beta$	...	...	
	$2^{n-p}+2$	1	$-\alpha$	0		0	$\alpha^2-\beta$		$-\beta$			0
	⋮	.	0	$+\alpha$		0	$-\beta$		.			0
		.	0	$-\alpha$		0	$-\beta$		.			
		.	⋮	⋮			⋮		.			
		1	0	0		$+\alpha$	$-\beta$		$\alpha^2-\beta$			0
	$2^{n-p}+2n$	1	0	0	...	$-\alpha$	$-\beta$		$\alpha^2-\beta$	...	...	0
Центр плана	$N=2^{n-p}+2n+1$	1	0	0	...	0	$-\beta$		$-\beta$	0	...	0

Вычислив длину звездного плеча α по (6), можно получить ортогональный план второго порядка.

Информационная матрица ОЦКП имеет вид

$$M = \begin{bmatrix} m_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & m_1 J_n & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m_2 J_n & 0 \\ 0 & 0 & 0 & m_3 J\binom{n}{2} \end{bmatrix},$$

где

$$m_0 = N = 2^{n-p} + 2n + 1;$$

$$m_1 = 2^{n-p} + 2\alpha^2;$$

$$m_2 = 2^{n-p}(1-\beta)^2 + 2(\alpha^2-\beta)^2 + (2n-1)\beta^2;$$

$$m_3 = 2^{n-p},$$

J_n – единичная матрица размера n;

$\binom{n}{2}$– число сочетаний из n по 2.

Тогда дисперсионная матрица плана имеет следующий вид:

$$C = \begin{bmatrix} C_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & C_1 J_n & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C_2 J_n & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_3 J_{\binom{n}{2}} \end{bmatrix},$$

$$C_i = m_i^{-1}.$$

Проведение эксперимента

Эксперимент для нахождения оценки $\hat{a}$ истинного значения вектора коэффициентов $\bar{a}$ проводится в N –точках

$$x^1, x^2, \ldots, x^N$$

с координатами

$$x^i = (x^i_1, x^i_2, \ldots, x^i_n).$$

Результаты наблюдений $\tilde{y}^i$ в точках x^i представляются с помощью вектора наблюдений

$$\tilde{y} = (\tilde{y}^1, \tilde{y}^2, \ldots, \tilde{y}^N).$$

Оценка $\hat{y}$ для y рассчитывается по формуле

$$\hat{y} = \hat{a} X. \tag{7}$$

В каждой точке x^i может быть поставлено в зависимости от трудоемкости, стоимости γ опытов, результатами которых будут

$$\tilde{y}^{i1}, \tilde{y}^{i2}, \ldots, \tilde{y}^{i\gamma}.$$

В качестве $\tilde{y}^i$ используется среднее значение наблюдений в точке x^i

$$\tilde{y}^i = \gamma^{-1}(\tilde{y}^{i1} + \tilde{y}^{i2} + \ldots + \tilde{y}^{i\gamma}).$$

Предполагается, что результаты наблюдений независимы, распределены нормально и имеют одну и ту же дисперсию σ^2, что математическое ожидание результатов наблюдений равно истинным значениям целевой величины.

Задача состоит в том, чтобы на основе результатов (7) найти наилучшие в определенном смысле оценки коэффициентов $\hat{a}$ и $\hat{y}$.

Оценивание параметров модели

Оценки $\hat{a}$ коэффициентов модели рассчитываются в соответствии с формулами

$$\hat{a}_i = \begin{cases} c_1 \cdot \sum\limits_{j=1}^{N} x_i^j \cdot \tilde{y}^j, & i = 1, \ldots, n, \\ c_2 \cdot \sum\limits_{j=1}^{N} [(x_{i-n}^j)^2 - \beta]\tilde{y}^j, & i = n+1, \ldots, 2n, \\ c_3 \cdot \sum\limits_{j=1}^{N} x_\mu^j \cdot x_\lambda^j \cdot \tilde{y}^j, & \mu, \lambda = 1, \ldots, n, \\ & \mu \neq \lambda, \\ & i = 2n+1, \ldots, k. \end{cases} \tag{8}$$

Оценка $\hat{b}_0$ рассчитывается по формуле

$$\hat{b}_0 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \tilde{y}^j.$$

Для $\hat{a}_0$ имеем

$$\hat{a}_0 = \hat{b}_0 - \beta \sum_{i=1}^{n} \hat{a}_{n+i}. \tag{9}$$

Определение ошибок оценивания коэффициентов модели

Ошибки $\hat{a}_i$ отличаются от истинных значений коэффициентов, причем чем больше дисперсия ошибок наблюдений $\sigma_э$, тем больше ошибка. Показателями точности оценок $\hat{a}_i$ и величины $\hat{y}$ являются дисперсии σ_i^2 и $\sigma_{\hat{y}}^2$ соответственно. Эти дисперсии зависят не только от дисперсии ошибок наблюдений $\sigma_э^2$, но и от матрицы планирования.

При известной дисперсии ошибки наблюдения дисперсия σ_i оценки $\hat{a}_i$ рассчитывается по формуле

$$\sigma_i^2 = C_{ii} \cdot \sigma_э^2, \tag{10}$$

где C_{ii} – диагональные элементы ковариационной матрицы;

$\sigma_э$ – дисперсия ошибки наблюдения.

Однако в общем случае дисперсия ошибок наблюдений $\sigma_э^2$ неизвестна и должна быть оценена с помощью полученных экспериментальных данных. При этом может быть использована остаточная сумма квадратов $S^2(\hat{a})$

$$S(\hat{a}) = \sum_{i=1}^{N} (\tilde{y}^i - \hat{y}^i)^2 .$$

Эта сумма квадратов имеет $f = N - k - 1$ число степеней свободы.

Тогда

$$S_э^2 = \frac{S(\hat{a})}{f} -$$

несмещенная оценка дисперсии ошибок наблюдений $\sigma_э^2$.

Оценка S_i^2 для дисперсии σ_i^2 вычисляется аналогично (9) с помощью выражения

$$S_i^2 = C_{ii} \cdot S_э^2 . \tag{11}$$

Методы определения ошибки наблюдения $\sigma_э^2$ или среднеквадратичной ошибки эксперимента зависят от схемы организации этого эксперимента.

Статистическую зависимость между коэффициентами модели a_i и a_j определяет ковариация $\mathrm{cov}\{a_i a_j\}$, количественная мера этой связи – коэффициент корреляции $\rho_{ij}\{a_i a_j\}$, который равен нулю, если равны нулю внедиагональные элементы C_{ij} ковариационной матрицы Д. Коэффициент корреляции между $\hat{a}_i$ и $\hat{a}_j$ определяется согласно выражению

$$\rho_{ij}^2 = \frac{C_{ij}^2}{C_{ii} \cdot C_{jj}} ,$$

где C_{ij} – внедиагональные элементы ковариационной матрицы.

Если для некоторой оценки коэффициента a_i все ковариации $\operatorname{cov}\{a_i a_j\}$ равны нулю, то можно корректно установить его доверительные границы, определить критические значения коэффициента, ниже которого расчетные значения a_i допустимо считать равными нулю и оценить вклад соответствующего эффекта a_i в изменение изучаемого выхода y. Оценка дисперсии предсказанного значения $S^2(\hat{y})$ находится из общей теории ошибок косвенных измерений [5].

Для ортогональных планов полного факторного эксперимента и ДФЭ, имеющих нулевую корреляцию между всеми коэффициентами регрессии и равенство всех оценок дисперсий, т.е.

$$S^2\{a_0\} = S^2\{a_i\} = S^2\{a_{ij}\} = S^2\{a_j\} = S^2_э \cdot N^{-1},$$

получим выражение

$$S^2\{\hat{y}\} = S^2_э \cdot N^{-1}\left(1 + \sum_i x_i^2 + \sum x_i^2 x_j^2 + \sum x_j^2\right).$$

Проверка значимости коэффициентов модели

При проверке значимости коэффициентов модели величина ε, соответствующая выбранному уровню значимости $\alpha = 1 - p$ и числу степеней свободы f, обозначается $t_{кр}$ и называются критическим распределением Стьюдента. В общем случае оценка $\hat{a}_i$ и ее дисперсия зависят от оценок всех других коэффициентов.

Коэффициент a_i считается значимо отличающимся от нуля, если

$$|\hat{a}_i| > t_{кр} \cdot S_i . \qquad (12)$$

Значение $t_{кр}$ находится из условия

$$p(|t| > t_{кр}) = \alpha . \qquad (13)$$

Если матрица диагональна (все $\rho\{a_i a_j\} = 0$), то вышеизложенная процедура корректна для всех коэффициентов модели. Поскольку $\rho\{a_i a_j\} = 0$; то из модели можно удалять статистически незначимые коэффициенты (для них $a_i < a_{кр}$ или $t_{кр} < t_{табл.}$) без пересчета числовых оценок остальных коэффициентов, что значительно облегчает анализ полиномиальных моделей. Этим преимуществом обладает ортогональный центральный композиционный план.

Проверка адекватности математической модели

Для проверки гипотезы об адекватности модели необходимо сопоставить достигнутую точность модели с точностью наблюдений.

Методики проверки адекватности модели при отсутствии оценки для дисперсии воспроизводимости и при ее наличии различны. При наличии дисперсии воспроизводимости, которая может быть оценена по результатам нескольких параллельных опытов в каждой экспериментальной точке, проверять адекватность модели экспериментальным данным можно по F -критерию.

Для проверки адекватности необходимо сравнить две суммы квадратов:

сумму квадратов, характеризующую неадекватность модели

$$S_{ост} = \sum_{i=1}^{N} (\tilde{y}^i - \hat{y}^i)^2,$$

где $\tilde{y}^i$ – наблюдаемые значения выходной переменной;

$\hat{y}^i$ – рассчитанные значения выходной переменной;

сумму квадратов, характеризующую ошибки наблюдений

$$S_e = \sum_{i=1}^{N} (\tilde{y}^{ij} - \tilde{y}^i)^2.$$

Если полиномиальная модель строилась по N экспериментальным точкам, содержащим параллельные опыты $(n_u > 1)$ и измерения $(m_u > 1)$, то $S_{ост}$ – сумма двух величин

$$S_{ост} = S_{на} + S_э,$$

$S_{на}$ – сумма квадратов отклонений средних экспериментальных значений выходов $\bar{y}_u$ и рассчитываемых по модели значений $\hat{y}_u$;

$S_э$ – сумма квадратов отклонений, связанная с повторением опытов и измерений, характеризующая точность измерений и воспроизводимость опытов.

Число степеней свободы величин $S_{ост}$, $S_{на}$ и $S_э$ зависит от общего числа измерений $N_{общ}$, числа экспериментальных точек N и числа значимых коэффициентов регрессии λ, включая a_0:

$$f_{ост} = N_{общ} - \lambda,$$
$$f_{на} = N - \lambda,$$
$$f_э = N_{общ} - N.$$

Зная S_i и соответствующие f_i, можно рассчитать оценки дисперсий:

$$S^2_{ост} = SS_{ост} : f_{ост}; S^2_{на} = SS_{на} : f_{на}; S^2_э = SS_э : f_э .$$

$S^2_э$ в данном случае определяет величину дисперсии среднего, рассчитанного по n наблюдениям. Оценка дисперсии $S^2_э$ ошибки единичного наблюдения равна

$$S^2_{э1} = n \cdot S^2_э ,$$

где n – число опытов в каждой точке плана.

Для проверки адекватности модели формируется нуль-гипотеза $H_o : \sigma^2_{на} = \sigma^2_э$, которая представляет собой некоторое предложение о случайной величине $F = \sigma^2_{на} / \sigma^2_э$, например, о виде функции распределения. Статистической проверкой необходимо установить, насколько данные из выборки согласуются с высказанной гипотезой, т.е. можно ли на их основании принять или отвергнуть гипотезу. Проверка гипотезы: устанавливается область K, в которую в случае справедливости гипотезы H_o значение величины F попадает с вероятностью p, равной заданной величине α. Если она по критерию Фишера будет признана правдоподобной ($F < F_{табл.}$) при заданном уровне значимости α, то модель адекватно описывает экспериментальные результаты, поскольку $\sigma^2_{на} = \sigma^2_э$ – предсказываемые моделью результаты $\bar{y}_u$ будут по точности не хуже экспериментальных $\bar{y}_u$.

Частное от деления оценки дисперсии неадекватности на оценку дисперсии ошибки единичного наблюдения

$$F = S^2_{на} : S^2_{э1} = \frac{SS_{на} : f_{на}}{SS_{э1} : f_э}$$

в случае, когда модель адекватна, – случайная величина, подчиненная F-распределению с числами степеней свободы $f_{ка}$ и $f_э$.

Проверка информационной способности модели

Для проверки информационной способности модели формируется нульгипотеза H_o:

$$\sigma^2_{общ}\{y\} = \sigma^2_{на} ,$$

где $\sigma^2_{общ}\{y\}$ – общее рассеяние результатов измерений y_{uvw} по отношению к общему среднему y по всему эксперименту. Для проверки информационной способности, как и в случае проверки адекватности модели, используется F_u - критерий Фишера. Если такая гипотеза по критерию F_u

$$F_u = S^2_{общ}\{y\} : S^2_{на}$$

будет отклонена ($F_u > F_{кр}$) при заданном α, то модель, имеющая дисперсию неадекватности $S^2_{на}$, описывает результаты эксперимента лучше, чем простейшая модель $\hat{y} = \bar{y}$, в которой при любом наборе значений x_i выход не изменяется и равен среднему $\bar{y}$. Если $F_u < F_{кр}$, то такая модель не имеет информационной ценности. Ошибка прогноза по сравнению с моделью $\hat{y} = \bar{y}$ составляет

$$\theta_u(\%) = 100(\sqrt{F_u} - 1).$$

Построение экспериментально-статистической модели процесса нанесения сплава олово-свинец

В настоящей работе для экономии припоя, повышения качества паянных соединений, снижения температуры припоя и получения максимально высокой паяемости печатных плат предлагается сузить интервал допустимого содержания олова в сплаве олово-свинец до 60...65%, т.е. приблизить к эвтектической точке.

Задача исследования на первом этапе формируется следующим образом: необходимо найти такой электролит гальванического нанесения сплава олово-свинец, который обеспечил бы получение 60...65% олова в покрытии печатных плат.

Для покрытия печатных плат сплавом олово-свинец использовался электролит следующего состава:

олово борфтористоводородное	- 40...60 г/л;
свинец борфтористоводородный	- 25...40 г/л;
кислота борная свободная	- 40...50 г/л;
кислота борфтористоводородная	- 40...80 г/л;
мездровый клей	- 3...5 г/л;
Режим: плотность тока $d_к$,	- 1...2 а/дм^2;
температура t	- 18...25 °С.

В качестве функций отклика (параметров оптимизации) выбрано процентное содержание олова в сплаве олово-свинец: y_1 - в центре платы, y_2 - по краям. Независимые факторы, влияющие на выходной параметр:

x_1 - концентрация олова в электролите, г/л;

x_2 - концентрация свинца в электролите, г/л;

x_3 - концентрация борфтористоводородной кислоты, г/л;

x_4 – концентрация мездрового клея в электролите, г/л;

x_5 – плотность тока, а/дм^2;

x_6 – частота перемешивания электролита.

Методом планирования эксперимента определялось математическое описание процесса в виде полного квадратичного полинома (2).

Для этого использовалось ортогональное центральное композиционное планирование эксперимента.

Общее число опытов в ОЦКП для шести факторов $N = 29$.

Длина звездного плеча α, обеспечивающего ортогональность плана 2-го порядка, вычисляется по формуле (6)

$$\alpha = 1{,}7.$$

Тогда β согласно (4) равняется

$$\beta = 0{,}65.$$

Факторы и уровни их варьирования представлены в табл. 2.

Таблица 2

Уровни / Факторы	Кодовые обозначения	$x_i = 1{,}7$ (звездная точка)	$x_{i\,min} = -1$ (нижний уровень)	$x_i = 0$ (основной уровень)	$x_i = 1$ (верхний уровень)	$x_i = 1{,}7$ (звездная точка)	шаг варьирования
$Sb(BF_4)_2$	x_1	20	28,4	40	51,6	60	11,6
$Pb(BF_4)_2$	x_2	15	21,3	30	38,7	45	8,7
HBF_4	x_3	30	55	90	125	150	35
Мездровый клей	x_4	0,5	2,5	5,25	8	10	2,75
Плотность тока	x_5	0,5	0,92	1,5	2,08	2,5	0,58
Перемешивание	x_6	0	10	22,5	35	45	13

Вычисление значений факторов в звездных точках проводится по формуле

$$X = \alpha \cdot \frac{\Delta x}{2} + x_0 ,$$

где x_0 – нулевой уровень;

Δx – шаг варьирования фактора (от "–" до "+");

$\alpha = 1,7$.

Данные, занесенные в табл. 2, рассчитываются следующим образом для x_1:

$$20 = -1,7 \frac{\Delta x_1}{2} + 40 , \qquad \text{откуда } \frac{\Delta x_1}{2} = 11,6$$

и значения

$$x_{1\,max}^{(+)} = x_{01} + \frac{\Delta x_1}{2} = 40 + 11,6 = 51,6 ;$$

$$x_{1\,min}^{(-)} = x_{01} - \frac{\Delta x_1}{2} = 40 - 11,6 = 28,4 .$$

Для x_2:

$$15 = -1,7 \cdot \frac{\Delta x_2}{2} + 30 ; \qquad \frac{\Delta x_2}{2} = 8,7 ;$$

$$x_{2\,max}^{(+)} = 38,7 ;$$

$$x_{2\,min}^{(-)} = 21,3 \quad \text{и т.д.}$$

Ядро плана в данном примере представляло дробный факторный эксперимент с использованием 1/4-реплики (2^{6-2}), с генераторами $x_5 = x_1 x_3$ и $x_6 = x_1 x_4$. 12 опытов проведено в звездных точках (при $\alpha = 1,722$) и один в центре плана.

Для ортогонального плана информационная матрица является диагональной

$$M = \begin{vmatrix} m_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & m_1 J_n & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m_2 J_n & 0 \\ 0 & 0 & 0 & m_3 J(\frac{n}{2}) \end{vmatrix}$$

для $n = 6$ имеет вид

$$M = \begin{vmatrix} 29 & & 0 \\ & X_i & \\ & 0 \quad X_i^2 & \\ & & X_i X_j \end{vmatrix}, \text{ где } X_i = \| x_{k\ell} \|_{6\times 6}, \text{ причем } x_{k\ell} = 21;$$

$$X_i^2 = \| x_{k\ell} \|_{6\times 6} \text{ причем } x_{k\ell} = 16{,}6;\ X_i X_j = \| x_{k\ell} \|_{15\times 15}, \text{ причем } x_{k\ell} = 16.$$

Матрица M есть матрица системы нормальных уравнений, из решения которой находятся оценки коэффициентов модели

$$m_0 = N = 2^{n-p} + 2\cdot n + 1 = 2^{6-2} + 2\cdot 6 + 1 = 29,$$

$$m_1 = 2^{n-p} + 2\alpha^2 = 2^{6-2} + 2\cdot 3 = 16 + 16 = 22;$$

$$m_2 = 2^{n-p}(1-\beta)^2 + 2(\alpha^2-\beta)^2 + (2n-1)\beta^2 =$$

$$= 2^{6-2}(1-0{,}65)^2 + 2(1{,}7^2 - 0{,}65)^2 +$$

$$+ (2\cdot 6 - 1)\cdot 0{,}65^2 = 16{,}6;$$

$$m_3 = 2^{n-p} = 2^{6-2} = 16;$$

J_n – единичная матрица размера n ;

$\binom{n}{2}$ – число сочетаний из n по 2.

Общее число неизвестных коэффициентов модели равно

$$(K+1) = \binom{n+2}{2} = \frac{(n+2)(n+1)}{2} = 28,$$

из них один коэффициент при x_0 , шесть – при x_i , шесть – при x_i^2 , пятнадцать – при $x_i x_j$.

Отсюда получим следующее выражение для дисперсионной матрицы плана

$$C = \begin{vmatrix} C_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & C_1 J_n & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C_2 J_n & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_3 J\binom{n}{2} \end{vmatrix},$$

где $C_i = m_i^{-1}$;

для $n = 6$ имеем

$$C_0 = m_0^{-1} = \frac{1}{29} = 0{,}034;\quad C_1 = m_1^{-1} = \frac{1}{21} = 0{,}047;$$

$$C_2 = m_2^{-1} = \frac{1}{16{,}6} = 0{,}06;\quad C_3 = m_3^{-1} = \frac{1}{16} = 0{,}062.$$

Оценивание параметров модели

Оценки $\hat{a}_i$ коэффициентов модели рассчитываются в соответствии с формулами (8...9) по данным, приведенным в табл. 3, например, при $n = 6$, коэффициент при x_1 $\hat{a}_1 = 6,46$;

при x_6 $\hat{a}_6 = -2,0$;

коэффициент при x $\hat{a}$ = 10,38;

коэффициент при x $\hat{a}$ = 1,38:

при $n = 6$ $\hat{a}_0 = 15,5$.

Получили модель процесса осаждения сплава олово-свинец в виде

$$
\begin{aligned}
y = {} & 15,5 + 6,46x_1 - 9,33x_2 - 1,02x_3 + 2,03x_4 + \\
& + 4,4x_5 - 2x_6 + 1,38x_1x_2 + 3,39x_1x_3 - 1,48x_1x_4 - \\
& - 0,46x_1x_5 + 0,8x_1x_6 + 1,43x_2x_3 + 0,013x_2x_4 - \\
& - 2,75x_2x_5 - 0,34x_2x_6 - 0,35x_3x_4 + 6,31x_3x_6 + 0,54x_3x_6 + \\
& + 0,54x_4x_5 + 6,31x_4x_6 - 0,35x_5x_6 + 10,38x_1^2 + \\
& + 11,38x_2^2 + 10,7x_3^2 + 6,36x_4^2 + 6,6x_5^2 + 9,21x_6^2.
\end{aligned}
\tag{14}
$$

Определение ошибок оценивания коэффициентов модели

Оценка дисперсии ошибок наблюдений эксперимента зависит от схемы его организации. Для данной схемы (серия из $m = 5$ параллельных опытов с одним измерением в каждом) оценки вычисляются следующим образом:

$$
\begin{aligned}
S_e^2 = S_{i/v}^2 = \frac{1}{m-1}\sum_{v=1}^{m}(\bar{y}_{i/v} - y_{iv})^2 = \frac{1}{5-1}\big[(45,26-50,94)^2 + \\
+ (52,20-50,94)^2 + (52,07-50,94)^2 + (52,20-50,94)^2 + \\
+ (51,0-50,94)^2 = 4,49;
\end{aligned}
$$

$$
\bar{y}_{i/v} = \frac{1}{m}\sum_{v=1}^{m} y_{iv} = \frac{1}{5}(47,26+52,20+52,07+52,20+51) = 50,94.
$$

Оценки S_i^2 дисперсий σ_i^2 величин $\hat{a}_i$ получают по формуле (11).

При $n = 6$

$$S_0^2(a_0) = \frac{S \cdot c_0}{m} = \frac{4{,}49 \cdot 0{,}034}{5} = 0{,}03,$$

где m – число параллельных опытов;

$$S_0(a_0) = 0{,}17;$$

$$S_1^2(a_1) = S_2^2(a_2) = \ldots = S_6^2(a_6) = \frac{4{,}49 \cdot 0{,}047}{5} = 0{,}042;$$

$$S_1 = S_2 = \ldots S_6 = 0{,}2.$$

Для квадратичных членов

$$S_7^2(a_7) = S_8^2(a_8) = \ldots = S_{12}^2(a_{12}) = \frac{4{,}49 \cdot 0{,}061}{5} = 0{,}053;$$

$$S_7 = S_8 = \ldots = S_{12} = 0{,}23.$$

Для смешанных членов

$$S_{13}^2(a_{13}) = S_{14}^2(a_{14}) = \ldots = S_{27}^2(a_{27}) = \frac{4{,}49 \cdot 0{,}062}{5} = 0{,}055;$$

$$S_{13} = S_{14} = \ldots = S_{27} = 0{,}23.$$

Проверка значимости коэффициентов модели

Проверка проводится по критерию Стьюдента. Коэффициент a_i считается значимо отличающимся от нуля, если

$$|\hat{a}_i| > t_{кр} \cdot S_i.$$

Значение $t_{кр}$ находится из таблицы в [4] при заданном уровне значимости α и числе степеней свободы f, например, при $\alpha = 0{,}05$

$$t_{p_0} = \frac{|\hat{a}|}{S_0(a_0)} = \frac{15{,}5}{0{,}17} = 91{,}1, \quad \text{так как } t_{p_0} > t_{кр},$$

то коэффициент $\hat{a}_0$ значим;

$$t_{p_1} = \frac{|\hat{a}_1|}{S_1(a_1)} = \frac{6{,}46}{0{,}2} = 32{,}3, \quad \text{так как } t_{p_1} > t_{кр},$$

то коэффициент $\hat{a}_1$ значим;

$$t_{p_{13}} = \frac{|\hat{a}_{13}|}{S_{13}(a_{13})} = \frac{0{,}013}{0{,}2} = 0{,}065, \quad \text{так как } t_{p_{13}} < t_{кр},$$

то коэффициент $\hat{a}_{13}$ незначим;

$$t_{p_{28}} = \frac{|\hat{a}_{28}|}{S_{28}(a_{28})} = \frac{9,21}{0,23} = 40,05 \text{ , так как } t_{p_{28}} > t_{кр},$$

то коэффициент $\hat{a}_{28}$ значим.

Из уравнения (14) можно удалить все статистически незначимые коэффициенты без пересчета числовых оценок остальных коэффициентов.

Проверка адекватности математической модели

Для проверки адекватности необходимо сравнить две суммы квадратов:

сумму квадратов, характеризующую неадекватность модели,

$$S_{ост} = S_{д};$$

сумму квадратов, характеризующую ошибки наблюдения, S_2

Для данного примера

$$S_{ост} = S_{д} = 1,2; \quad S_2 = 4,49.$$

Величину F -критерия находят по формуле

$$F = \frac{S_{д}/f_1}{S_2/f_2},$$

где

$$f_1 = N - K - 1 = 29 - 15 - 1 = 13,$$

$$f_2 = N(\gamma - 1) = 29\,(3 - 1) = 58$$

Величина $F = (S_{д} \cdot 58)/(S_2 \cdot 13) < F_{кр} = 1,55$

при $\alpha = 0,95$, $f_1 = 13$, $f_2 = 58$.

Следовательно, модель адекватно описывает данный процесс.

В случае неадекватности математической модели можно повысить степень полинома, изменить интервалы варьирования факторов, ввести новые факторы или исключить часть существующих.

При применении ортогональных планов все коэффициенты оцениваются независимо. Это значит, что изменение оценки любого коэффициента, например, исключение соответствующего члена из уравнения, не приводит к изменению других оценок и их дисперсий.

Ли

1. Райбман Н.С. Основы управления технологическими процессами. – М.: Наука, 1978.

2. Рузинов Л.П. Статистические методы оптимизации химических процессов. – М.: Химия, 1972.

3. Налимов В.В., Голикова Т.И. Логические основания планирования экспериментов. – М.: Металлургия 1976.

4. Планирование эксперимента в исследовании технологических процессов. (Под. ред. К.Хартмана). – М.: Мир, 1977.

5. Воскресенский В.А., Ковальчук А.Ф. Принятие решений по статистическим моделям. – М.: Статистика, 1978.