



Ottimizzazione del processo con esperimenti programmati

I piani fattoriali sono molto utili nella selezione dei fattori o *factor screening*, cioè nella identificazione di quei fattori che maggiormente influiscono sulla prestazione del processo.

Tale procedura viene anche definita come **caratterizzazione** del processo.



Individuato un appropriato sottoinsieme delle variabili di processo, il passo successivo è di solito l'**ottimizzazione** del processo, ovvero la determinazione di un insieme di condizioni operative delle variabili di processo che fornisca la miglior prestazione del processo stesso.

Esistono diverse tecniche di ottimizzazione basate sulla programmazione degli esperimenti, in particolare la metodologia della superficie di risposta è probabilmente la più diffusa e di maggiore successo.



Metodologia della superficie di risposta

La **RSM** (*Response Surface Methodology*) è un insieme di tecniche matematiche e statistiche che sono utili per la modellazione e l'analisi in quelle applicazioni in cui la risposta che interessa è funzione di molte variabili e l'obiettivo è l'ottimizzazione della risposta.

Supponiamo ad esempio che si voglia determinare i livelli dei fattori (x_1 = temperatura di reazione; x_2 = durata della reazione) che massimizzano la resa (y) di un processo.

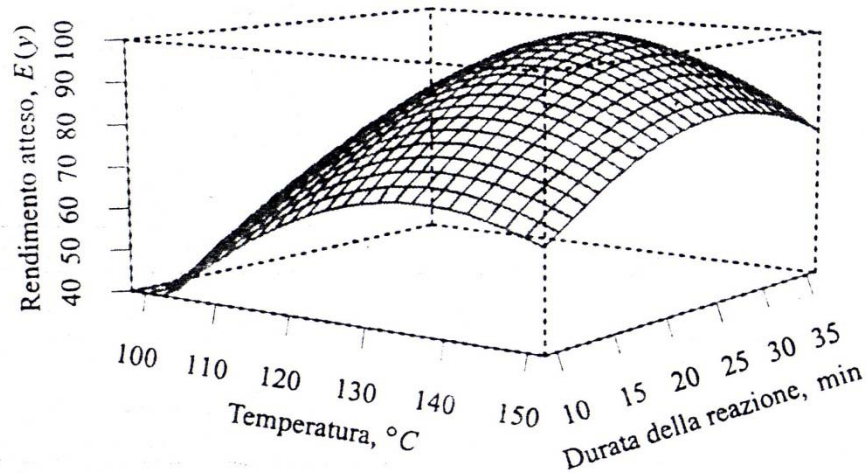
La resa del processo è una funzione dei livelli dei fattori x_1 e x_2 , per esempio nella forma:

$$y = f(x_1, x_2) + \varepsilon$$

dove ε rappresenta il rumore o l'errore osservato nella risposta y .

Se si indica il valore atteso della risposta con $E(y)$, allora la superficie rappresentata da

$$E(y) = f(x_1, x_2) \quad \text{si chiama superficie di risposta.$$



Superficie di risposta tridimensionale

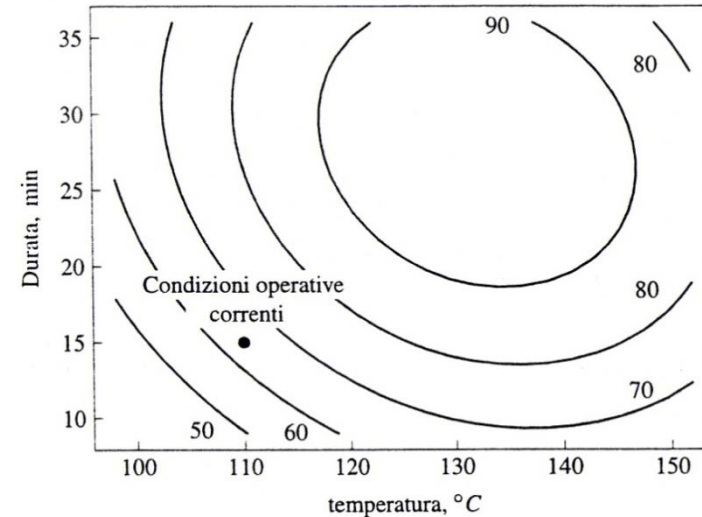
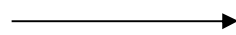


Grafico delle curve di livello per la superficie di risposta

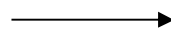
Poiché la forma della relazione che lega la risposta alle variabili indipendenti è ignota, il primo passo dell'RSM consiste nella determinazione di una opportuna approssimazione della vera relazione tra y e le variabili indipendenti:

Modello del primo ordine



$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_k x_k + \varepsilon$$

Modello del secondo ordine
(in presenza di curvatura
nel sistema)



$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^k \sum_{i < j=2}^k \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon$$



Naturalmente è improbabile che il modello sia una approssimazione ragionevole della vera relazione funzionale su tutto il dominio delle variabili indipendenti, ma per regioni relativamente piccole funziona piuttosto bene.

I parametri vengono stimati con il metodo dei minimi quadrati: le stime delle β sono quei valori dei parametri che minimizzano la somma dei quadrati delle deviazioni del modello.

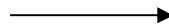
L'RSM è una procedura sequenziale:

- quando si è in un punto della superficie di risposta che è lontano dall'ottimo, spesso c'è poca curvatura nel sistema ed un sistema del primo ordine sarà appropriato; l'obiettivo in tale fase è di arrivare rapidamente ed efficientemente nelle vicinanze dell'ottimo;
- una volta che la regione che contiene l'ottimo è stata trovata, allora sarà possibile utilizzare un modello più elaborato, ad esempio un modello del secondo ordine, e si potrà effettuare un'analisi per localizzare l'ottimo.

L'obiettivo finale dell'RSM è la determinazione delle condizioni operative ottime per il sistema, oppure la determinazione di una regione nello spazio dei fattori in cui sono soddisfatte le specifiche di funzionamento.



Metodo della massima pendenza



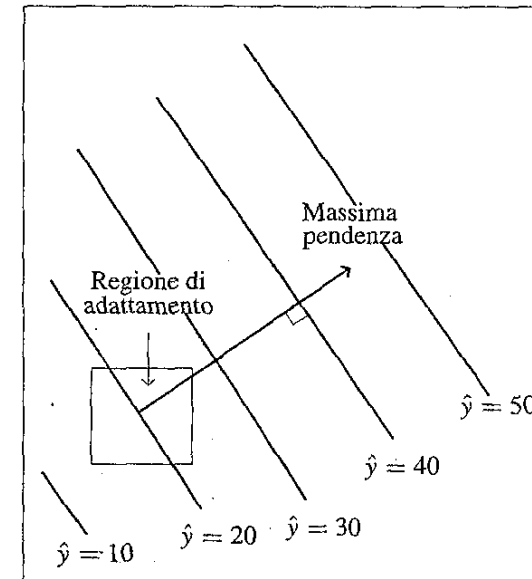
Procedura sperimentale semplice ed economicamente efficiente per muoversi rapidamente nelle vicinanze dell'ottimo, quando la stima iniziale delle condizioni operative è lontana dalle condizioni ottime.

Tale procedura consiste nel muoversi sequenzialmente lungo il cammino di salita più ripida, ovvero nella direzione di massimo incremento della risposta.

Essendo lontani dall'ottimo, si ammette che un modello del primo ordine sia un'approssimazione adeguata della vera superficie di risposta in una piccola regione delle x :

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^k \hat{\beta}_i x_i$$

La direzione di massima salita è ortogonale alle linee di livello della superficie di risposta adattata.



Si prende come cammino di salita più ripida la retta per il centro della regione in esame ed ortogonale alle curve di livello adattate.



**Analisi delle superfici di
risposta del secondo ordine**



Quando lo sperimentatore è relativamente vicino all'ottimo, di solito è necessario un modello del secondo ordine per approssimare la risposta, a causa della curvatura nella vera superficie di risposta:

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^k \hat{\beta}_i x_i + \sum_{i=1}^k \hat{\beta}_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^k \sum_{i < j=2}^k \hat{\beta}_{ij} x_i x_j$$

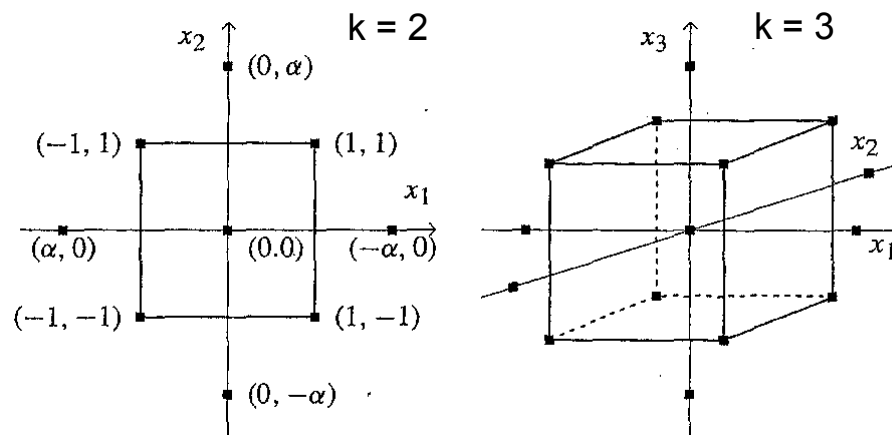
Per l'adattamento di superfici di risposta del secondo ordine viene largamente impiegato un piano composto centrale CCD (*central composite design*).



In generale un CCD per k fattori richiede 2^k prove fattoriali, $2k$ prove assiali, e almeno un punto centrale (normalmente da 3 a 5).

Spaziatura assiale: $\alpha = \sqrt[4]{F}$
(condizione di ruotabilità del CCD)

dove F è il numero di punti della parte fattoriale del piano (di solito $F = 2^k$).





Esempio:

Si consideri l'applicazione di piani fattoriali nello sviluppo di un processo di nitrurazione su un'apparecchiatura al plasma per wafer singolo. Il processo utilizza C_2F_6 come gas reagente. È possibile variare il flusso del gas, la potenza applicata al catodo, la pressione nella camera di reazione e la distanza (gap) fra anodo e catodo. La variabile di risposta di interesse è la velocità di formazione del nitruro di silicone (espressa in Å/min).

I livelli dei fattori analizzati nell'esperimento fattoriale sono:

Fattori del piano				
	<i>Gap</i>	Pressione	Flusso di C_2F_6	Potenza
	A	B	C	D
Livello	(cm)	(mTorr)	(SCCM)	(W)
Basso (-)	0.80	450	125	275
Alto (+)	1.20	550	200	325

Attraverso l'Analisi della Varianza, si è verificato che solamente gli effetti principali dei fattori "gap" (che sarà indicato con x_1) e "potenza" (x_4) e della loro interazione sono significativi.



Si è di conseguenza determinato il seguente modello del primo ordine, con interazione tra fattori, di regressione ai dati:

$$\hat{y} = 776,0625 + 50,8125x_1 + 153,0625x_4 - 76,8125x_1x_4$$

poiché non si è verificata la presenza di una curvatura quadratica pura significativa.

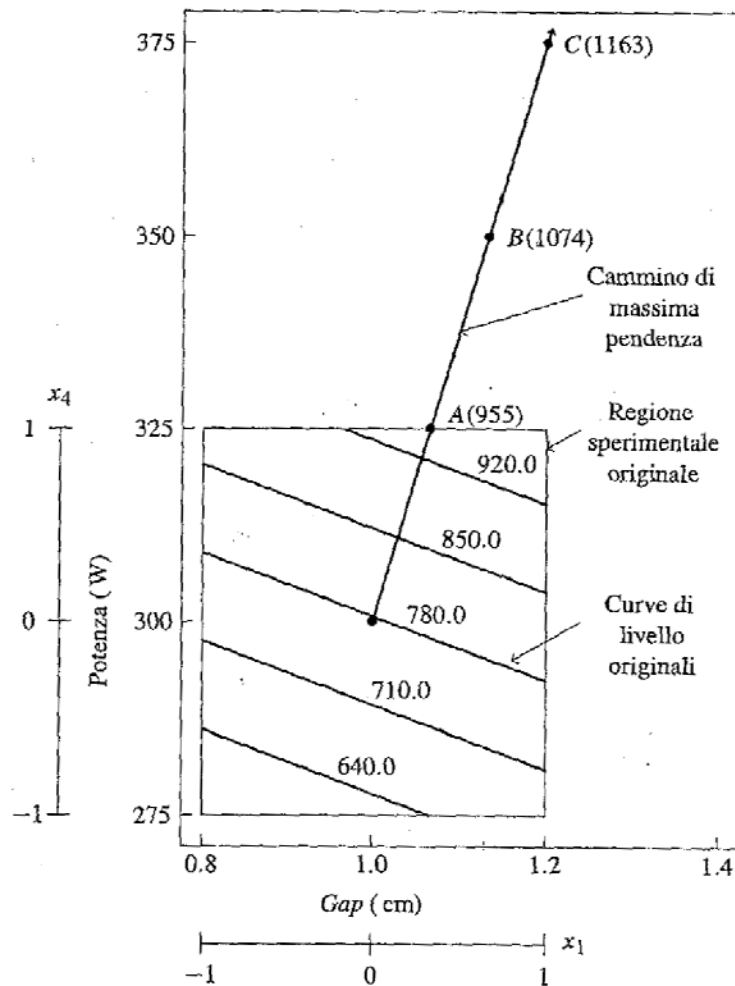
Si richiede, ora che il processo è noto, di ottimizzarlo, ovvero di determinare una regione nello spazio dei fattori in cui sono soddisfatte le specifiche di funzionamento.

Poiché si suppone di essere lontani dalle condizioni operative ottimali, è possibile adattare un modello del primo ordine, con soli effetti principali, alla regione originale dell'esperimento.

$$\hat{y} = 776,0625 + 50,8125x_1 + 153,0625x_4$$

All'interno della regione originale dell'esperimento, cioè per il gap da 0,8 a 1,2 cm e per la potenza tra 275 e 325 W, si ottiene allora una velocità massima di nitrurazione di circa 980 Å/min.

Al contrario gli ingegneri vorrebbero operare questo processo ad una velocità di 1100-1150 Å/min.



Il cammino di massima pendenza passa per il punto ($x_1 = 0$; $x_4 = 0$) ed ha pendenza:

$$\frac{153,0625}{50,8125} \cong 3$$

Si decide di utilizzare 25 W di potenza come passo di base, che sono equivalenti a:

$$\Delta x_4 = 1 \quad \text{ovvero}$$

$$\Delta x_1 = \Delta x_4 / 3 = 0,33$$

$$\text{con } \Delta x_1 = 0,33 \quad \longrightarrow \quad \Delta \text{gap} = 0,067 \text{ cm}$$

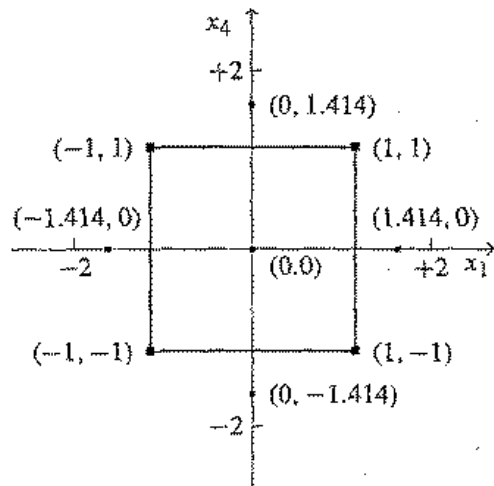
La salita nella direzione di massima pendenza termina nelle vicinanze dei valori:

$$\begin{aligned} \text{Potenza} &= 375 \text{ W} & \longrightarrow & \hat{y} = 1163 \text{ \AA/min} \\ \text{Gap} &= 1,2 \text{ cm} \end{aligned}$$



Trovata la regione che fornisce valori di velocità di nitrurazione vicini all'ottimo, si decide di condurre un secondo esperimento per esplorare meglio tale regione.

Piano composto centrale CCD → centrato su gap = 1,2 cm e potenza = 375 W



Osservazioni	Gap (cm)	Potenza (W)	Variabili codificate		Velocità y_1 Å/min	Uniformità y_2 Å
			x_1	x_4		
1	1.000	350.0	-1.000	-1.000	1054	96.9
2	1.400	350.0	1.000	-1.000	936	117.8
3	1.000	400.0	-1.000	1.000	1179	114.4
4	1.400	400.0	1.000	1.000	1417	118.3
5	0.917	375.0	-1.414	0.000	1049	102.6
6	1.483	375.0	1.414	0.000	1287	113.9
7	1.200	339.6	0.000	-1.414	927	95.9
8	1.200	410.4	0.000	1.414	1345	125.4
9	1.200	375.0	0.000	0.000	1151	102.5
10	1.200	375.0	0.000	0.000	1150	104.5
11	1.200	375.0	0.000	0.000	1177	113.5
12	1.200	375.0	0.000	0.000	1196	108.4

Durante questa fase dello studio vengono misurate due variabili di risposta:
la velocità di nitrurazione (y_1) e l'uniformità di nitrurazione (y_2).



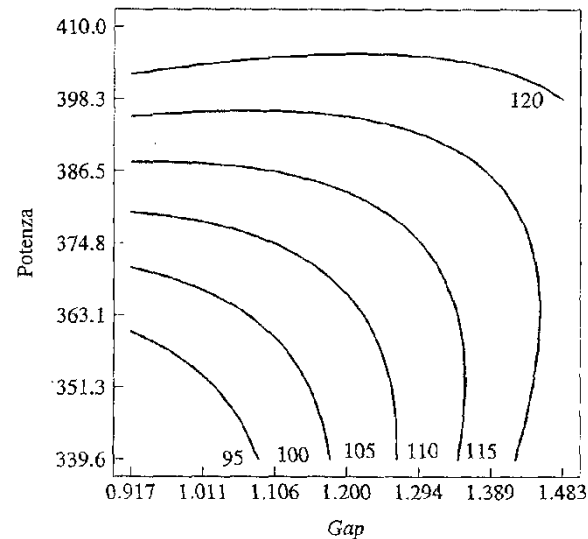
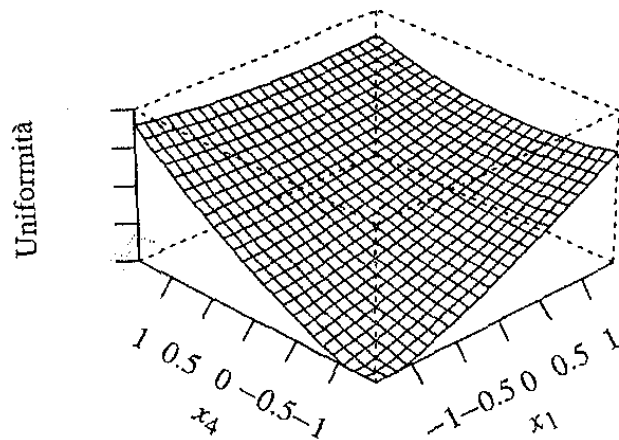
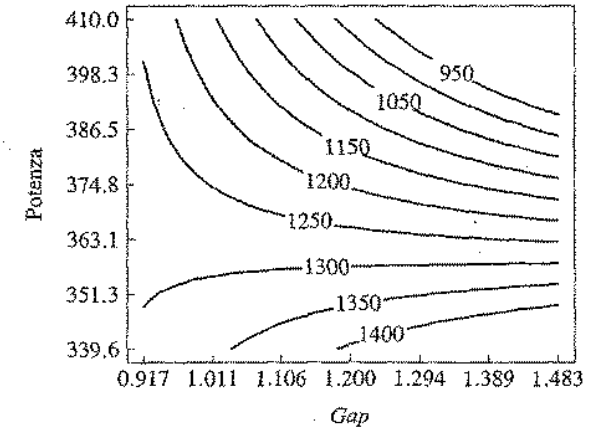
Modello del primo ordine con interazione
della velocità di nitrurazione:

$$\hat{y}_1 = 1155.7 + 57.1x_1 + 149.7x_4 + 89x_1x_4$$



Modello quadratico dell'uniformità di nitrurazione:

$$\hat{y}_2 = 107.22 + 5.14x_1 + 7.50x_4 + 1.09x_1^2 + 2.29x_4^2 - 4.33x_1x_4$$





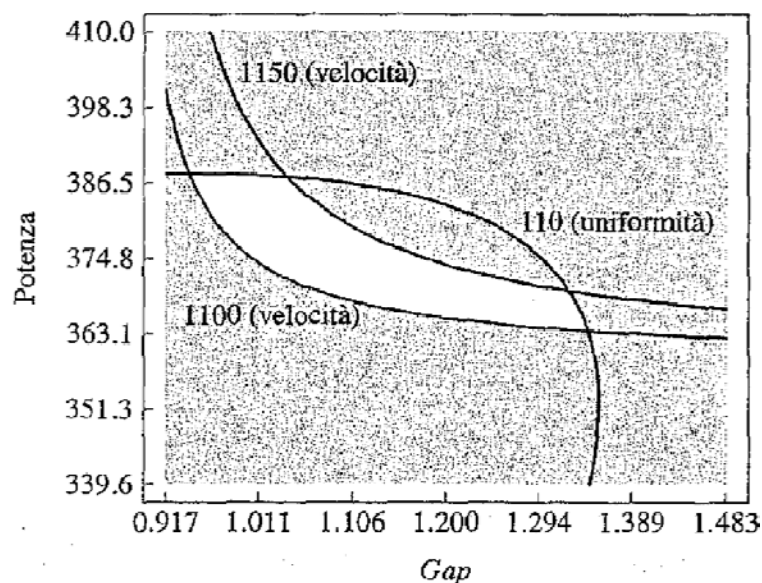
Obiettivi diversi, in conflitto, per le due risposte del sistema:

mantenere la velocità all'interno
dell'intervallo di specifica

—————→ $1100 \leq y_1 \leq 1150$

minimizzare l'uniformità di nitrurazione

—————→ $y_2 \leq 110$



Attraverso la sovrapposizione delle superfici
di risposta è possibile determinare l'ottimo:



ci sono molte combinazioni di distanza (gap)
tra anodo e catodo e di potenza applicata al
catodo che conducono a prestazioni
accettabili del processo produttivo.