

ПОВЫШЕНИЕ ТОЧНОСТИ ОЦЕНИВАНИЯ НА ОСНОВЕ ПЛАНИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА

С.А.Попов

INCREASING THE ESTIMATION ACCURACY BASED ON DESIGN OF EXPERIMENTS

S.A.Popov

Политехнический институт НовГУ, stanislav.popov@novsu.ru

Рассматривается точность метода оценивания параметров многооткликной модели и их ковариационная матрица, полученные на основании оптимального планирования экспериментов. Предлагается метод построения априорных последовательных планов эксперимента, позволяющих получить необходимую точность оценивания.

Ключевые слова: многооткликная модель, оценивание параметров модели, точность оценивания, план эксперимента

This paper considers the accuracy of the method for estimating multiresponse model parameters and their covariance matrix obtained on the basis of optimal design of experiment. The design method of building a priori and sequential design of experiment which allows obtaining required estimation accuracy is provided.

Keywords: multiresponse model, model parameters estimation, estimation accuracy, design of experiment

Введение

Моделирование зависимости выходных переменных электронных приборов от физических параметров структур этих приборов позволяет оптимизировать технологию производства и повысить выход годных изделий. Однако выполнить измерения физических параметров отдельного электронного прибора часто практически невозможно. Основные недостатки экспериментальных методов измерения физических параметров моделей состоят в следующем:

- они являются сугубо специализированными;
- не обладают достаточной точностью;
- не дают статистических характеристик полученных оценок параметров;
- для упрощения расчетов используют различного рода допущения, влияние которых на точность получаемых моделей часто не исследовано; такие допущения чаще всего недостаточно обоснованы, а в некоторых ситуациях такой подход может приводить к большим погрешностям оценивания параметров.

— отсутствие статистических характеристик получаемых оценок не дает возможности выполнить статистический анализ по партиям приборов.

Задачу определения физических параметров можно решать статистическим методом. Проблема определения параметров моделей в этом случае формулируется как задача получения статистических оценок параметров многооткликной модели по экспериментальным данным. Расчет параметров с помощью многооткликных моделей подразумевает использование всех экспериментальных данных при оценивании всех параметров, что должно повысить точность расчетов и дать возможность определить ковариационные матрицы этих параметров.

Проблемы оценивания параметров многооткликной модели и пути их решения

Многооткликную модель прибора можно представить в виде нелинейной по X и по B функции в виде [1]

$$Y = F(B, X) + E, \quad (1)$$

где $Y = \{y_1, y_2, \dots, y_m\}^T$ — вектор наблюдаемых (зависимых) выходных переменных (отклик), $X = \{x_1, x_2, \dots, x_k\}^T$ — вектор независимых входных переменных, $F(X, B) = \{f_1(X, B), f_2(X, B), \dots, f_m(X, B)\}^T$ — вектор нелинейных функций, $B = \{b_1, b_2, \dots, b_l\}^T$ — вектор физических параметров, значения которых неизвестны, E — вектор ошибок наблюдений с нулевым математическим ожиданием и с ковариационной матрицей V_E .

Разлагая функцию (1) в ряд Тейлора и ограничиваясь линейными членами, можно получить выражение для ковариационной матрицы V_B оценок параметров в следующем виде:

$$V_B = \left[\sum_{j=1}^n P(X_j, \hat{B}) V_E^{-1} [P(X_j, \hat{B})]^T \right]^{-1} \quad (2)$$

где $P(X_j, \hat{B}) = \left\{ \frac{\partial f_1(X_j, \hat{B})}{\partial B}, \frac{\partial f_2(X_j, \hat{B})}{\partial B}, \dots, \frac{\partial f_m(X_j, \hat{B})}{\partial B} \right\}$ — матрица производных многооткликной функции по параметрам, X_j — значения входных переменных, при которых проводились наблюдения выходных переменных Y_j .

Обобщенный показатель точности оценивания параметров представляется определителем матрицы $D = \det V_B$, а его величина зависит от расположения точек X_j в области проведения эксперимента (об-

ласть планирования эксперимента). Максимально правдоподобные оценки параметров модели рассчитываются с помощью итерационной процедуры [2]:

$$\mathbf{B}^{s+1} = \mathbf{B}^s + \rho^s \left[\sum_{j=1}^n \mathbf{P}(\mathbf{X}_j, \mathbf{B}^s) \mathbf{V}_E^{-1} \mathbf{P}(\mathbf{X}_j, \mathbf{B}^s)^T \right]^{-1} \times \sum_{j=1}^n \mathbf{P}(\mathbf{X}_j, \mathbf{B}^s) \mathbf{V}_E^{-1} [\mathbf{Y}_j - \mathbf{F}(\mathbf{X}_j, \mathbf{B}^s)] \quad (3)$$

где коэффициент ρ используется для устранения расхождения итерационной процедуры расчета.

Однако на практике определение параметров с помощью реальных моделей оказывается весьма сложным. Проблема оценивания параметров по экспериментальным данным обусловлена следующими факторами:

— необходимостью выделения существенных входных переменных, иначе матрица \mathbf{V}_B может быть плохо определенной [3];

— необходимостью задания ограничений на входные переменные для предотвращения расхождения процедуры расчета [4];

— сложностью задания вектора начальных приближений для обеспечения сходимости итерационной процедуры [5];

— возможностью при расчете по формуле (3) попадания в локальный минимум.

1. Определение существенных входных переменных для расчета определителя необходимо, чтобы матрица \mathbf{V}_B была хорошо определенной. Разлагая в ряд Тейлора выражение (1) по независимым переменным, приблизительно получим, что

$$\Delta \mathbf{Y}_{\max} \approx \Omega(\mathbf{X}, \mathbf{B}) \Delta \mathbf{X}_{\max}, \quad (4)$$

где $\Delta \mathbf{Y}_{\max}$ — вектор максимальных изменений выходных переменных; $\Delta \mathbf{X}_{\max}$ — вектор максимально возможных изменений входных переменных, \mathbf{B} и \mathbf{X} — априорные значения вектора коэффициентов модели и входных переменных.

Матрица $\Omega(\mathbf{B}, \mathbf{X})$ рассчитывается по формуле

$$\Omega^T = \left\{ \frac{\partial f_1(\mathbf{X}, \hat{\mathbf{B}})}{\partial \mathbf{X}}, \frac{\partial f_2(\mathbf{X}, \hat{\mathbf{B}})}{\partial \mathbf{X}}, \dots, \frac{\partial f_m(\mathbf{X}, \hat{\mathbf{B}})}{\partial \mathbf{X}} \right\}.$$

Для каждого $\Delta x_{j\max}$, где $j=1, k$, по формуле (4)

рассчитываются величины $\Delta y_{i\max}$, где $i=1, m$. Если значение $\Delta y_{i\max}$ оказывается меньше, чем ошибка наблюдения этой переменной, то входная переменная считается несущественной и либо диапазон ее изменения должен быть расширен, либо она должна быть исключена из модели вместе с соответствующими параметрами.

2. Наложение ограничений на параметры необходимо для предотвращения останова в случае, когда в модель входят такие выражения, как $\sqrt{[f(\mathbf{X}, \mathbf{B})]}$ или $\log[f(\mathbf{X}, \mathbf{B})]$, в которых функция в квадратных скобках должно быть положительной. Введение ограничений на входные переменные необходимо для обеспечения сходимости процедуры (3). Этой же цели служит введение коэффициента ρ для ограничения длины шага итерации.

3. Для выбора начальных приближений параметров необходимо проведение дополнительных исследований и определение предварительных величин параметров из физических соображений. Если удается определить обоснованный диапазон изменения параметров, то расчет по формуле (3) необходимо повторять многократно, выбирая величины начального вектора \mathbf{B} случайным образом из этого диапазона. Такой подход решает и проблему попадания в локальный минимум.

Если требования 1-3 удается выполнить, то в результате расчета по формуле (3) модель (1) будет идентифицирована, т.е. будут получены оценки параметров $\hat{\mathbf{B}}$ и определитель ковариационной матрицы параметров $D = \det \mathbf{V}_B$ для каждого отдельного прибора. Диагональные элементы матрицы \mathbf{V}_B представляют дисперсии соответствующих параметров, что позволяет выполнять сравнение величин параметров отдельных приборов и сравнение партий приборов. Это дает возможность статистически анализировать технологический процесс изготовления приборов и выполнять его оптимизацию. Однако если различия параметров отдельных приборов оказываются статистически незначимыми, то статистический анализ технологии оказывается невозможным. На практике обычно так и происходит, и встает необходимость значительного повышения точности оценивания параметров.

Априорное планирование эксперимента

Повышение точности оценивания параметров может быть обеспечено увеличением числа экспериментов n , однако на практике это часто оказывается неэффективным. Более эффективным методом повышения точности оценивания является планирование эксперимента. Оптимальное расположение точек эксперимента \mathbf{X}_j , $j=1, n$, позволяет повысить точность оценивания параметров модели при таком же числе экспериментов. План эксперимента в данном случае представляет собой совокупность точек наблюдений $\Pi = \{\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots, \mathbf{X}_n\}$ в заданной области планирования.

Критерий D -оптимальности требует такого расположения точек в области планирования Σ_X , при котором определитель матрицы \mathbf{V}_B минимален. Вид области планирования является очень важным условием задачи планирования, и изменение ее конфигурации приводит к существенному изменению оптимального плана. Таким образом, D -оптимальный план выражается следующим образом:

$$\det \mathbf{V}_B(\Pi^0) = \min_{\Pi \in \Sigma_X} \det \mathbf{V}_B(\Pi) = \max_{\Pi \in \Sigma_X} \det \left[\sum_{j=1}^n \mathbf{P}(\hat{\mathbf{B}}, \mathbf{X}_j) \mathbf{V}_E^{-1} [\mathbf{P}(\hat{\mathbf{B}}, \mathbf{X}_j)]^T \right], \quad (5)$$

где $\Pi^0 = \{\mathbf{X}_1^0, \mathbf{X}_2^0, \dots, \mathbf{X}_n^0\}$ — оптимальный план в смысле критерия D -оптимальности.

Экстремальная задача (5) имеет высокую размерность ml , где l — число параметров модели, m — число наблюдаемых переменных, и чрезвычайно

сложна в смысле сходимости вычислительной процедуры и затрат машинного времени. В данном случае задача осложняется тем условием, что план Π^0 должен быть дискретным, т. е. точки контроля должны принадлежать некоторому дискретному множеству допустимых точек наблюдения, и точным, поскольку число точек наблюдения должно быть точно определено до начала эксперимента. Построить D -оптимальный план до эксперимента, когда параметры модели неизвестны, можно только для линейных по параметрам моделей в виде $Y = P^T(X)B + E$. С учетом указанных выше ограничений, использовался следующий модифицированный алгоритм поиска оптимального плана эксперимента.

1. Задается количество точек наблюдения n и определяется произвольный начальный план эксперимента $\Pi^1 = \{X_1^1, X_2^1, \dots, X_n^1\}$.

2. Выбирается первая точка наблюдения для поиска частного экстремума X_1 .

3. Решается частная экстремальная задача для одной точки X_i наблюдения и при фиксированных остальных точках $X_1, X_2, \dots, X_i, \dots, X_n$ и определяется план Π^2 в виде

$$\Pi^2 = (X_1^1, X_2^1, \dots, X_i^2, \dots, X_n^1) = \max_{X_i \in \Sigma_X} \left\{ \det \left[\sum_{j=1}^n P^T(X_j) V_E^{-1} P(X_j) \right] \right\}.$$

4. Процедура в пункте 3 повторяется для всех точек плана.

5. Пункты 3-4 повторяются до достижения заданной точности расчетов, заданного количества итераций или до истечения заданного времени счета.

Для известных планов эксперимента, полученных таким образом для однооткликовых моделей, точки наблюдения группируются в некоторых значениях независимых переменных, что означает дублирование экспериментов при этих значениях переменных. В следующей таблице приведены результаты расчетов критериев оптимальности планов для линейной по параметрам модели в виде трехоткликового полного полинома третьей степени для различного количества точек наблюдения n . Ковариационная матрица ошибок наблюдений принималась диагональной. Были построены следующие планы эксперимента:

- 1) точный план с дублированием точек контроля Π^1 ;
- 2) точный план без дублирования точек контроля Π^2 ;
- 3) точный план Π^3 без дублирования при наличии 90%-й корреляции зависимых переменных;
- 4) Π^4 — равномерный план.

В таблице приводятся относительные значения критериев оптимальности планов Π^i по отношению к непрерывному оптимальному плану Π^0 :

$$\Delta_i = \frac{\det \{V_B(\Pi^i)\}}{\det \{V_B(\Pi^0)\}}, \quad i=1,2,3,4.$$

n	Δ_1	Δ_2	Δ_3	Δ_4
80	1,144	1,223	1,211	8,932
90	1,205	1,412	1,381	11,515
100	1,294	1,744	1,704	14,731
110	1,445	1,858	1,833	17,337

Таким образом, использование точных планов с дублированием точек наблюдений Π^1 вместо непрерывных не приводит к существенной потере точности. Для планов без дублирования Π^2 точность по сравнению с непрерывными планами снижается приблизительно в 1,5 раза. Учет корреляции ошибок наблюдения существенно на план эксперимента не влияет. В целом же использование процедуры планирования для данной модели повышает точность оценивания параметров по сравнению со случайным планом в 3-4 раза.

Для нелинейных по параметрам моделей для расчета детерминанта ковариационной матрицы оценок параметров необходимо знать сами параметры еще до эксперимента. Поэтому в данном случае можно рассчитывать только субоптимальный план, используя в качестве критерия оптимальности среднее значение определителя ковариационной матрицы для априорно заданного распределения параметров в виде интервалов их изменения. Тогда D -оптимальный план выражается следующим образом:

$$\det \{V_B(\Pi^0, B)\} = \max_{X \in \Sigma_X} \int \det \left[\sum_{j=1}^n P(X_j, B) V_E^{-1} P^T(X_j, B) \right] f(B) dB, \quad (6)$$

где величина $P(X, B)$ определяется выражением (2), а $f(B)$ — априорная (равномерная) плотность распределения коэффициентов модели в виде диапазонов изменения параметров B .

Значение интеграла в выражении (6) рассчитывалось методом статистических испытаний. Для i -го параметра можно определить относительную погрешность его оценивания d_i при заданном плане эксперимента в виде

$$d_i = \frac{\sqrt{v_{bi}}}{b_i}, \quad (7)$$

где b_i — величина оценки i -го параметра ($i=1, l$), v_{bi} — i -й диагональный элемент ковариационной матрицы оценок параметров V_B .

План эксперимента обеспечивает заданную погрешность оценивания, если

$$d \leq d_M, \quad (8)$$

где $d = \max_i d_i$, d_M — наибольшая относительная погрешность оценивания параметров.

Условие (8) определяет минимально необходимое количество наблюдений. В данной работе принималось, что $d_M = 10\%$. Исходя из этого требования, определялось количество наблюдений и оптимальный план эксперимента. Планы эксперимента были построены для ВАХ транзисторов типа КТ315А при использовании двухоткликовой модели

Гуммеля-Пуна, включающей 18 параметров: $\mathbf{B} = \{I_S, \beta_F, n_F, V_{AF}, I_{KF}, I_{SE}, n_E, \beta_R, n_R, V_{AR}, I_{KR}, I_{SC}, n_C, n_K, R_E, R_C, R_B, R_{BM}\}^T$ [6].

На рис.1 приведены зависимости минимального количества наблюдений от погрешности наблюдений для различных видов модели ВАХ: для полной модели и для моделей, предполагающих, что некоторые, наименее точно определяемые параметры, известны априорно.

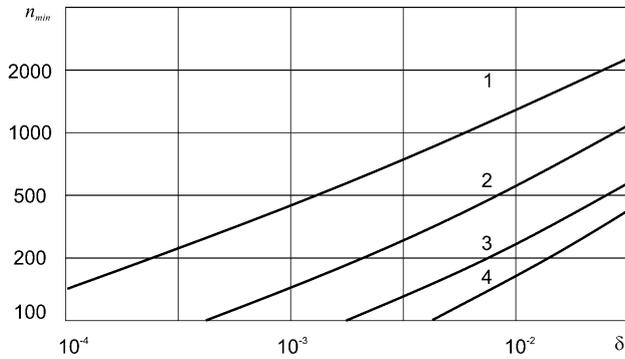


Рис.1. Зависимость минимально необходимого количества наблюдений n_{min} от величины относительной погрешности наблюдений δ для различных моделей ВАХ транзистора: полная модель, включающая все 18 параметров; модель без параметра n_K ; модель без параметров n_K и V_{AF} ; модель без параметров n_K, V_{AF} и V_{AR}

При относительной погрешности наблюдений $\delta = 10^{-3}$ и числе наблюдений $n = 500$ наибольшая относительная погрешность определения параметров модели d_M составила 225,4% для параметров V_{AF} и V_{AR} . Уменьшение количества наблюдений до 300 приводит к росту этой погрешности до 435%.

Последовательное планирование

Использование априорных планов эксперимента, которые строятся до эксперимента, основывается на среднем результате и не всегда обеспечивает необходимую точность определения параметров конкретного прибора. Поэтому использование такого планирования оправдано, когда план нужно построить до эксперимента, например, ввиду технических ограничений.

Процедура последовательного планирования обеспечивает более высокую точность оценивания при таком же количестве наблюдений. В этом случае задается некоторый заранее определенный план эксперимента с небольшим количеством точек наблюдений. В качестве такого плана эксперимента можно использовать, например, равномерный план. Используя этот план, выполняются наблюдения и рассчитываются оценки параметров модели (3). На основании полученных оценок отыскивается следующая точка наблюдения, обеспечивающая наилучшую точность оценивания. Количество наблюдений увеличивается до достижения необходимой точности оценивания параметров данного конкретного прибора. Алгоритм построения последователь-

ного плана может быть представлен следующим выражением:

$$\det\{V_B(\Pi + X_i^o, \mathbf{B})\} = \min_{X_i \in \Sigma_X} \det\{V_B(\Pi + X_i, \mathbf{B})\} = \max_{X_i \in \Sigma_X} \sum_{j=1}^{n_i} P(X_j, \mathbf{B}) V_E^{-1} P^T(X_j, \mathbf{B}), \quad (9)$$

где X^o — добавляемая в план Π точка эксперимента, $i=1.2....$ — количество добавленных в план точек эксперимента, n_i — количество точек в плане эксперимента после добавления i -й точки плана.

На рис.2 показаны зависимости величины d_M от количества наблюдений для равномерного и последовательного планов эксперимента.

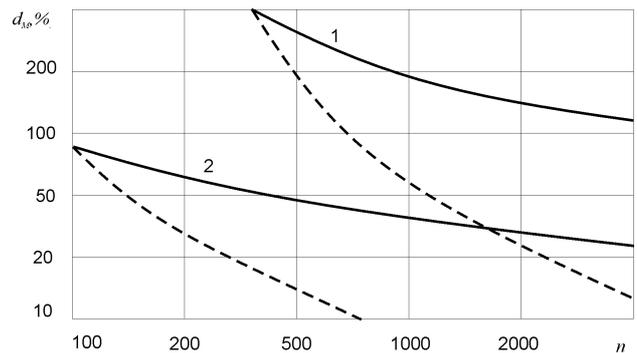


Рис.2. Зависимость наибольшей относительной погрешности оценивания параметров d_M модели ВАХ транзистора от количества наблюдений для равномерного плана (сплошная линия) и для последовательного плана (пунктирная линия) для относительной погрешности наблюдений $\delta = 10^{-3}$ (1) и $\delta = 10^{-4}$ (2)

При использовании последовательных планов наибольшая относительная погрешность оценивания параметров d_M для 500 наблюдений составляла 48%, т.е. в 4,7 раза меньше, чем для априорного плана эксперимента.

Заключение

Процедура оценивания параметров модели начинается с расчета оценок по формуле (3) для априорного распределения параметров. На первом этапе оценивания параметров модели строится равномерный план эксперимента. Количество экспериментов определяется по графику на рис.1. Начальные приближения коэффициентов задаются методом статистических испытаний с использованием равномерного распределения параметров в пределах заданных ограничений. Применяя зависимости, приведенные на рис.1, определяется минимально необходимое количество наблюдений для начала процедуры последовательного планирования. Расчет продолжается до тех пор, пока не будут получены оценки параметров с приемлемой точностью. На втором этапе последовательное планирование эксперимента обеспечивает достижение требуемой точности оценок параметров модели. На практике для ВАХ транзистора оказывается достаточно 600-800 наблюдений для получения достаточно точных оценок параметров.

1. Федоров В.В. Теория оптимального эксперимента. М.: Наука, 1971. 312 с.
2. Бард Й. Нелинейное оценивание параметров. М.: Статистика, 1979. 349 с.
3. Попов С.А., Корчагин А.Ф. Оценивание параметров эквивалентной схемы многополюсников с помощью многооткликовых моделей // Вестник НовГУ. Сер.: Естественные и технические науки. 2004. №19. С.175-179.
4. Попов С.А., Корчагин А.Ф. Использование многооткликовых моделей для расчета параметров электронных приборов // Измерительная техника. 2003. №4. С.47-51.
5. Попов С.А., Жижин В.В. Планирование испытаний для построения классифицирующей функции // Вестник НовГУ. Сер.: Естеств. и техн. науки. 2009. №50. С.69-71.
6. Попов С.А., Васильев И.С. Оценивание SPICE-параметров с заданной точностью // Вестник НовГУ. Сер.: Технич. науки. 2014. №81. С.20-23.

References

1. Fedorov V.V. Teoriia optimal'nogo eksperimenta [Optimal experiment theory]. Moscow, "Nauka" Publ., 1971. 312 p.

2. Bard I. Nelineinoe otsenivanie parametrov [Nonlinear estimation of parameters]. Moscow, "Statistika" Publ., 1979. 349 p.
3. Popov S.A., Korchagin A.F. Otsenivanie parametrov ekvivalentnoi skhemy mnogopoliusnikov s pomoshch'iu mnogootklikovykh modelei [Estimation of equivalent-circuit parameters of multipoles using multiresponse models]. Vestnik NovGU. Ser. Estestvennye i tekhnicheskie nauki – Vestnik NovSU. Issue: Natural and Engineering Sciences, 2004, no. 19, pp. 175-179.
4. Popov S.A., Korchagin A.F. Ispol'zovanie mnogootklikovykh modelei dlia rascheta parametrov elektronnykh priborov [Using multiresponse models for estimation of electronic devices' parameters]. Izmeritel'naia tekhnika – Measurement Technique, 2003, no. 4, pp. 47-51.
5. Popov S.A., Zhizhin V.V. Planirovanie ispytaniia dlia postroeniia klassifitsiruiushchei funktsii [Experimental design for building discriminant function]. Vestnik NovGU – Vestnik NovSU, 2009, no. 50, pp. 69-71.
6. Popov S.A., Vasil'ev I.S. Otsenivanie SPICE-parametrov s zadannoi tochnost'iu [Estimation of SPICE-parameters with the specified accuracy]. Vestnik NovGU. Ser. Tekhnicheskie nauki – Vestnik NovSU. Issue: Engineering Sciences, 2014, no. 81, pp. 20-23.