



**ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ  
ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ  
ΔΠΜΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ**

**Διερεύνηση Διεργασιών Χημικής Απόθεσης από Ατμό  
με χρήση Υπολογιστικών Μοντέλων**

**ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ**

**Χρήστος Γ. Τσάκωνας**

**Διπλ. Χημικός Μηχανικός Π.Π.**

**Επιβλέπων Καθηγητής:**

**Β. Ριζιώτης, Επίκουρος Καθηγητής Ε.Μ.Π.**

**ΑΘΗΝΑ 2017**





**ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ**  
**ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ**  
**ΔΠΜΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ**

**Διερεύνηση Διεργασιών Χημικής Απόθεσης από Ατμό  
με χρήση Υπολογιστικών Μοντέλων**

**ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ**

**Χρήστος Γ. Τσάκωνας**

**Διπλ. Χημικός Μηχανικός Π.Π.**

**Επιβλέπων Καθηγητής:**

**Β. Ριζιώτης Επίκουρος Καθηγητής Ε.Μ.Π.**

Εγκρίθηκε από την τριμελή εξεταστική επιτροπή την

*(Υπογραφή)*

*(Υπογραφή)*

*(Υπογραφή)*

.....

**ΑΘΗΝΑ 2017**



## Ευχαριστίες

Η παρούσα μεταπτυχιακή εργασία εκπονήθηκε υπό την επίβλεψη του Επίκουρου Καθηγητή της Σχολής Μηχανολόγων Μηχανικών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου κ. Βασίλειου Ριζιώτη στον οποίο θέλω να εκφράσω ειλικρινά αισθήματα ευχαριστίας και εκτίμησης.

Η μεταπτυχιακή εργασία εκπονήθηκε υπό την καθοδήγηση της Δρ. Χημικό Μηχανικό Θεοδώρα Ξενίδου, Ε.ΔΙ.Π. του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου την οποία ευχαριστώ θερμά. Η κ. Ξενίδου κατά την διάρκεια της προσπάθειας αυτής μου στάθηκε με προσωπικό ενδιαφέρον για το οποίο νιώθω μεγάλη υποχρέωση, καθώς εκείνη με προέτρεψε για την επιλογή του συγκεκριμένου θέματος και της ενασχόλησης μου με αυτό.

Επιπλέον θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τους συμφοιτητές μου, μεταπτυχιακούς φοιτητές του ΔΠΜΣ Υπολογιστικής Μηχανικής του έτους 2015-2016 για τις όμορφες στιγμές που είχαμε κατά τη διάρκεια φοίτησης στο μεταπτυχιακό πρόγραμμα.

Καταλήγοντας νιώθω μεγάλη υποχρέωση στους γονείς μου Γεώργιο και Κλεοπάτρα αλλά και στον αδερφό μου, Αναστάσιο για την στήριξη που μου πρόσφεραν κατά τη διάρκεια των σπουδών μου.

### Πρόλογος

Το θέμα της εργασίας αποτέλεσε αντικείμενο μελέτης κατά το ακαδημαϊκό έτος 2016-2017, στο πλαίσιο εκπόνησης της μεταπτυχιακής εργασίας στο Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών “Υπολογιστική Μηχανική” του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.

Η βασική ιδέα της εργασίας είναι ο σχεδιασμός μιας ποιοτικής διεργασίας Χημικής Απόθεσης από Ατμό (ΧΑΑ) με χρήση υπολογιστικά “οικονομικών” μεθόδων σε σχέση με τις κλασικές μεθόδους βελτιστοποίησης που βασίζονται στη θεωρία των νευρωνικών δικτύων. Ο προσδιορισμός των επιπέδων των λειτουργικών παραμέτρων για τη βελτίωση της ποιότητας των προϊόντων και την αποδοτικότερη λειτουργία της διεργασίας απόθεσης επιτυγχάνεται με χρήση στατιστικών μεθόδων που βασίζονται στη φιλοσοφία Taguchi, η οποία εφαρμόζεται με επιτυχία σε προβλήματα βελτιστοποίησης ενός στόχου.

Η ερευνητική πρόκληση που καλείται να αντιμετωπίσει η παρούσα εργασία συνδέεται με την ύπαρξη περισσοτέρων του ενός στόχων βελτιστοποίησης σε διεργασίες ανάπτυξης λεπτών υμενίων που αναπτύσσονται στην επιφάνεια στερεών υποστρωμάτων. Για να προσεγγίσουμε τη συγκεκριμένη διεργασία, θα πρέπει το πρόβλημα πολλών στόχων να μετατραπεί σε πρόβλημα ενός στόχου, μέσω μια μεθοδολογίας που συνδυάζει τα βήματα της μεθόδου Taguchi με μεθόδους πολυκριτηριακής ανάλυσης.

Οι μέθοδοι πολυκριτηριακής ανάλυσης που εφαρμόζονται στην παρούσα εργασία είναι η μέθοδος Grey Relational Analysis (GRA) που βασίζεται στη θεωρία των γκρι συστημάτων και η μέθοδος TOPSIS, μία γεωμετρική μέθοδος που βασίζεται στην έννοια της ευκλείδειας απόστασης.

Σκοπός της εργασίας είναι η διερεύνηση της δυνατότητας των δύο μεθοδολογιών να προβλέψουν το βέλτιστο συνδυασμό των λειτουργικών παραμέτρων του αντιδραστήρα ΧΑΑ χωρίς να απαιτείται πλήρης παραγοντική ανάλυση τους συστήματος.

Η προσομοίωση της διεργασίας χημικής απόθεσης από ατμό γίνεται με χρήση του εμπορικού πακέτου υπολογιστικής ρευστοδυναμικής Phoenics, ενώ οι μέθοδοι πολυκριτηριακής ανάλυσης αναπτύσσονται σε περιβάλλον MS Excel.

## Περιεχόμενα

Ευχαριστίες.....	v
Πρόλογος.....	vi
Περιεχόμενα.....	viii
Κατάλογος σχημάτων.....	x
Κατάλογος πινάκων.....	xi
Περίληψη εργασίας.....	xii
Abstract .....	xiv
Η διάρθρωση της εργασίας.....	xv
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: ΜΕΘΟΔΟΣ TAGUCHI .....	1
1.1Ανάγκη για ποιότητα.....	1
1.2Επιζητώντας τη μείωση της μεταβλητότητας .....	2
1.3Εύρωστος Παραμετρικός Σχεδιασμός.....	4
1.4Φιλοσοφία Taguchi .....	5
1.5Μέθοδος Taguchi .....	7
1.5.1 Γιατί χρησιμοποιούμε τη μέθοδο Taguchi; .....	7
1.5.2 Βήματα μεθόδου Taguchi.....	10
1.5.3 Αλληλεπιδράσεις όπως αντιμετωπίζονται από τον Taguchi.....	13
1.5.4. Μέτρα απόδοσης Taguchi .....	14
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2:ΠΟΛΥΚΡΙΤΗΡΙΑΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΛΗΨΗΣ ΑΠΟΦΑΣΕΩΝ .....	23
2.1Πολυκριτηριακή ανάλυση – αξιολόγηση .....	23
2.2Χαρακτηριστικά στοιχεία πολυκριτηριακής ανάλυσης και λήψης απόφασης .....	26
2.3Κατηγορίες πολυκριτηριακών μεθόδων .....	29
2.3.1Ανάλυση και αξιολόγηση με τη μέθοδο GRA (Grey Relational Analysis) .....	30
2.3.2Μέθοδος TOPSIS (The Technique for Order Preference by Similarity to Ideal Solution) 35	
2.4. Συντελεστές βαρύτητας κριτηρίων .....	38
2.4.1. Υποκειμενικός υπολογισμός .....	38
2.4.2.Αντικειμενικός υπολογισμός.....	39
2.4.2.1.Μέθοδος Εντροπίας (Entropy Weight Method) .....	40
2.4.2.2. Μέθοδος PCA (Principle Component Analysis) .....	41
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3:ΑΝΑΛΥΣΗ ΤΗΣ ΔΙΑΚΥΜΑΝΣΗΣ (ANOVA) .....	46



3.1 Εισαγωγή στην ανάλυση διακύμανσης (ANOVA) .....	46
3.2 Ανάλυση της διακύμανσης κατά ένα παράγοντα .....	48
3.2.1. Προσδιορισμός του μοντέλου .....	48
3.2.2. Υποθέσεις του μοντέλου .....	50
3.2.3. Δοκιμασία υποθέσεων .....	51
3.2.4. Υπολογισμός των αθροισμάτων των τετραγώνων .....	52
3.2.5. Πίνακας ανάλυσης της διακύμανσης .....	55
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4 ΔΙΕΡΓΑΣΙΑ ΧΗΜΙΚΗΣ ΑΠΟΘΕΣΗΣ ΑΠΟ ΑΤΜΟ (ΧΑΑ) .....	61
4.1 Φυσικό πρόβλημα .....	61
4.1.1 Χημική Απόθεση από Ατμό (ΧΑΑ) .....	61
4.1.2 Εξεταζόμενη Περίπτωση .....	65
4.1.3 Εμπορικό Λογισμικό PHOENICS .....	67
4.2 Μαθηματικό Μοντέλο .....	69
4.2.1 Διαφορικές εξισώσεις ροής και συστατικού .....	69
4.2.2 Συνοριακές συνθήκες .....	74
4.2.3 Θερμοφυσικές ιδιότητες των συστατικών και του μίγματος .....	76
4.2.4 Ιδιότητες μεταφοράς των συστατικών και του μίγματος .....	77
4.2.5 Τελικοί υπολογισμοί του μοντέλου .....	78
4.2.6 Διακριτοποίηση με αλγεβρικές εξισώσεις .....	80
4.2.7 Λεπτομέρειες Αριθμητικής Επίλυσης .....	81
4.2.8 Ο αλγόριθμος SIMPLEST .....	81
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5: ΑΝΑΛΥΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ .....	84
5.1. Βασικά στοιχεία μεθόδων .....	84
5.2. Μελέτη περίπτωσης - Παρουσίαση αποτελεσμάτων .....	86
5.2.1. Εφαρμογή μεθοδολογιών Taguchi - TOPSIS και Taguchi - GRA .....	86
5.2.2. Παρουσίαση ισοϋψών καμπύλων μεταβλητών επίλυσης για το βέλτιστο συνδυασμό παραμέτρων .....	102
5.2.3. Επίδραση συντελεστών βαρύτητας στόχων στο προσδιορισμό του βέλτιστου. ....	107
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6: ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ – ΜΕΛΛΟΝΤΙΚΗ ΕΡΕΥΝΑ .....	111
6.1. Συμπεράσματα εφαρμογής μεθόδων πολυκριτηριακής αξιολόγησης .....	111
6.2. Μελλοντική έρευνα .....	113
Βιβλιογραφικές Αναφορές .....	115

Κατάλογος σχημάτων

Σχήμα 2.1: Μεθοδολογικό πλαίσιο της επιχειρησιακής έρευνας ..... 24

Σχήμα 4.1: Σχηματική αναπαράσταση της διεργασίας Χημικής Απόθεση από Ατμό (Ξενίδου, 2003)..... 62

Σχήμα 4.2: Σχηματική αναπαράσταση 2-D κατακόρυφου αντιδραστήρα Χημικής Απόθεσης από Ατμό εξεταζόμενου προβλήματος..... 66

Σχήμα 4.3: Αναπαράσταση λειτουργίας του εμπορικού πακέτου υπολογιστικής ρευστοδυναμικής Phoenics (www.cham.co.uk). ..... 67

Σχήμα 5.1: Επίδραση πίεσης επί του μέσου όρου του συντελεστή σύγκλισης  $C_i$ ..... 91

Σχήμα 5.2: Επίδραση παροχής επί του μέσου όρου του συντελεστή σύγκλισης  $C_i$ ..... 91

Σχήμα 5.3: Επίδραση θερμοκρασίας επί του μέσου όρου του συντελεστή σύγκλισης  $C_i$ ..... 92

Σχήμα 5.4: Επίδραση πίεσης επί του μέσου όρου του βαθμού σχετικότητας  $\gamma_i$ ..... 95

Σχήμα 5.5: Επίδραση παροχής επί του μέσου όρου του βαθμού σχετικότητας  $\gamma_i$ ..... 95

Σχήμα 5.6: Επίδραση θερμοκρασίας επί του μέσου όρου του βαθμού σχετικότητας  $\gamma_i$  ..... 96

Σχήμα 5.7: Ανάλυση ευαισθησίας ως προς συντελεστή διαφοροποίησης στην επίδραση πίεσης επί του μέσου όρου του βαθμού σχετικότητας  $\gamma_i$  ..... 98

Σχήμα 5.8: Ανάλυση ευαισθησίας ως προς συντελεστή διαφοροποίησης στην επίδραση παροχής επί του μέσου όρου του βαθμού σχετικότητας  $\gamma_i$  ..... 98

Σχήμα 5.9: Ανάλυση ευαισθησίας ως προς συντελεστή διαφοροποίησης στην επίδραση θερμοκρασίας επί του μέσου όρου του βαθμού σχετικότητας  $\gamma_i$ ..... 99

Σχήμα 5.10: Απεικόνιση ροϊκών γραμμών για το βέλτιστο συνδυασμό παραμέτρων..... 102

Σχήμα 5.11: Απεικόνιση ισοΰψης καμπύλης πίεσης για το βέλτιστο συνδυασμό παραμέτρων..... 103

Σχήμα 5.12: Απεικόνιση ισοΰψης καμπύλης ταχύτητας στην  $y$  κατεύθυνση για το βέλτιστο συνδυασμό παραμέτρων..... 103

Σχήμα 5.13: Απεικόνιση ισοΰψης καμπύλης ταχύτητας στην  $z$  κατεύθυνση  $w_1$  για το βέλτιστο συνδυασμό παραμέτρων..... 104

Σχήμα 5.14: Απεικόνιση ισοΰψης καμπύλης του συστατικού  $WF_6$  για το βέλτιστο συνδυασμό παραμέτρων..... 104

Σχήμα 5.15: Απεικόνιση ισοΰψης καμπύλης του συστατικού  $H_2$  για το βέλτιστο συνδυασμό παραμέτρων..... 105

Σχήμα 5.16: Απεικόνιση ισοΰψης καμπύλης του συστατικού  $HF$  για το βέλτιστο συνδυασμό παραμέτρων..... 105

Σχήμα 5.17: Απεικόνιση ισοΰψης καμπύλης της θερμοκρασίας για το βέλτιστο συνδυασμό παραμέτρων..... 106

Κατάλογος πινάκων

Πίνακας 1.1: Ορθογώνιος πίνακας  $OA_8 (2^7)$  ..... 20

Πίνακας 1.2: Ορθογώνιος πίνακας  $OA_8 (4^1 \times 2^4)$  ..... 20

Πίνακας 1.3: Ορθογώνιος πίνακας  $OA_8 (3^1 \times 2^4)$  ..... 20

Πίνακας 3.1: Διάταξη παρατηρήσεων του πλήρως τυχαιοποιημένου σχεδιασμού ..... 48

Πίνακας 3.2: Πίνακας ANOVA για τον πλήρως τυχαιοποιημένο σχεδιασμό (κατά ένα παράγοντα) ..... 58

Πίνακας 4.1: Διαστάσεις αντιδραστήρα Χημικής Απόθεσης από Ατμό Σχήματος 4.2 ..... 66

Πίνακας 5.1: Μεταβλητές ελέγχου με τα αντίστοιχα επίπεδα ..... 86

Πίνακας 5.2: Ορθογώνιος πίνακας  $L_9$  ..... 87

Πίνακας 5.3: Αποτελέσματα Phoenics για ρυθμό απόθεσης και ανομοιομορφία ..... 87

Πίνακας 5.4: S/N Αποτελέσματα για ρυθμό απόθεσης και ανομοιομορφία ..... 88

Πίνακας 5.5: Κανονικοποίηση αποτελεσμάτων πίνακα 5.4 ..... 89

Πίνακας 5.6: Υπολογισμός συντελεστή σύγκλισης  $C_i$  μεθόδου TOPSIS ..... 90

Πίνακας 5.7: Μέσες τιμές του συντελεστή TOPSIS για τους παράγοντες και τα επίπεδα της προσομοίωσης ..... 90

Πίνακας 5.8 : Βέλτιστες συνθήκες λειτουργίας αντιδραστήρα με τη μέθοδο TOPSIS ..... 92

Πίνακας 5.9: Αποτελέσματα ανάλυσης διασποράς για τον συντελεστή TOPSIS ..... 92

Πίνακας 5.10 : Υπολογισμός του συντελεστή κατάστασης για κάθε στόχο ..... 93

Πίνακας 5.11: Υπολογισμός βαθμού σχετικότητας  $\gamma_i$  ..... 94

Πίνακας 5.12: Μέσες τιμές του βαθμού σχετικότητας για τους παράγοντες και τα επίπεδα της προσομοίωσης ..... 94

Πίνακας 5.13 : Βέλτιστες συνθήκες λειτουργίας αντιδραστήρα με τη μέθοδο GRA ..... 96

Πίνακας 5.14: Αποτελέσματα ανάλυσης διασποράς για το βαθμό σχετικότητας ..... 97

Πίνακας 5.15: Πλήρης παραγοντική ανάλυση ..... 100

Πίνακας 5.16 : Βέλτιστες συνθήκες λειτουργίας αντιδραστήρα ανά μέθοδο ..... 101

Πίνακας 5.17 : Επίδραση συντελεστών βαρύτητας στόχων στο προσδιορισμό του βέλτιστου στη μέθοδο TOPSIS με χρήση ορθογώνιου πίνακα (orthogonal array) ..... 107

Πίνακας 5.18 : Επίδραση συντελεστών βαρύτητας στόχων στο προσδιορισμό του βέλτιστου στη μέθοδο GRA με χρήση ορθογώνιου πίνακα (orthogonal array) ..... 108

Πίνακας 5.19 : Επίδραση συντελεστών βαρύτητας στόχων στο προσδιορισμό του βέλτιστου στη μέθοδο TOPSIS με πλήρη παραγοντική ανάλυση ..... 108

Πίνακας 5.20 : Επίδραση συντελεστών βαρύτητας στόχων στο προσδιορισμό του βέλτιστου στη μέθοδο GRA με πλήρη παραγοντική ανάλυση ..... 108

## Περίληψη εργασίας

Το αντικείμενο της μεταπτυχιακής εργασίας είναι η ανάπτυξη μιας μεθοδολογίας βελτιστοποίησης που συνδυάζει τη μέθοδο Taguchi με μεθόδους πολυκριτηριακής ανάλυσης ως εναλλακτικό τρόπο προσδιορισμού των βέλτιστων συνθηκών λειτουργίας σε διεργασίες χημικής απόθεσης από ατμό.

Τα βήματα που ακολουθούνται είναι: α) ο καθορισμός των λειτουργικών παραμέτρων με τα αντίστοιχα επίπεδα καθώς και οι στόχοι βελτιστοποίησης, β) η διαμόρφωση και επίλυση διαφορετικών “επίλεκτων” σεναρίων μέσω ορθογώνιων πινάκων, γ) η μοντελοποίηση της διεργασίας μέσω του εμπορικού πακέτου υπολογιστικής ρευστοδυναμικής Phoenics για την εξαγωγή αριθμητικών αποτελεσμάτων, δ) η ανάλυση και ο προσδιορισμός των συντελεστών βαρύτητας μέσω της ιδέας της εντροπίας των επιδόσεων των εναλλακτικών σεναρίων, ε) η αξιολόγηση των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων με δύο μεθόδους: τη μέθοδο GRA (Grey Relational Analysis) που βασίζεται στη θεωρία των γκρι συστημάτων (Grey Systems Theory) και τη μέθοδο TOPSIS που βασίζεται στο υπολογισμό της ευκλείδειας απόστασης της εναλλακτικής επίδοσης που εξετάζεται, στ) ο καθορισμός των βέλτιστων επιπέδων για όλους τους παράγοντες που μεταβάλλονται και η ανάλυση διασποράς (ANOVA) για την εύρεση εκείνης της παραμέτρου που έχει τη μεγαλύτερη συνεισφορά στα αποτελέσματα και ζ) ο έλεγχος της ορθότητας των αποτελεσμάτων. Στη συγκεκριμένη εργασία, γίνεται πλήρης παραγοντική ανάλυση, η οποία περιλαμβάνει την εξέταση όλων των πιθανών συνδυασμών των λειτουργικών παραμέτρων.

Πριν την εφαρμογή της συνδυαστικής μεθόδου βελτιστοποίησης προηγείται: α) η περιγραφή των βασικών στοιχείων της φιλοσοφίας και της μεθοδολογίας Taguchi, β) η περιγραφή των βασικών στοιχείων και του μεθοδολογικού πλαισίου της πολυκριτηριακής ανάλυσης και γ) η περιγραφή και ανάπτυξη των υφιστάμενων βασικών πολυκριτηριακών μεθόδων ανάλυσης που εφαρμόζονται στη διεργασία χημικής απόθεσης από ατμό. Στη συνέχεια, παρουσιάζονται τα αποτελέσματα

βελτιστοποίησης τα οποία καταδεικνύουν ότι η μέθοδος GRA εντοπίζει το βέλτιστο συνδυασμό των λειτουργικών παραμέτρων, ενώ η μέθοδος TOPSIS αδυνατεί να τον εντοπίσει.

Για την προσομοίωση της διεργασίας Χημικής Απόθεσης από Ατμό χρησιμοποιείται το εμπορικό πακέτο υπολογιστικής ρευστοδυναμικής Phoenics ενώ η ανάπτυξη των μεθόδων πολυκριτηριακής ανάλυσης γίνεται σε περιβάλλον MS Excel.

**Abstract**

The subject of the postgraduate thesis is the development of an optimization methodology that combines the Taguchi method with multicriteria analysis methods as an alternative way to determine the optimal operating conditions in Chemical Vapor Deposition (CVD) processes.

The steps that are followed include: a) definition of the operating parameters with their corresponding levels as well as the optimization objectives; b) formulation and solution of different "selected" scenarios through rectangular tables; c) modeling of the process through the commercial Computational Fluid Dynamics software Phoenix to extract numerical results; d) analysis and determination of gravitational coefficients through the idea of entropy of the performance of the alternative scenarios; e) evaluation of the simulation results using two methods: the Gray Relational Analysis (Gray Relational Analysis) method and the TOPSIS method that is based on the calculation of the Euclidean distance of the alternative performance; (f) determination of the optimal levels for all variables and variance analysis (ANOVA) to find the parameter that has the largest contribution to the results; (g) evaluation of the accuracy of the results. In this work, a full factorial analysis is performed, which include all possible combinations of the examined operating parameters.

Before the application of the combinatorial optimization method, the following are described: (a) the fundamentals of Taguchi philosophy and methodology; (b) the basic elements and the methodological framework of the multicriteria analysis and (c) the existing methods of multicriteria analysis that are used in this work. The results show that GRA method identifies the optimal combination of parameters, while TOPSIS is unable to locate it.

The Computational Fluid Dynamics commercial package Phoenix is used for the simulation of the Chemical Vapor Deposition process, while the multicriteria analysis methods are developed in MS Excel.

### Η διάρθρωση της εργασίας

Η εργασία αποτελείται από έξι κεφάλαια. Πιο αναλυτικά:

Στο πρώτο κεφάλαιο γίνεται μια εισαγωγή στη φιλοσοφία Taguchi ως εναλλακτική μέθοδος βελτιστοποίησης. Αναφέρονται τα βασικά στοιχεία και οι καινοτομίες που επιφέρει κατά την εφαρμογή της συγκεκριμένης μεθοδολογίας.

Στο δεύτερο κεφάλαιο αναπτύσσονται τα βασικά στοιχεία των πολυκριτηριακών μεθόδων. Γίνεται αναφορά των βασικών θεμάτων και του μεθοδολογικού πλαισίου της πολυκριτηριακής ανάλυσης και των στρατηγικών της. Επιπλέον, γίνεται αναφορά στις βασικές οντότητες κάθε πολυκριτηριακού προβλήματος, στις εναλλακτικές περιπτώσεις (σενάρια) και στους συντελεστές βαρύτητας. Τέλος, παρουσιάζονται οι δύο πολυκριτηριακές μέθοδοι καθώς και οι μέθοδοι που χρησιμοποιούνται για την εξαγωγή των συντελεστών βαρύτητας.

Στο τρίτο κεφάλαιο γίνεται παρουσίαση της ανάλυσης διασποράς (ANOVA) που στόχο έχει το προσδιορισμό της επίδρασης μίας ή περισσότερων ανεξάρτητων μεταβλητών στην απόκριση του συστήματος.

Στο τέταρτο κεφάλαιο παρουσιάζεται το φυσικό πρόβλημα που εξετάζεται καθώς και το μαθηματικό μοντέλο που χρησιμοποιείται για την περιγραφή της διεργασίας της χημικής απόθεσης από ατμό. Επιπλέον αναφέρονται τα βασικά στοιχεία του εμπορικού πακέτου υπολογιστικής ρευστοδυναμικής Phoenics, που χρησιμοποιείται για την προσομοίωση της διεργασίας.

Στο πέμπτο κεφάλαιο παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων που πραγματοποιήθηκαν. Συγκεκριμένα, δίνονται τα αποτελέσματα για τις ισοϋψείς καμπύλες των μεταβλητών επίλυσης. Επιπλέον, παρουσιάζονται τα αποτελέσματα από την εφαρμογή της συνδυαστικής μεθόδου Taguchi - GRA και Taguchi -TOPSIS για την εύρεση των βέλτιστων συνθηκών λειτουργίας της διεργασίας της χημικής απόθεσης από ατμό.

Στο έκτο κεφάλαιο η εργασία ολοκληρώνεται με τη συζήτηση των αποτελεσμάτων και των συμπερασμάτων που προέκυψαν από τη διερεύνηση της διεργασίας της χημικής απόθεσης από ατμό, ενώ αναφέρονται και προτάσεις για μελλοντική έρευνα.





# ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: ΜΕΘΟΔΟΣ TAGUCHI

## 1.1 Ανάγκη για ποιότητα

Το κλειδί για την ανταγωνιστική θέση μιας επιχείρησης και την υπεροχή της στην αγορά είναι η έγκαιρη εισαγωγή προϊόντων υψηλής ποιότητας στις κατάλληλες τιμές. Για αυτό το λόγο είναι απαραίτητη η κατάκτηση της μέγιστης δυνατής αποδοτικότητας και αποτελεσματικότητας στην έρευνα και την ανάπτυξη διεργασιών. Τόσο η επίτευξη της ποιότητας, όσο και η βελτίωσή της δεν μπορούν να πραγματοποιηθούν χωρίς τη χρήση στατιστικών μεθόδων σε όλη τη διάρκεια της παραγωγικής διαδικασίας. Μπορούμε να κατηγοριοποιήσουμε τις μεθόδους που εφαρμόζει ο στατιστικός έλεγχος ποιότητας σε τρία υποσύνολα που αντιστοιχούν στα τρία στάδια της παραγωγικής διαδικασίας (Ντάφλα, 2012):

1. Σχεδιασμός και ανάλυση πειραμάτων (Design of Experiments)
2. Στατιστικός έλεγχος διεργασίας (Statistical Process Control)
3. Δειγματοληψία αποδοχής (Acceptance Sampling)

Ο σχεδιασμός και η ανάλυση πειραμάτων περιέχει όλες εκείνες τις στατιστικές τεχνικές οι οποίες μας βοηθούν στην εκτίμηση της επίδρασης που έχουν τα διάφορα επίπεδα των παραγόντων (μεταβλητών), που επηρεάζουν τις ποιοτικές παραμέτρους του τελικού προϊόντος, και συνεπώς διαδραματίζει σημαντικό ρόλο στο βέλτιστο σχεδιασμό της διεργασίας παραγωγής. Ο στατιστικός έλεγχος διεργασιών περιέχει τεχνικές που είναι απαραίτητες για τον έλεγχο της διεργασίας παραγωγής κατά τη διάρκεια της παραγωγής των προϊόντων. Η δειγματοληψία αποδοχής περιέχει στατιστικές τεχνικές που είναι απαραίτητες για να αποφασίσουμε αν μια συγκεκριμένη παρτίδα προϊόντων θα γίνει δεκτή ή θα απορριφθεί.

Ο Deming είναι ένας από τους σημαντικότερους γκουρού της ποιότητας και έχει συνδέσει το όνομα του με την ανάπτυξη της

ποιότητας στην ιαπωνική βιομηχανία, όπου η βασική συνεισφορά του στο χώρο του στατιστικού ελέγχου ποιότητας είναι η έμφαση που έδωσε στην κατανόηση της σημασίας της μεταβλητότητας και στη διάκριση μεταξύ μεταβλητότητας κοινών αιτίων και μεταβλητότητας ειδικών αιτίων (Χωραφά, 2013).

Ο Deming θα συνόψιζε τη φιλοσοφία του με τρεις μόνο λέξεις:

«Ελαττώστε τη μεταβλητότητα»

### 1.2 Επιζητώντας τη μείωση της μεταβλητότητας

Στις παραδοσιακές μεθόδους προσέγγισης της ποιότητας χρησιμοποιούνται οι ακόλουθες τεχνικές βελτίωσης:

- α) Προσέγγιση δοκιμής και σφάλματος (trial and error approach)
- β) Σχεδιασμός πειραμάτων (Design of Experiments – DOE)

Η μέθοδος αυτή αποτελείται από ένα σώμα στατιστικών τεχνικών για επαρκή συλλογή δεδομένων και διερευνά όλους τους συνδυασμούς των πιθανών καταστάσεων που μπορεί να προκύψουν σε ένα πείραμα από το συνδυασμό των διαφόρων παραγόντων και των σταθμών τους.

Η στατιστική μεθοδολογία στο σχεδιασμό πειραμάτων εξετάζει τη σχέση των δεδομένων εισόδου με τα δεδομένα εξόδου για ένα σύστημα και έχει ποικίλους στόχους, οι βασικότεροι των οποίων είναι:

- Η ταυτοποίηση των σημαντικών παραγόντων (ανεξάρτητων μεταβλητών) του πειράματος
- Η βελτιστοποίηση του σχεδιασμού του προϊόντος ή της διεργασίας
- Η αποδοτικότητα

Εν γένει, ο παραδοσιακός σχεδιασμός πειραμάτων επικεντρώνεται στο πώς επηρεάζουν οι παράγοντες σχεδιασμού την ποιότητα (Ντάφλα, 2012). Αντίθετα, στη φιλοσοφία Taguchi η μεταβλητότητα είναι αυτή που κατέχει την κεντρική θέση (Taguchi, 1990). Σύμφωνα, λοιπόν, με

τον Taguchi, η μελέτη της διασποράς της ποιότητας ενός προϊόντος σε σχέση με το στόχο του έχει μεγαλύτερο ενδιαφέρον από τη μελέτη της μέσης απόκρισης του στόχου.

Ο Taguchi ανέπτυξε μια μέθοδο για το σχεδιασμό πειραμάτων που βασίστηκε στο πως οι διάφοροι παράγοντες επηρεάζουν τη μέση τιμή και τη διασπορά του υπό εξέταση χαρακτηριστικού. Η μέθοδος Taguchi προσφέρει ιδιαιτέρως μειωμένη μεταβλητότητα στο πείραμα με το βέλτιστο συνδυασμό των παραγόντων ελέγχου. Ο πειραματικός σχεδιασμός που προτάθηκε από τον Taguchi συνίσταται στη χρήση «Ορθογώνιων Διανυσμάτων» ("Orthogonal Arrays", OA) για την οργάνωση των παραμέτρων που επηρεάζουν τη διεργασία και των διάφορων επιπέδων αυτών (συνήθως κάθε παράγοντας έχει 2 ή 3 επίπεδα). Τα «Ορθογώνια Διανύσματα» δίνουν τη δυνατότητα των ελάχιστων απαιτούμενων πειραμάτων.

Ο Taguchi δημιούργησε και πρότεινε νέες τεχνικές για το σχεδιασμό πειραμάτων, που περιλαμβάνουν τους λόγους σήματος προς το θόρυβο (Signal-to-Noise Ratios), τον εύρωστο παραμετρικό σχεδιασμό και το σχεδιασμό αντοχών. Τα μέτρα απόδοσης της φιλοσοφίας του Taguchi συμβάλλουν στην ανάλυση των δεδομένων και την πρόβλεψη των βέλτιστων αποτελεσμάτων.

Έτσι, η μέθοδος Taguchi επιτυγχάνει τη συσχέτιση της μεθόδου σχεδιασμού πειραμάτων (design of experiments - DOE) με τη βελτιστοποίηση των παραγόντων ελέγχου, με τελικό σκοπό τη βέλτιστη ποιότητα του προϊόντος.

Η μέθοδος Taguchi χρησιμοποιείται ιδανικά για αριθμό μεταβλητών στο διάστημα (3 έως 50), μικρό αριθμό αλληλεπιδράσεων μεταξύ των μεταβλητών και μόνο στις περιπτώσεις που λίγες από τις μεταβλητές αυτές συνεισφέρουν σημαντικά στο πείραμα.

### 1.3 Εύρωστος Παραμετρικός Σχεδιασμός

Η μέθοδος του εύρωστου σχεδιασμού (Robust Design) είναι κεντρικής σημασίας για τη βελτίωση της παραγωγικότητας, ιδίως από άποψη μηχανικής. Η μέθοδος αποτελεί πρωτοπορία του Taguchi. Ο εύρωστος παραμετρικός σχεδιασμός χρησιμοποιεί εργαλεία, από τα οποία τα πιο σημαντικά είναι (Ντάφλα, 2012):

α) Ο λόγος του σήματος προς το θόρυβο (Signal to Noise Ratio): χρησιμοποιείται για την πρόβλεψη της ποιότητας μέσω εργαστηριακών πειραμάτων.

β) Τα ορθογώνια διανύσματα (Orthogonal Arrays): χρησιμοποιούνται για τη συλλογή αξιόπιστων πληροφοριών σχετικά με τους παράγοντες ελέγχου (παράμετροι σχεδιασμού) με ένα μικρό αριθμό απαιτούμενων πειραμάτων.

Περισσότερες πληροφορίες σχετικά με τα δύο παραπάνω εργαλεία δίνονται στην συνέχεια του κεφαλαίου.

Η μέθοδος Taguchi μπορεί να μειώσει το κόστος έρευνας και ανάπτυξης, βελτιώνοντας την αποτελεσματικότητα των εξαγόμενων συμπερασμάτων, που απαιτούνται για το σχεδιασμό συστημάτων που δεν επηρεάζονται από εξωτερικούς παράγοντες. Ως αποτέλεσμα, οι σημαντικοί παράγοντες σχεδιασμού που επηρεάζουν τη λειτουργία, την απόδοση και το κόστος της διεργασίας ή του συστήματος μπορούν εύκολα να προσδιοριστούν και ο χρόνος ανάπτυξης προϊόντων να μειωθεί σημαντικά. Επιπλέον, η βέλτιστη επιλογή των παραμέτρων μπορεί να οδηγήσει σε σημαντική μείωση δαπανών κατασκευής και λειτουργίας.

## 1.4 Φιλοσοφία Taguchi

Ο Taguchi ήταν μηχανικός και στατιστικολόγος που από το 1950 και έπειτα ανέπτυξε μια μεθοδολογία για την εφαρμογή της στατιστικής στη βελτίωση της ποιότητας προϊόντων και διεργασιών (Roy, 2010).

Η φιλοσοφία του Taguchi βασίζεται στις αρχές διοίκησης του Deming, η οποία συνοψίζεται στη φράση: «Σταματήστε να βασίζεστε στην επιθεώρηση για να πετύχετε την ποιότητα». Ο Deming και ο Taguchi κατάφεραν να διαμορφώσουν μια νέα φιλοσοφία στο χώρο της ποιότητας που είναι γνωστή ως «στατιστική σκέψη». Τα βασικά συστατικά της νέας αυτής φιλοσοφίας ήταν:

1. Υπάρχει μεταβλητότητα σε όλες τις διεργασίες.
2. Οι αιτίες της μεταβλητότητας του προϊόντος μπορούν να διακριθούν σε δύο κατηγορίες: τις «κοινές» και τις «ειδικές».
3. Η κατανόηση της ιδιαίτερης φύσης των κοινών και των ειδικών αιτιών είναι το κλειδί για τη μείωση της μεταβλητότητας.
4. Η μείωση της μεταβλητότητας είναι το κλειδί για τη βελτίωση της ποιότητας, την παραγωγικότητα και την κερδοφορία.

**Quality simply means no variability or very little variation from target performance.**

**[Di Lorenzo, 1990]**

Μεταβλητότητα σημαίνει επίδραση κάποιων αιτιών στη διαδικασία παραγωγής, οι οποίες δημιουργούν στατιστική μεταβολή του μέσου όρου των ποιοτικών χαρακτηριστικών της διαδικασίας σε μία νέα τιμή (μικρότερη ή μεγαλύτερη από την κανονική), με αποτέλεσμα η διαδικασία να ξεφεύγει από τη σταθερή της πορεία και να βρίσκεται εκτός ελέγχου, οδηγώντας σε μη αξιόπιστα αποτελέσματα.

Ο Deming κατάφερε να στρέψει την προσοχή από τη μαζική εποπτεία στον έλεγχο της διεργασίας, ενώ ο Taguchi έκανε ένα βήμα

ακόμα πιο πίσω από το στάδιο της παραγωγής σε εκείνο του σχεδιασμού.

Ο Taguchi ασχολήθηκε με το εκτός-διεργασίας στάδιο ελέγχου της ποιότητας. Συγκεκριμένα, χρησιμοποιώντας τις μεθόδους στατιστικού σχεδιασμού και ανάλυσης πειραμάτων, ανέπτυξε μια τεχνική για την ποιοτική βελτίωση ενός προϊόντος σε συνδυασμό με τη στατιστική ανάλυση της διασποράς τους, με στόχο την ελαχιστοποίηση της μεταβλητότητας με το μικρότερο δυνατό κόστος.

Η προσέγγιση του Taguchi επιτρέπει την εκτέλεση πειραμάτων και τον έλεγχο προτύπων χρησιμοποιώντας ταυτόχρονα πολλούς παράγοντες, έτσι ώστε το προϊόν ή η διεργασία να μην επηρεάζονται από τις συνθήκες παραγωγής ή άλλους παράγοντες που δεν μπορούν εύκολα να ελεγχθούν. Αυτό γίνεται εφικτό με τον εύρωστο σχεδιασμό, ο οποίος παρέχει έναν πιο αποτελεσματικό και οικονομικά πιο αποδοτικό τρόπο για τη βελτίωση των προϊόντων και των παραγωγικών διαδικασιών.

## 1.5 Μέθοδος Taguchi

Υπάρχουν δύο ερωτήματα τα οποία πραγματεύεται ο σχεδιασμός πειραμάτων και προσομοιώσεων:

1. Πως θα σχεδιάσω το βέλτιστο πείραμα ή τη βέλτιστη προσομοίωση;
2. Πως θα αναλύσω τα αποτελέσματα ενός πειράματος ή μίας προσομοίωσης;

Η απάντηση στα παραπάνω ερωτήματα δίνεται με τη χρήση της μεθόδου Taguchi που χρησιμοποιείται ευρέως για το στιβαρό σχεδιασμό πειραμάτων και προσομοιώσεων.

### 1.5.1 Γιατί χρησιμοποιούμε τη μέθοδο Taguchi;

Αυτή είναι η ερώτηση που οι περισσότεροι ερευνητές προσπαθούν να απαντήσουν πριν εφαρμόσουν τη μέθοδο. Μια σύντομη απάντηση είναι ότι η μέθοδος οδηγεί στην εύρεση των βέλτιστων συνθηκών λειτουργίας μιας διεργασίας ή ενός προϊόντος. Αποτελεί μία μέθοδο βελτιστοποίησης με μικρό υπολογιστικό κόστος. Όλα ξεκίνησαν όταν ο Taguchi εργαζόταν σε μια φαρμακευτική εταιρεία που ερευνούσε αποδοτικές πειραματικές τεχνικές για να αναπτύξει μεθόδους για την παραγωγή πενικιλίνης. Στην έρευνα του οδηγήθηκε στην εφαρμογή ορθογώνιων διανυσμάτων (orthogonal arrays) για τον αποδοτικό σχεδιασμό πειραμάτων και την ανάλυση πειραματικών αποτελεσμάτων.

Τα ορθογώνια διανύσματα επιτρέπουν τη σημαντική μείωση του αριθμού των πειραμάτων και προσομοιώσεων που απαιτούνται για τον εντοπισμό της βέλτιστης λύσης. Η σημασία των ορθογώνιων διανυσμάτων έγκειται στο ότι οι προκαθορισμένες δοκιμές είναι στατιστικά ανεξάρτητες. Μαθηματικά, αυτό σημαίνει ότι το γινόμενο οποιονδήποτε δύο πινάκων με τις στήλες του πίνακα δοκιμών πρέπει να ισούται με το μηδέν.



Η φιλοσοφία του Taguchi για την ποιότητα προϊόντων ή διεργασιών συνοψίζεται στα εξής (Roy, 2010):

1. Η ποιότητα πρέπει να σχεδιάζεται για ένα προϊόν και όχι να επιθεωρείται σε αυτό.
2. Η ποιότητα επιτυγχάνεται καλύτερα με την ελαχιστοποίηση της απόκλισης από τον επιθυμητό στόχο. Το προϊόν πρέπει να σχεδιάζεται έτσι ώστε να μην επηρεάζεται από περιβαλλοντικούς παράγοντες που δεν μπορούν να ελεγχθούν. Με άλλα λόγια, ο λόγος της ποιότητας του προϊόντος (signal) προς τους ανεξέλεγκτους παράγοντες (noise) πρέπει να είναι υψηλός.
3. Το κόστος της ποιότητας θα πρέπει να υπολογίζεται ως συνάρτηση της απόκλισης από τους στόχους. Έτσι ορίζεται η έννοια της απώλειας της ποιότητας.

Τα καινοτόμα επιτεύγματα της μεθόδου Taguchi για την ποιότητα είναι τα ακόλουθα (Roy, 2010):

1. Η **συνάρτηση απώλειας**, η οποία χρησιμοποιείται για την εκτίμηση της οικονομικής απώλειας που προκαλείται σε βάρος της κοινωνίας λόγω της κακής ποιότητας.
2. Η φιλοσοφία του **“off-line quality control”** που υποστηρίζει το σχεδιασμό ισχυρών προϊόντων και εύρωστων διεργασιών που δε θα επηρεάζονται σημαντικά από τις παραμέτρους που δεν μπορούν να ελεγχθούν (**“robust design”**).
3. Οι καινοτομίες στο στατιστικό σχεδιασμό πειραμάτων (**“statistical design of experiments”**) και ιδιαίτερα η χρήση ενός εξωτερικού διανύσματος για τους παράγοντες που δε μπορούν να ελεγχθούν, αλλά επηρεάζουν συστηματικά το πείραμα.

Η συνειδητοποίηση του γεγονότος ότι η μέση παραγωγή και η μεταβλητότητα της τελικής απόκρισης είναι εξίσου κρίσιμα ζητήματα αποτελεί σημαντική βελτίωση σε σχέση με την παραδοσιακή τεχνική της μηχανικής που λαμβάνει υπ' όψη μόνο το εάν το υπό εξέταση χαρακτηριστικό βρίσκεται εντός των ορίων προδιαγραφών ή όχι.

Σύμφωνα με τον Taguchi, η βελτίωση της ποιότητας στο στάδιο του σχεδιασμού, περιλαμβάνει δυο βήματα:

1. Τη βελτιστοποίηση σχεδιασμού - διεργασίας (συστηματική προσέγγιση).
2. Τη δημιουργία εύρωστου σχεδιασμού που δεν επηρεάζεται σημαντικά από μη ελεγχόμενους παράγοντες.

Ο Taguchi ήταν υπέρμαχος του πειραματισμού πριν την έναρξη της παραγωγικής διαδικασίας (off-line-experimentation), σε αντίθεση με τις παραδοσιακές μεθόδους που υποστήριζαν τον πειραματισμό κατά τη διάρκεια της παραγωγικής διαδικασίας (on-line or in-process experimentation).

Τέλος, είναι σημαντικό να γίνει κατανοητή η σχέση της απόδοσης με την απώλεια ποιότητας. Προϊόντα με μικρότερη μεταβλητότητα έχουν μικρότερη απώλεια ποιότητας. Η συνάρτηση απώλειας της ποιότητας μετατρέπει ουσιαστικά τους ποιοτικούς όρους, που επηρεάζουν τον καταναλωτή, σε ποσοτικούς όρους, όπως για παράδειγμα, οι νομισματικές αξίες. Ανάλογα με τις συνθήκες κατάστασης, η συνάρτηση απώλειας της ποιότητας μπορεί να λάβει τρεις μορφές (Roy, 2010).

### **1.5.2 Βήματα μεθόδου Taguchi**

Η μέθοδος Taguchi είναι μέθοδος βελτιστοποίησης μιας διεργασίας ή ενός προϊόντος που περιλαμβάνει έξι βασικά στάδια σχεδιασμού, διεξαγωγής και εκτίμησης αποτελεσμάτων, έτσι ώστε να προσδιοριστεί ο βέλτιστος συνδυασμός των παραγόντων ελέγχου (Roy, 2010). Πρωταρχικός στόχος είναι η μεταβλητότητα του εξαγόμενου αποτελέσματος να περιορίζεται σε χαμηλά επίπεδα, ανεξάρτητα από την παρουσία παραγόντων θορύβου στα δεδομένα εισαγωγής.

Η μεθοδολογία που πρότεινε ο Taguchi για το σχεδιασμό πειραμάτων, με σκοπό τη συνεχή βελτίωση της ποιότητας του προϊόντος ή της διεργασίας, αποτελείται από τα ακόλουθα στάδια:

#### **1. Καθορισμός προβλήματος**

Το στάδιο αυτό περιλαμβάνει τον εντοπισμό της πηγής του προβλήματος, όχι μόνο τα συμπτώματα. Γίνεται ο καθορισμός του ποιοτικού χαρακτηριστικού που επιλέγεται να λάβει βέλτιστη τιμή. Το χαρακτηριστικό αυτό είναι μια παράμετρος της οποίας η μεταβλητότητα έχει κρίσιμη επίδραση στην ποιότητα του προϊόντος. Η παράμετρος αυτή χαρακτηρίζεται συνήθως ως έξοδος ή μεταβλητή απόκρισης.

#### **2. Καταιγισμός ιδεών**

Το στάδιο αυτό περιλαμβάνει τον προσδιορισμό των συνθηκών πειραματισμού και των κρίσιμων μεταβλητών για την ποιότητα του υπό εξέταση προϊόντος ή της διεργασίας. Ο Taguchi χρησιμοποιεί τον όρο “παράγοντες” για τις κρίσιμες μεταβλητές. Διακρίνονται δύο κατηγορίες παραγόντων:

α) Παράγοντες ελέγχου (control factors): είναι οι μεταβλητές που μπορούν εύκολα να προσδιοριστούν και να ελεγχθούν.

β) Παράγοντες θορύβου (noise factors): είναι οι μεταβλητές που επηρεάζουν το σύστημα, αλλά είναι δύσκολο ή και αδύνατο να

ελεγχθούν. Οι μεταβλητές αυτές προκαλούν στατιστικές αποκλίσεις στις υπό εξέταση διεργασίες και είναι υπεύθυνες για τη μεταβλητότητα της τελικής ποιότητας. Στόχος είναι ο περιορισμός των επιπτώσεων των παραγόντων θορύβου.

Ορίζονται διαφορετικά επίπεδα για του παράγοντες έτσι ώστε να εντοπιστούν πιθανές αλληλεπιδράσεις μεταξύ των παραγόντων ελέγχου. Επιπλέον καθορίζονται οι στόχοι του πειράματος.

### **3. Πειραματικός σχεδιασμός**

Στο στάδιο αυτό σχεδιάζεται το πείραμα μέσω αριθμητικών πινάκων και ορίζεται η μέθοδος για την ανάλυση των δεδομένων. Χρησιμοποιούνται τα επίπεδα παραγόντων και οι στόχοι όπως αυτά καθορίστηκαν στο προηγούμενο στάδιο του καταιγισμού ιδεών. Αρχικά, επιλέγονται τα κατάλληλα ορθογώνια διανύσματα για τους παράγοντες ελέγχου και θορύβου. Για το σκοπό αυτό, η μέθοδος παρέχει ένα πλήθος τυποποιημένων ορθογωνίων πινάκων και τις αντίστοιχες γραφικές τους παραστάσεις. Στη συνέχεια, πρέπει να καθοριστεί η διαδικασία για την προσομοίωση της διακύμανσης κάθε ποιοτικού χαρακτηριστικού, εξαιτίας των παραγόντων θορύβου. Πρέπει να λαμβάνεται μέριμνα για την επιλογή του αριθμού των δοκιμών, τις συνθήκες πειραματισμού, τον τρόπο μέτρησης των αποδόσεων, καθώς και άλλων παραγόντων.

### **4. Διεξαγωγή πειράματος**

Η μέθοδος Taguchi μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε κάθε περίπτωση όπου μια διεργασία πρέπει να ελεγχθεί. Η διεργασία αυτή μπορεί να είναι ένα πείραμα, ένα σύστημα μαθηματικών εξισώσεων ή ένα πρότυπο που μπορεί να μοντελοποιήσει κατάλληλα την απόκριση αρκετών προϊόντων και διαδικασιών.

### **5. Ανάλυση**

Μπορούν να χρησιμοποιηθούν διάφοροι τρόποι ανάλυσης, όπως η Ανάλυση Διασποράς (ANOVA) ή η Πολλαπλή Παλινδρόμηση (Multiple

Regression), αλλά είναι διαθέσιμες και απλούστερες μέθοδοι. Για την ανάλυση των αποτελεσμάτων, η μέθοδος Taguchi χρησιμοποιεί ένα στατιστικό μέτρο απόδοσης που ονομάζεται λόγος σήματος προς θόρυβο (signal to noise ratio - S/N). Βάσει του λόγου S/N, μπορούν να προσδιοριστούν τα επίπεδα των παραγόντων ελέγχου που αντιμετωπίζουν αποτελεσματικότερα το θόρυβο. Στη απλούστερή του μορφή, ο λόγος S/N είναι ο λόγος του μέσου (signal) προς την τυπική απόκλιση (noise). Η κατάλληλη μορφή του S/N εξαρτάται από το κριτήριο που πρέπει να βελτιστοποιηθεί για το κάθε ποιοτικό χαρακτηριστικό. Σε αυτή την φάση, γίνεται ο καθορισμός των βέλτιστων επιπέδων για όλους τους παράγοντες ελέγχου.

### **6. Επιβεβαίωση πειράματος**

Τα αποτελέσματα που προέκυψαν από τη διαδικασία της ανάλυσης πρέπει να επιβεβαιωθούν από την εκτέλεση πειραμάτων, στα οποία οι παράγοντες ελέγχου λαμβάνουν τιμές που αντιστοιχούν στα βέλτιστα επίπεδα αυτών.

### 1.5.3 Αλληλεπιδράσεις όπως αντιμετωπίζονται από τον Taguchi

Για το σχεδιασμό εύρωστων προϊόντων και διεργασιών, πρέπει αρχικά να γίνει ο διαχωρισμός των παραγόντων που επηρεάζουν το τελικό ποιοτικό αποτέλεσμα, σε δυο κατηγορίες: παράγοντες ελέγχου (Control, C) και παράγοντες θορύβου (Noise, N). Οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των παραγόντων αυτών διακρίνονται σε τρεις κατηγορίες:

- Αλληλεπιδράσεις μεταξύ των παραγόντων ελέγχου
- Αλληλεπιδράσεις μεταξύ παραγόντων ελέγχου και παραγόντων θορύβου
- Αλληλεπιδράσεις μεταξύ των παραγόντων θορύβου

Ο στόχος του παραμετρικού σχεδιασμού είναι η επιλογή των κατάλληλων επιπέδων των παραγόντων ελέγχου ώστε η ποιοτική απόκριση να επηρεάζεται όσο το δυνατόν λιγότερο από τους παράγοντες θορύβου και να μπορεί να προσαρμόζεται στο στόχο ανάλογα με την περίπτωση. Για την επίτευξη του σκοπού αυτού, αξιοποιούνται κατά κύριο λόγο οι αλληλεπιδράσεις  $C \times N$ . Οι αλληλεπιδράσεις  $N \times N$  έχουν ασήμαντο ρόλο στην επίτευξη της ευρωστίας έναντι των παραγόντων θορύβου.

Τα ερωτήματα που προσδιορίζουν την πηγή της έντονης αντιπαράθεσης περί της μεθόδου Taguchi είναι: Ποιος είναι ο ρόλος των αλληλεπιδράσεων  $C \times C$  στην μείωση της ευαισθησίας της απόκρισης στον θόρυβο; Και αν, όντως, υπάρχουν αλληλεπιδράσεις  $C \times C$ , πως θα πρέπει να τις διαχειριστούμε; Ο τρόπος αντιμετώπισης των αλληλεπιδράσεων  $C \times C$  στη μέθοδο Taguchi έχει διαφορετική φιλοσοφία από την κλασσική προσέγγιση του σχεδιασμού πειραμάτων. Συχνά, μάλιστα, υποστηρίζεται ότι η προσέγγιση Taguchi παρέχει πληρέστερες πληροφορίες για τις αλληλεπιδράσεις από την τυπική προσέγγιση του κλασματικού παραγοντικού σχεδιασμού.

Στη μέθοδο Taguchi, η παρουσία μεγάλων αλληλεπιδράσεων  $C \times C$  είναι τελείως ανεπιθύμητη. Επομένως, γίνονται προσπάθειες να ελαχιστοποιηθούν ή και να εξαλειφθούν, μέσω της συνετής επιλογής των ποιοτικών χαρακτηριστικών, των παραγόντων ελέγχου και των επιπέδων τους, καθώς και του λόγου S/N. Η κατάλληλη επιλογή των προαναφερθέντων ποσοτήτων αποτελεί συνήθως το μεγαλύτερο μέρος

της προσπάθειας για τη δημιουργία ενός εύρωστου σχεδιασμού. Εάν οι αλληλεπιδράσεις  $C \times C$  δεν είναι δυνατόν να εξαλειφθούν, πρέπει να διερευνηθούν διαφορετικοί σχηματισμοί για το πρόβλημα. Σε διαφορετική περίπτωση, το ρίσκο για την έναρξη μιας παραγωγικής διαδικασίας που βασίζεται σε ελαττωματικό σχεδιασμό είναι μεγάλο. Δεν υπάρχουν άλλωστε κανόνες που μπορούν να εγγυηθούν την απουσία των αλληλεπιδράσεων  $C \times C$ . Αυτό μπορεί να επιτευχθεί μόνο με τη μελέτη κάθε περίπτωσης χωριστά ή σε κάποιες περιπτώσεις ακόμα και με τη χρήση «δοκιμής και λάθους» (Phadke, 1992).

Σύμφωνα με τη μέθοδο Taguchi, μπορούν να επιλέγουν τα βέλτιστα επίπεδα για τους ελεγχόμενους παράγοντες εάν θεωρηθεί ότι δεν υπάρχουν αλληλεπιδράσεις μεταξύ αυτών. Η μέθοδος Taguchi πολύ σπάνια εκτιμά τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των παραγόντων ελέγχου  $C \times C$ . Σε πολλές περιπτώσεις, η μη ύπαρξη των αλληλεπιδράσεων αυτών μπορεί να θεωρηθεί μια ασφαλής παραδοχή. Υπάρχουν, όμως, και περιπτώσεις όπου οι αλληλεπιδράσεις  $C \times C$  έχουν τεράστια επίδραση στο σύστημα και η μη αξιοποίησή τους μπορεί να οδηγήσει σε λανθασμένα συμπεράσματα (Χ. Κουκουβίνος, 2008).

### 1.5.4. Μέτρα απόδοσης Taguchi

Ο εύρωστος σχεδιασμός επιτυγχάνεται μέσω μιας διαδικασίας λήψης αποφάσεων που περιλαμβάνει τρία στάδια:

- Τον καθορισμό του στόχου
- Τον καθορισμό των εφικτών λύσεων
- Την επιλογή της εφικτής λύσης που ανταποκρίνεται καλύτερα στο στόχο.

Υψηλή ευρωστία σημαίνει μικρή μεταβλητότητα στην απόκριση, που συνεπάγεται μικρή απώλεια ποιότητας και μεγάλη ικανοποίηση του καταναλωτή.

Για την ποσοτικοποίηση της τρέχουσας μεταβλητότητας, χρησιμοποιείται ένας ειδικός δείκτης ποιοτικής απόδοσης που ονομάζεται λόγος σήματος/θορύβου (signal-to-noise ratio or S/N ratio -

SNR) και μετράται σε decibels (dB). Ο Taguchi διαπίστωσε ότι η διαδικασία βελτιστοποίησης που περιλαμβάνει το λόγο S/N δίνει, πράγματι, εκείνον το συνδυασμό παραμέτρων με την ελάχιστη τυπική απόκλιση, ενώ διατηρεί τη μέση απόδοση στο στόχο.

### 1.5.4.1 Ο λόγος του σήματος προς το θόρυβο

Η ιδέα πίσω από το λόγο του σήματος προς το θόρυβο (signal to noise, SNR) εκφράζεται μέσω της συνάρτησης Απώλειας της Ποιότητας. Η ποιότητα ορίζεται ως η απώλεια που προκαλείται στην κοινωνία από τη στιγμή που το προϊόν αποστέλλεται στον πελάτη. Η απώλεια της ποιότητας προκαλείται λόγω της μεταβλητότητας που παρουσιάζει το υπό εξέταση λειτουργικό χαρακτηριστικό της ποιότητας σε σχέση με την επιθυμητή τιμή-στόχο. Η συμβατική προσέγγιση του σχεδιασμού πειραμάτων προσπαθεί να μεγιστοποιήσει τη λειτουργία στο στόχο. Στην προσέγγιση του Taguchi, υποστηρίζεται ότι ίσως να είναι καλύτερη μια εύρωστη διαδικασία που δίνει καλά αποτελέσματα με συνέπεια σε σχέση με μια διαδικασία που δίνει θεωρητικά καλύτερα αποτελέσματα, αλλά, εξαιτίας της διακύμανσης, τα αποτελέσματα αυτά αποδεικνύονται στην πράξη λιγότερο ικανοποιητικά.

Είναι πιθανό να δημιουργείται η εσφαλμένη αντίληψη ότι οι αλληλεπιδράσεις δε λαμβάνονται υπ' όψη στη μεθοδολογία του Taguchi. Ωστόσο, συμβαίνει το ακριβώς αντίθετο. Στην πραγματικότητα, ο Taguchi θεωρεί ότι οι αλληλεπιδράσεις αποτελούν ένα από τα πιο σημαντικά ζητήματα στην προσέγγισή του. Ο λόγος S/N, που αποτελεί έναν δείκτη για την ευρωστία της ποιότητας, ποσοτικοποιεί την αλληλεπίδραση των "παραγόντων ελέγχου" με τους "παράγοντες θορύβου". Επιπλέον, οι παράγοντες ελέγχου και οι παράγοντες θορύβου κατατάσσονται σε διαφορετικές ομάδες για τη μελέτη της ευρωστίας, γεγονός που έρχεται σε αντίθεση με την παραδοσιακή προσέγγιση του σχεδιασμού πειραμάτων, όπου δεν υπάρχουν διακρίσεις μεταξύ των παραγόντων ελέγχου και των παραγόντων θορύβου.



Υπάρχουν αρκετά χαρακτηριστικά απόδοσης, όμως είναι σημαντικό να γίνει διάκριση μεταξύ αυτών για την αξιολόγηση της ποιότητας. Επομένως, μια διαφορετική αναλογία S/N είναι απαραίτητη για κάθε χαρακτηριστικό απόδοσης. Για να εντοπιστεί μια ισχυρή λύση στο εκάστοτε πρόβλημα, ο Taguchi ανέπτυξε αρκετές παραλλαγές του λόγου S/N, που χρησιμοποιούνται ανάλογα με το είδος των χαρακτηριστικών που εμπλέκονται σε κάθε ποιοτική ανάλυση. Μεταξύ αυτών, χρησιμοποιούνται κυρίως τρεις δείκτες απόδοσης, οι οποίοι διαφοροποιούνται ανάλογα με την απόκριση:

- ελάχιστη δυνατή απόκριση
- μέγιστη δυνατή απόκριση
- απόκριση που προσεγγίζει όσο το δυνατόν εγγύτερα στην τιμή-στόχο.

Τα κριτήρια που επιλέγονται για την ποσοτικοποίηση των ανωτέρω δεικτών είναι (Taguchi et al., 1989) :

- Το κριτήριο για την ελαχιστοποίηση της απόκρισης αναφέρεται στη βιβλιογραφία ως “smaller is better or less is better or lower is better” και είναι το εξής:

$$SNR_S = -10 \cdot \log \sum_{i=1}^n \frac{y_i^2}{n} \quad (1.1)$$

Το κριτήριο αυτό χρησιμοποιείται για όλα τα ανεπιθύμητα χαρακτηριστικά για τα οποία η ιδανική τιμή είναι μηδέν. Επίσης, όταν η τιμή-στόχος είναι πεπερασμένη και έχει καθοριστεί το μέγιστο ή το ελάχιστο αυτής, η διαφορά μεταξύ των καταγεγραμμένων στοιχείων και των ιδανικών τιμών για τα υπό εξέταση χαρακτηριστικά πρέπει να είναι ελάχιστη. Λόγω του μετασχηματισμού  $-10\log_{10}$  πρέπει να μεγιστοποιηθεί ο  $SNR_S$ .

- Το κριτήριο για την μεγιστοποίηση της απόκρισης αναφέρεται ως “larger is better or higher is better or more is better” και είναι το εξής:

$$SNR_S = -10 \cdot \log \sum_{i=1}^n \frac{1}{y_i^2} = 10 \cdot \log \sum_{i=1}^n \frac{1}{y_i^{-2} \cdot n} \quad (1.2)$$

όπου  $y_i$  το αποτέλεσμα η μετρήσεων για κάθε συνδυασμό ελεγχόμενων παραγόντων.

Το χαρακτηριστικό που έχει στόχο τη μεγιστοποίηση (larger-the-better) πρέπει να είναι μη αρνητικό και η επιθυμητή τιμή του να είναι το άπειρο. Χαρακτηριστικά όπως η θερμική απόδοση ή το ποσοστό των μη ελαττωματικών προϊόντων, που προκύπτουν από μια παραγωγική διαδικασία, έχουν μέγιστη τιμή το 1 (100%). Έτσι, παρόλο που η μεγιστοποίησή τους είναι επιθυμητή, αυτά δεν είναι χαρακτηριστικά της μέγιστης απόκρισης. Από την άλλη μεριά, η δύναμη, η αντοχή, η απόδοση είναι χαρακτηριστικά της μέγιστης απόκρισης αφού η τιμή-στόχος για αυτά είναι οι μεγαλύτερες δυνατές τιμές τους. Το κριτήριο της μέγιστης απόκρισης έχει ως στόχο το άπειρο και σε αυτήν την περίπτωση είναι επιθυμητό να μεγιστοποιήσουμε το  $SNR_L$  (Taguchi et al., 2004).

- Το κριτήριο που χρησιμοποιείται στην περίπτωση που πρέπει η απόκριση να είναι όσο το δυνατόν πιο κοντά στην τιμή-στόχο αναφέρεται στη βιβλιογραφία ως “nominal is better” και είναι το εξής:

$$SNR_S = -10 \cdot \log \left[ \left( \frac{\bar{y}}{s} \right)^2 \right] \quad (1.3)$$

Αυτός ο δείκτης απόδοσης χρησιμοποιείται όταν επιθυμούμε η απόκριση να βρίσκεται όσο το δυνατόν εγγύτερα στην τιμή-στόχο. Σε αυτή την περίπτωση η ανάλυση που προτείνεται έχει διττό στόχο: να συγκεντρώσει κάποια χαρακτηριστικά γύρω από μια τιμή-στόχο και ταυτόχρονα να ελαττώσει τη διακύμανση γύρω από αυτήν την τιμή.

Για όλες τις παραπάνω περιπτώσεις επιδιώκεται η μεγιστοποίηση του επιλεγμένου SNR, οπότε η επίδραση του σήματος είναι πολύ μεγαλύτερη από την επίδραση του θορύβου, γεγονός που αποτελεί προϋπόθεση για την κατασκευή ισχυρών διαδικασιών και στιβαρών προϊόντων.

Χρησιμοποιώντας, λοιπόν, τον δείκτη απόδοσης S/N, η προσέγγιση Taguchi μπορεί να προσφέρει κατάλληλες πληροφορίες για κάθε

απόκριση που πρέπει να βελτιστοποιηθεί. Ωστόσο, δεν μπορεί να προσφέρει μια συγκεκριμένη και επαρκή μαθηματική λύση για την ταυτόχρονη βελτιστοποίηση πολλών χαρακτηριστικών σε ένα προϊόν ή μια διαδικασία.

Η χρήση του λόγου S/N για την ανάλυση δεδομένων προσφέρει δυο πλεονεκτήματα:

- α) οδηγό για την επιλογή των βέλτιστων επιπέδων των παραγόντων ελέγχου που βασίζεται στην ελάχιστη διασπορά των παρατηρήσεων γύρω από τη μέση τιμή
- β) προσφέρει αντικειμενική σύγκριση για δύο σύνολα πειραματικών δεδομένων σε σχέση με την απόκλιση του μέσου όρου από το στόχο.

Όπως έχει προαναφερθεί, η μέθοδος Taguchi απαιτεί τον υπολογισμό του SNR για τα δεδομένα που προέρχονται από κάθε πειραματική διάταξη των παραγόντων ελέγχου. Αφού έχουν υπολογιστεί οι λόγοι του σήματος προς το θόρυβο αναλύονται με βάση τυπικές τεχνικές Ανάλυσης Διασποράς (ANOVA) και, δεδομένου ότι ζητάμε τη μεγιστοποίηση αυτών, αποδίδονται τα βέλτιστα επίπεδα για κάθε παράγοντα ελέγχου. Στη συνέχεια οι παράγοντες ελέγχου που δεν επηρεάζουν το SNR χρησιμοποιούνται για την προσαρμογή της μέσης απόκρισης στο στόχο. Τέτοιοι παράγοντες ονομάζονται 'παράγοντες προσαρμογής ή συντονισμού' ('adjustment or tuning factors') και μπορεί να είναι γνωστοί στην αρχή της διαδικασίας ή να ταυτοποιούνται στη συνέχεια κατά την ανάλυση δεδομένων. Αποτελεί, άλλωστε, χαρακτηριστικό γνώρισμα της μεθόδου Taguchi η επιβεβαίωση των βέλτιστων αποτελεσμάτων.

### 1.5.4.2 Ορθογώνιοι Σχεδιασμοί

Ένας ορθογώνιος σχεδιασμός OA (n,q,s,t) είναι ένας nqxq σχεδιασμός όπου:

n: το πλήθος των δοκιμών

q: το πλήθος των παραγόντων

s: το πλήθος των επιπέδων

t: η δύναμη σχεδιασμού

Δεν υπάρχει δυνατότητα να δημιουργηθούν ορθογώνιοι σχεδιασμοί για οποιοδήποτε επιλογή των μεταβλητών  $n$ ,  $q$ ,  $s$  και  $t$ . Για παράδειγμα από τον ορισμό είναι σαφές ότι η ποσότητα  $s^t$  πρέπει να διαιρείται με το πλήθος των δοκιμών  $n$ . Εναλλακτικά, θα μπορούσε να επιλεγεί ο συνοπτικός συμβολισμός των ορθογώνιων σχεδιασμών ως  $OA_n(s^q)$ .

Ο Taguchi έχει δημιουργήσει 18 σχεδιασμούς οι οποίοι χωρίζονται σε τρεις κατηγορίες:

- 2 - επιπέδων
- P - επιπέδων
- Μικτών - επιπέδων

Παρακάτω δίνονται κάποιοι ενδεικτικοί ορθογώνιοι σχεδιασμοί :

### 2-επιπέδων

$OA_4(2^3)$ ,  $OA_8(2^7)$ ,  $OA_{12}(2^{11})$ ,  $OA_{16}(2^{15})$ ,  $OA_{32}(2^{31})$  και  $OA_{64}(2^{63})$ . Επίσης έχουμε  $OA_{20}(2^{19})$ ,  $OA_{24}(2^{23})$ ,  $OA_{28}(2^{27})$  (ορθογώνιους σχεδιασμούς τύπου  $OA_{4t}(2^{4t-1})$  για  $t \leq 25$  εκτός  $t = 23$ .)

### P-επιπέδων

$OA_9(3^4)$ ,  $OA_{16}(4^5)$ ,  $OA_{25}(5^6)$ ,  $OA_{27}(3^{13})$ ,  $OA_{64}(4^{21})$ ,  $OA_{81}(3^{40})$ .

### μικτών-επιπέδων

$OA_{18}(2^1 \times 3^7)$ ,  $OA_{32}(2^1 \times 4^9)$ ,  $OA_{36}(2^3 \times 3^{13})$ ,  $OA_{36}(2^{11} \times 3^{12})$ ,  $OA_{36}(2^{11} \times 3^{12})$ ,  $OA_{50}(2^1 \times 5^{11})$ ,  $OA_{54}(2^1 \times 3^{25})$ .

Η μέθοδος Taguchi χρησιμοποιεί ορθογώνιους σχεδιασμούς με παράγοντες δύο ή τριών επιπέδων. Εάν η επίδραση ενός παράγοντα αυτό ενώ εάν δεν είναι γραμμική τότε χρησιμοποιούνται τρία επίπεδα. Παρακάτω παρατίθενται κάποιοι ορθογώνιοι σχεδιασμοί:

Πίνακας 1.1: Ορθογώνιος πίνακας  $OA_8 (2^7)$

Παράμετρος / Αριθμός Προσομοίωσης	1	2	3	4	5	6	7
1	Level 1	Level 1	Level 1	Level 1	Level 1	Level 1	Level 1
2	Level 1	Level 1	Level 1	Level 2	Level 2	Level 2	Level 2
3	Level 1	Level 2	Level 2	Level 1	Level 1	Level 2	Level 2
4	Level 1	Level 2	Level 2	Level 2	Level 2	Level 1	Level 1
5	Level 2	Level 1	Level 2	Level 1	Level 2	Level 1	Level 2
6	Level 2	Level 1	Level 2	Level 2	Level 1	Level 2	Level 1
7	Level 2	Level 2	Level 1	Level 1	Level 2	Level 2	Level 1
8	Level 2	Level 2	Level 1	Level 2	Level 1	Level 1	Level 2

Πίνακας 1.2: Ορθογώνιος πίνακας  $OA_8 (4^1 \times 2^4)$

Παράμετρος / Αριθμός Προσομοίωσης	1	2	3	4	5
1	Level 1	Level 1	Level 1	Level 1	Level 1
2	Level 1	Level 2	Level 2	Level 2	Level 2
3	Level 2	Level 1	Level 1	Level 2	Level 2
4	Level 2	Level 2	Level 2	Level 1	Level 1
5	Level 3	Level 1	Level 2	Level 1	Level 2
6	Level 3	Level 2	Level 1	Level 2	Level 1
7	Level 4	Level 1	Level 2	Level 2	Level 1
8	Level 4	Level 2	Level 1	Level 1	Level 2

Πίνακας 1.3: Ορθογώνιος πίνακας  $OA_8 (3^1 \times 2^4)$

Παράμετρος / Αριθμός Προσομοίωσης	1	2	3	4	5
1	Level 1	Level 1	Level 1	Level 1	Level 1
2	Level 1	Level 2	Level 2	Level 2	Level 2
3	Level 2	Level 1	Level 1	Level 2	Level 2
4	Level 2	Level 2	Level 2	Level 1	Level 1
5	Level 3	Level 1	Level 2	Level 1	Level 2
6	Level 3	Level 2	Level 1	Level 2	Level 1
7	Level 2	Level 1	Level 2	Level 2	Level 1
8	Level 2	Level 2	Level 1	Level 1	Level 2





## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: ΠΟΛΥΚΡΙΤΗΡΙΑΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΛΗΨΗΣ ΑΠΟΦΑΣΕΩΝ

### 2.1 Πολυκριτηριακή ανάλυση – αξιολόγηση

Χρησιμοποιώντας τον δείκτη απόδοσης S/N, η προσέγγιση του Taguchi μπορεί να προσφέρει κατάλληλες πληροφορίες για κάθε απόκριση που πρέπει να βελτιστοποιηθεί. Ωστόσο, δεν μπορεί να προσφέρει μια συγκεκριμένη και επαρκή μαθηματική λύση για την ταυτόχρονη βελτιστοποίηση πολλών χαρακτηριστικών σε ένα προϊόν ή μια διαδικασία.

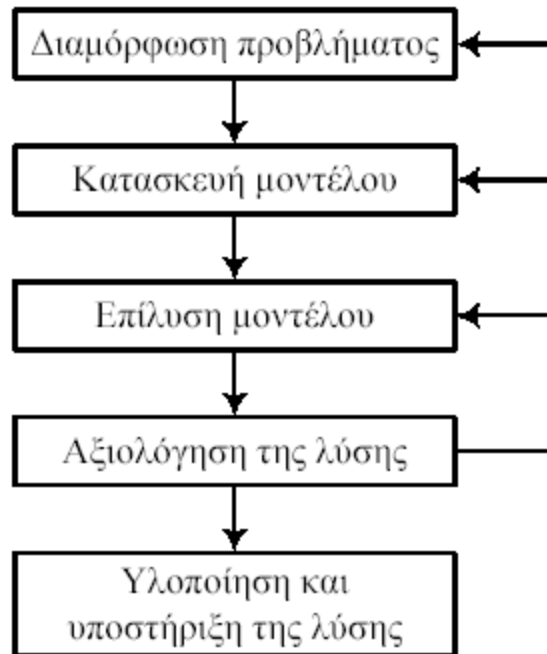
Οι διαθέσιμες επιλογές σε ένα τέτοιο πρόβλημα παρουσιάζουν άριστη επίδοση μόνο ως προς έναν ή περισσότερους, αλλά ποτέ ως προς όλους τους στόχους.

Η επιλογή που θα ικανοποιούσε μια τέτοια συνθήκη θα ήταν η άριστη (και δε θα υπήρχε πρόβλημα απόφασης). Η ικανοποίηση των στόχων αυτών δεν μπορεί να είναι πλήρης. Είναι αναγκαίος λοιπόν ένας συμβιβασμός μεταξύ των αλληλοσυγκρουόμενων στόχων.

Το μεθοδολογικό πλαίσιο της επιχειρησιακής έρευνας στην ‘παραδοσιακή’ του μορφή όπως αναφέρεται στην βιβλιογραφία, φαίνεται στο παρακάτω Σχήμα.

Στο πρώτο στάδιο πραγματοποιείται η διαμόρφωση του προβλήματος, που περιλαμβάνει τον καθορισμό των μεταβλητών απόφασης (decision variables), τον προσδιορισμό του στόχου του προβλήματος (objective) και τον προσδιορισμό του χώρου των εφικτών λύσεων (feasible solutions).





Σχήμα 2.1: Μεθοδολογικό πλαίσιο της επιχειρησιακής έρευνας

Το δεύτερο στάδιο αφορά την κατασκευή του κατάλληλου μοντέλου που περιγράφει το πρόβλημα. Ως μοντέλο ορίζεται η μαθηματική αναπαράσταση του προβλήματος που αποτυπώνει όλες τις μεταβλητές απόφασης, τους στόχους και τους περιορισμούς, και η κατασκευή του βασίζεται σε κάποιες υποθέσεις, οι οποίες όσο πιο ρεαλιστικές είναι τόσο αυξάνεται η πιθανότητα το μοντέλο να συμβάλει με επιτυχία στην αντιμετώπιση του προβλήματος που ερευνάται. Το τρίτο στάδιο, αφορά την επίλυση του μοντέλου με την κατάλληλη μαθηματική μέθοδο έτσι ώστε να προσδιοριστούν οι τιμές των μεταβλητών απόφασης οι οποίες αντιστοιχούν σε μία εφικτή λύση που βελτιστοποιεί τον στόχο του προβλήματος. Η επόμενη φάση ερευνά την ποιότητα της λύσης (ευαισθησία, ευστάθεια κλπ) σε συνάρτηση με τις παραμέτρους του μοντέλου, τις υποθέσεις και των δεδομένων του προβλήματος. Τέλος, στο τελευταίο στάδιο περιλαμβάνεται η υλοποίηση της λύσης και η υποστήριξη – αιτιολόγηση της σε περίπτωση που χρειαστεί .

Η λήψη αποφάσεων με το 'παραδοσιακό' μεθοδολογικό πλαίσιο παρουσιάζει διάφορα προβλήματα, βασικότερα χαρακτηριστικά των οποίων είναι :

1. Η ύπαρξη πολλαπλών κριτηρίων οδηγεί σε αντικρουόμενα αποτελέσματα, καθώς η επιλογή που θεωρείται ως βέλτιστη με βάση ένα κριτήριο δεν είναι απαραίτητα βέλτιστη και σε σχέση με τα υπόλοιπα κριτήρια της ανάλυσης.
2. Δεδομένης της αντικρουόμενης φύσης των κριτηρίων δεν είναι δυνατός ο εντοπισμός μίας βέλτιστης λύσης.
3. Η επιλογή της κατάλληλης λύσης είναι υποκειμενική και βασίζεται στην πολιτική λήψης αποφάσεων που ακολουθεί αυτός που αποφασίζει.

Ουσιαστική διαφοροποίηση της πολυκριτηριακής αξιολόγησης σε σχέση με άλλες προσεγγίσεις είναι η διαρκής προσαρμογή του συστήματος λήψης απόφασης στις προτιμήσεις των αποφασιζόντων, στην εταιρική στρατηγική που έχει υιοθετηθεί και στην εξέλιξη της διαχείρισης του έργου.

Το χαρακτηριστικό αυτό έχει ιδιαίτερη σημασία καθώς ο ρόλος και οι σχέσεις των αποφασιζόντων ενδέχεται να επηρεάσουν το μαθηματικό μοντέλο και την εκάστοτε λήψη απόφασης.

Πολυκριτηριακά προβλήματα καθώς τα διαφορετικά κριτήρια αξιολόγησης που θεσπίζονται για την αξιολόγηση των εναλλακτικών λύσεων είναι συχνά αλληλοσυγκρουόμενα (Simon, 1957). Συγχρόνως, για να επιτευχθεί το βέλτιστο αποδεκτό αποτέλεσμα γίνεται ένας συμβιβασμός των πολλαπλών στόχων (multiobjective decision problems) (Goicoechea, 1982).

## 2.2 Χαρακτηριστικά στοιχεία πολυκριτηριακής ανάλυσης και λήψης απόφασης

Στη διαδικασία πολυκριτηριακής ανάλυσης και λήψης μιας απόφασης συνήθως διερευνάται ένα σύνολο δυνατών λύσεων, γίνεται υπολογισμός και συγκέντρωση όλων των σχετικών δεδομένων που αφορούν κάθε λύση και τις συνέπειες της.

Μετά γίνεται, η επιλογή και η ιεράρχηση εναλλακτικών με την εφαρμογή του μοντέλου αξιολόγησης. Η εφαρμογή του μοντέλου στηρίζεται στην αξιοπιστία των δεδομένων και στις προβλέψεις για τις συνέπειες και τα αποτελέσματα κάθε εναλλακτικής λύσης.

Ως σημαντικά στοιχεία της πολυκριτηριακής ανάλυσης και λήψης απόφασης θεωρούνται τα ακόλουθα:

- i. Ο σκοπός της διεργασίας-έργου, του προβλήματος και τα χαρακτηριστικά του. Η ακριβής περιγραφή του σκοπού και των στόχων του προβλήματος που εξετάζεται.
- ii. Τα κριτήρια αξιολόγησης και ο ορισμός ορίων: ο ορισμός κατάλληλων κριτηρίων που θα χρησιμοποιηθούν για να αξιολογηθούν οι διάφορες εναλλακτικές λύσεις αποτελεί σχεδόν τον κανόνα σε όλα τα προβλήματα πολυκριτηριακής αξιολόγησης. Η επιλογή των κριτηρίων και συχνά των ορίων αποτελούν υποκειμενικά στοιχεία. Ειδικά για την επιλογή των ορίων δεν υπάρχει αμφιβολία ότι η επιλογή τους ενδεχομένως να περιορίσει το εύρος αποδεκτών λύσεων. Όσον αφορά τα κριτήρια, αυτά πρέπει να περιγραφούν συγκεκριμένη οπτική ή πληρέστερα την σύνθεση της συνολικής αξίας της βέλτιστης λύσης. Πολλές φορές θέτοντας ένα ιδιαίτερα αυστηρό κριτήριο, το πρόβλημα καθίσταται μη επιλύσιμο.
- iii. Η συγκέντρωση των πληροφοριών και η ανάλυση τους: αποτελεί ένα από τα βασικά βήματα της λήψης απόφασης. Κάθε λύση πρέπει να αναλυθεί ως προς τις συνέπειες της ως προς τα κριτήρια.

Η πολυκριτηριακή ανάλυση δημιουργεί σχέσεις προτίμησης μεταξύ των επιλογών μέσω αναφοράς σε ένα εκτεταμένο σύνολο στόχων τους

οποίους έχει εντοπίσει ο λήπτης αποφάσεων και για τους οποίους έχει ορίσει μετρήσιμα κριτήρια για να αξιολογήσει το βαθμό στον οποίο οι στόχοι αυτοί έχουν επιτευχθεί. Σε απλές συνθήκες, η διαδικασία εντοπισμού των στόχων και των κριτηρίων μπορεί να παρέχει από μόνη της αρκετές πληροφορίες για τους λήπτες αποφάσεων. Ωστόσο, όταν απαιτείται ένα επίπεδο λεπτομέρειας αρκετά συναφές με την ανάλυση κόστους-κέρδους (CBA), η πολυκριτηριακή ανάλυση προσφέρει μία πληθώρα τρόπων συγκέντρωσης των στοιχείων για κάθε κριτήριο ξεχωριστά ώστε να παρέχει δείκτες για τη συνολική απόδοση των επιλογών.

Ένα κύριο χαρακτηριστικό της πολυκριτηριακής ανάλυσης είναι η έμφαση που δίνεται στην κρίση της ομάδας των ληπτών απόφασης για τον καθορισμό των στόχων και των κριτηρίων, εκτιμώντας παράλληλα και τη σχετική σημαντικότητα των βαρών καθώς και για την κριτική της συνεισφοράς κάθε επιλογής σε κάθε κριτήριο απόδοσης. Η υποκειμενικότητα που χαρακτηρίζει τη διαδικασία αυτή μπορεί να προκαλέσει κάποια ανησυχία. Η βάση της κατά κύριο λόγο αποτελείται από τις προσωπικές επιλογές στόχων, κριτηρίων, βαρών και αξιολογήσεων εκπλήρωσης των στόχων των ληπτών αποφάσεων, παρόλο που «αντικειμενικά» στοιχεία, όπως οι τιμές που έχουν παρατηρηθεί, μπορούν επίσης να συμπεριληφθούν. Η πολυκριτηριακή ανάλυση, ωστόσο, προσφέρει ένα βαθμό δομής, ανάλυσης και ανοίγματος σε κατηγορίες αποφάσεων οι οποίες εμπίπτουν πέραν της πρακτικής εφαρμογής της .

Οι τεχνικές πολυκριτηριακής ανάλυσης εφαρμόζουν αριθμητική ανάλυση στον πίνακα αποδοτικότητας σε δύο στάδια:

1. **Σκορ:** ένα αριθμητικό σκορ ορίζεται για τις αναμενόμενες συνέπειες κάθε επιλογής βάσει μιας κλίμακας προτίμησης για κάθε επιλογή και για κάθε κριτήριο. Οι περισσότερο προτιμητέες επιλογές έχουν μεγαλύτερο σκορ στην κλίμακα και οι λιγότερο προτιμητέες έχουν χαμηλότερο σκορ. Στην πράξη, οι κλίμακες από 0 έως 100 χρησιμοποιούνται συχνά, όπου το 0 αναπαριστά μία πραγματική ή υποθετικά λιγότερο προτιμητέα επιλογή, και το 100 σχετίζεται με μία πραγματική ή περισσότερο προτιμητέα επιλογή. Όλες οι επιλογές που λαμβάνονται υπόψη στην πολυκριτηριακή ανάλυση εμπίπτουν μεταξύ του 0 και του 100.

2. **Βάρη:** αριθμητικά βάρη ορίζονται, για κάθε κριτήριο, για να προσδιορίσουν τις σχετικές εκτιμήσεις μίας αλλαγής μεταξύ της κορυφής και της βάσης της επιλεγμένης κλίμακας.

Στη συνέχεια, μαθηματικοί τύποι χρησιμοποιούνται για να συνδυαστούν τα δύο παραπάνω στοιχεία ώστε να αξιολογηθεί ολικά το κάθε κριτήριο. Αυτή η διαδικασία απαιτεί επομένως από τον καθένα να παρέχει αυτές τις πληροφορίες, ώστε να αναλυθούν στη συνέχεια με τέτοιο τρόπο που να είναι συνεπής με τις προτιμήσεις, όπως αυτές προκύπτουν από τις υποκειμενικές εκτιμήσεις.

Αυτές οι προσεγγίσεις πολυκριτηριακής ανάλυσης ονομάζονται *αντισταθμιστικές τεχνικές*, καθώς χαμηλά σκορ σε ένα κριτήριο μπορούν να αντισταθμιστούν από υψηλά σκορ σε άλλο κριτήριο. Ο πιο απλός τρόπος συνδυασμού των σκορ σε κάθε κριτήριο και των σχετικών βαρών μεταξύ των κριτηρίων είναι ο απλός σταθμισμένος μέσος όρος των σκορ.

Η χρήση των σταθμισμένων μέσων όρων βασίζεται στην υπόθεση *της αμοιβαίας ανεξαρτησίας των προτιμήσεων*. Αυτό σημαίνει ότι ισχύς της προτίμησης μίας επιλογής για ένα κριτήριο είναι ανεξάρτητη από την ισχύ της προτίμησης για ένα άλλο κριτήριο. Όπου δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί η υπόθεση της αμοιβαίας ανεξαρτησίας των προτιμήσεων, άλλες μέθοδοι είναι διαθέσιμες, οι οποίες είναι ωστόσο πιο πολύπλοκες στην εφαρμογή τους.

Η πολυκριτηριακή αξιολόγηση ακολουθεί τους τρεις βασικούς στόχους:

- την ανάλυση της ανταγωνιστικής φύσης των κριτηρίων
- την μοντελοποίηση των προτιμήσεων του αποφασίζοντος
- τον εντοπισμό ικανοποιητικών λύσεων

Αυτοί οι στόχοι είναι γενικοί, αφορούν κάθε πολυκριτηριακό πρόβλημα.

### 2.3 Κατηγορίες πολυκριτηριακών μεθόδων

Μια πληρέστερη ταξινόμηση των κατευθύνσεων των πολυκριτηριακών μεθόδων τις κατατάσσει στις:

- Μεθόδους-συστήματα αξιών (value systems): Αυτές εκφράζουν κυρίως την αμερικάνικη σχολή. Στοχεύει στην κατασκευή ενός συστήματος αξίας το οποίο προκύπτει από τη σύνθεση των προτιμήσεων των ληπτών αποφάσεων σε ότι αφορά τα κριτήρια (π.χ. MAUT).
- Μέθοδος μέτρησης απόστασης: Αποτελούν μετεξέλιξη βασικών μεθόδων που αξιολογούν τις σχετικές και απόλυτες αποστάσεις μεταξύ των επιλογών, των ιδανικών και των χειρότερων (π.χ. TOPSIS).
- Μέθοδος βασισμένες σε σχέσεις υπεροχής (outranking relations): Αποτελούν την γαλλική και πλέον Ευρωπαϊκή σχολή. Στοχεύουν στην αντιμετώπιση του προβλήματος της μη-συγκρισιμότητας μεταξύ των εναλλακτικών λύσεων και κριτηρίων (π.χ. ELECTRE).
- Αναλυτικές-συνθετικές προσεγγίσεις (Aggregation-Disaggregation Approach): στοχεύουν στην ανάλυση της συμπεριφοράς του λήπτη αποφάσεων και του τρόπου αντίληψης του. Με χρήση επαναληπτικών διαδικασιών, αναλύονται και στη συνέχεια συντίθενται σε ένα σύστημα αξιών όλες οι παράμετροι του προβλήματος και κρίσης του λήπτη αποφάσεων (π.χ. AHP).

Στην παρούσα μεταπτυχιακή μελετώνται δύο μέθοδοι πολυκριτηριακής ανάλυσης, οι οποίες αναλύονται παρακάτω. Οι δύο μέθοδοι είναι:

- ✓ GRA (Grey Relational Analysis)
- ✓ TOPSIS (The Technique for Order Preference by Similarity to Ideal Solution)

### 2.3.1 Ανάλυση και αξιολόγηση με τη μέθοδο GRA (Grey Relational Analysis)

Η μέθοδος αξιολόγησης ονομάζεται GRA (Grey Relational Analysis) και βασίζεται στη θεωρία γκρι συστημάτων (Grey System Theory). Ως θεωρία πρωτοαναπτύχθηκε το 1982 από τον Deng υπό το πρίσμα ότι οι πληροφορίες είναι ασαφείς και ελλιπείς και δεν επιτρέπουν την μοντελοποίηση ενός συστήματος με τις κλασικές στατιστικές μεθόδους καθώς υπάρχει αβεβαιότητα και έλλειψη πληροφορίας (Deng, 1982).

Η GRA αξιολογεί ως μαύρη την κατάσταση που δεν υπάρχει καμία πληροφορία, ως γκρι τη μέτρια γνώση πληροφορίας και ως λευκή την άριστη γνώση.

Η εφαρμογή της μεθόδου GRA στηρίζεται στην ανάλυση των σχέσεων αβεβαιότητας που παρουσιάζει ένας παράγοντας (εν προκειμένω μια εναλλακτική) σε σχέση με όλους τους υπόλοιπους παράγοντες (εναλλακτικές) ως προς την καλύτερη και την χειρότερη επίδοση σε ένα μικρό δείγμα μετρήσεων (σενάρια). Αποτελεί μια θεωρία που συμπληρώνει τις κλασικές στατιστικές μεθόδους και τη θεωρία της ασάφειας. Η ενσωμάτωση της εφαρμογής της GRA ενδείκνυται και τεκμηριώνεται στην παρούσα περίπτωση γιατί:

- Η χρήση της GRA είναι ιδιαίτερα διαδεδομένη σε εφαρμογές συνόλων με μικρό μέγεθος δείγματος που κυριαρχεί η ασάφεια των αποτελεσμάτων και που αυτά προκύπτουν με επαναληψιμότητα μετρήσεων με διαφοροποιήσεις εκτέλεσης. Πόλυ μεγάλος αριθμός πειραματικών αναλύσεων πειραμάτων βασίζεται στην επεξεργασία των αποτελεσμάτων με την GRA (Sifeng, et al., 2010).
- Έχει χρησιμοποιηθεί σε μεγάλο εύρος ζητημάτων άλλων γνωστικών αντικειμένων όπως: ανάλυση πληροφοριακών συστημάτων, νευρωνικά δίκτυα, κοινωνικοοικονομικά μοντέλα αξιολόγησης, παραγωγικές διαδικασίες, ανάλυση πειραματικών μετρήσεων. Έχουν δημοσιευθεί τουλάχιστον 5986 σχετικές εργασίες με τη θεωρία γκρι συστημάτων το διάστημα 1982 ως

2006 (Deng, 1989; Tsai, et al., 2003; Sifeng, et al., 2007; Hong-yi, et al., 2010; Su, et al., 2010; Sifeng, et al., 2010).

- Επιτρέπει τη σταθμισμένη αποτίμηση των αποτελεσμάτων των σεναρίων .
- Το δείγμα επιλύσεων είναι σχετικά μικρό για να εφαρμοστούν οι κλασσικές στατιστικές μέθοδοι, ενώ υπάρχουν υποκειμενικά στοιχεία σε κάθε σενάριο επίλυσης (π.χ. διαφορετικοί συντελεστές βαρύτητας, διαφορετικές προτιμήσεις και εκτιμήσεις στόχων και άλλα στοιχεία) που αποσυσχετίζουν τα σενάρια μεταξύ τους εισάγοντας σημαντική αβεβαιότητα.
- Τα προβλήματα που μοντελοποιούνται χαρακτηρίζονται από την έλλειψη και την αβεβαιότητα της πληροφορίας. Το πρόβλημα δεν έχει γνωστική αβεβαιότητα που είναι στοιχείο των προβλημάτων της θεωρίας ασάφειας, καθώς είναι δεδομένη η επιδίωξη επίτευξης των βέλτιστων στόχων.

Με χρήση που συσχετίζει την Grey relational analysis με την μέθοδο Taguchi, η βελτιστοποίηση πολλών στόχων με περίπλοκα χαρακτηριστικά μπορεί να μετατραπεί σε πρόβλημα ενός στόχου βελτιστοποίησης με το Grey relational grade σαν αντικειμενική συνάρτηση.

Ακολουθεί μια συνοπτική παρουσίαση της μεθόδου GRA.

- a) Το πρώτο βήμα αυτής της μεθόδου είναι η κανονικοποίηση των δεδομένων για κάθε ποιοτικό χαρακτηριστικό ,που βρίσκονται στον πίνακα αποφάσεων, γίνεται με βάση την επιθυμητή συμπεριφορά του καθενός.

Έτσι για το χαρακτηριστικό που αντιστοιχεί στην περίπτωση smaller-the-better θα εκφράζεται από τον τύπο:

$$x_i(k) = \frac{\max y_i(k) - y_i(k)}{\max y_i(k) - \min y_i(k)} \quad (2.1)$$

Ενώ για το χαρακτηριστικό που αντιστοιχεί στην περίπτωση larger-the-better θα εκφράζεται από τον τύπο:



$$x_i(k) = \frac{y_i(k) - \min y_i(k)}{\max y_i(k) - \min y_i(k)} \quad (2.2)$$

Όπου  $i=1,2,3,\dots,m$   $m$  είναι ο αριθμός των πειραμάτων/προσομοιώσεων από τα ορθογώνια διανύσματα του Taguchi και  $k=1,2,\dots,n$ ,  $n$  είναι ο αριθμός των στόχων. Το  $\text{Min}(y_i(k))$  είναι η μικρότερη τιμή των  $y_i(k)$  για τον  $k^{\text{th}}$  στόχο ενώ το  $\text{Max}(y_i(k))$  είναι η μεγαλύτερη τιμή των  $y_i(k)$  για τον  $k^{\text{th}}$  στόχο. Το  $x_i(k)$  είναι η τιμή μετά της εφαρμογή των παραπάνω τύπων.

b) Το δεύτερο βήμα είναι ο υπολογισμός του συντελεστή γκρι κατάστασης αναφέρεται στη σχέση ενός στοιχείου ενός παράγοντα με την βέλτιστη επίδοση. Ο υπολογισμός αυτής της τιμής του grey relational coefficient ( $\xi_i(k)$ ) δίνεται παρακάτω:

$$\xi_i(k) = \frac{\Delta_{\min} + \zeta \Delta_{\max}}{\Delta_{oi}(k) + \zeta \Delta_{\max}}, 0 < \xi_i(k) \leq 1 \quad (2.3)$$

Υπολογίζονται οι ακόλουθοι δείκτες που σχετίζονται με τις αποκλίσεις:

$$\Delta_{oi}(k) = \|x_0(k) - x_i(k)\| \quad (2.4)$$

$$\Delta_{\max} = \max_{j \in i} \max_{\forall k} \|x_0(k) - x_i(k)\| \quad (2.5)$$

$$\Delta_{\min} = \min_{j \in i} \min_{\forall k} \|x_0(k) - x_i(k)\| \quad (2.6)$$

Όπου  $\Delta_{oi}(k)$  εκφράζει την απόλυτη απόκλιση κάθε λύσης από την ιδανική στο σενάριο  $i$ . Το  $\Delta_{\max}$  εκφράζει τη μέγιστη απόκλιση από την ιδανική τιμή του πίνακα αποφάσεων και το  $\Delta_{\min}$  εκφράζει την ελάχιστη απόκλιση από την ιδανική τιμή του πίνακα αποφάσεων

Επίσης  $\zeta \in [0,1]$  όπου ο δείκτης  $\zeta$ , ονομάζεται συντελεστής διαφοροποίησης, ρυθμίζει την διαφοροποίηση του συντελεστή γκρι ως προς τις διαφορές των εναλλακτικών. Έχει αποδειχτεί από σχετική ερευνητική εργασία ότι η τιμή  $\zeta=0,5$  αποτελεί έναν αποδεκτό συμβιβασμό μεταξύ της διαφοροποίησης των αποτελεσμάτων και της στιβαρότητας τους (Chang, 1999). Αν τεθούν υψηλές τιμές του δείκτη  $\zeta$  περιορίζεται η σημασιακών διαφορών των μέσων εναλλακτικών αλλά τα αποτελέσματα γίνονται πιο στιβαρά ενώ αν τεθεί χαμηλή τιμή του

δείκτη τότε γίνεται σημαντική διαφοροποίηση των εναλλακτικών σε βάρος της στιβαρότητας των αποτελεσμάτων.

- c) Ο τύπος για τον υπολογισμό του grey relational grade φαίνεται παρακάτω:

$$\gamma_i = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \xi_i(k) \quad (2.7)$$

Το βέλτιστο επίπεδο των παραμέτρων της διεργασίας είναι το επίπεδο με το μεγαλύτερο grey relational grade. Αν ο grey relational grade έχει την μεγαλύτερη τιμή, δείχνει ότι ο συγκεκριμένος συνδυασμός παραμέτρων/επιπέδων είναι κοντά στη βέλτιστη τιμή. Όσο μεγαλύτερος είναι ο  $\gamma_i$  τόσο σε καλύτερη θέση κατατάσσεται η εναλλακτική  $i$ .

Σε πραγματικές εφαρμογές η επιρροή κάθε παράγοντα δεν είναι ίδια οπότε η παραπάνω εξίσωση τροποποιείται:

$$\gamma_i = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n w_k \xi_i(k) \text{ με } \sum_{k=1}^n w_k = 1 \quad (2.8)$$

Όπου  $w_k$  αντιπροσωπεύει το κανονικοποιημένο βάρος του παράγοντα  $k$ .

Η κατάταξη των εναλλακτικών με τη θεωρία GRA προάγει τις εναλλακτικές που έχουν πολύ καλές επιδόσεις, έστω και αν αυτές οι επιδόσεις είναι συγκεντρωμένες σε ένα περιορισμένο αριθμό σεναρίων με σημαντικούς συντελεστές βαρύτητας. Έτσι η GRA δεν είναι αξιόπιστη στις περιπτώσεις που μια καλή εναλλακτική δεν επιλεγεί σε ένα σενάριο ενώ σε άλλα έχει επιλεγεί σε μεγάλο ποσοστό.

Τέλος θα πρέπει να αναφερθεί ότι αν ο αριθμός των εξεταζομένων σεναρίων είναι αρκετά περιορισμένος (σε σχέση με τον αριθμό των κριτηρίων και των εναλλακτικών), τότε η μέθοδος που αναπτύχθηκε θα δώσει λίγα επίπεδα κατάταξης των εναλλακτικών και θα απαιτηθεί να αυξηθούν τα εξεταζόμενα σενάρια επίλυσης και να επανεξεταστούν ορισμένοι στόχοι ή παράμετροι επίλυσης, καθώς μπορεί να μην

μπορούν πολλές εναλλακτικές να ανταποκριθούν σε αυτό το επίπεδο στόχων.

Έτσι ένα πρόβλημα πολλών στόχων μετατράπηκε σε ένα πρόβλημα ενός στόχου. Ο βέλτιστος συνδυασμός των παραμέτρων της διεργασίας υπολογίζεται με χρήση της μεθόδου Taguchi (S/N ratio) και των grey relational grades.

Τέλος ο σκοπός της ανάλυσης διασποράς analysis of the variance (ANOVA) χρησιμοποιώντας τα Grey relational grade value είναι η διερεύνηση που έχουν στα ποιοτικά χαρακτηριστικά ή στους στόχους του προβλήματος βελτιστοποίησης. Έτσι ο βαθμός ελευθερίας (DF), η μέση τιμή των τετραγώνων (MS), το άθροισμα των τετραγώνων (SS), F-ratio και η συνεισφορά (C) υπολογίζονται για κάθε παράγοντα. Το υψηλότερο ποσοστό συνεισφοράς φανερώνει τον σημαντικότερο παράγοντα που επηρεάζει την συμπεριφορά των στόχων.

### 2.3.2 Μέθοδος TOPSIS (The Technique for Order Preference by Similarity to Ideal Solution)

Η μεθοδολογία TOPSIS παρουσιάστηκε πρώτη φορά από τους Hwang και Yoon (1981) για την λύση πολυκριτηριακών προβλημάτων αποφάσεων (MCDM). Η βασική ιδέα της μεθοδολογίας είναι ο ορισμός της ιδανικής (ideal) και μη ιδανικής (negative ideal ή anti-ideal) λύσης. Η ιδανική λύση είναι αυτή που μεγιστοποιεί τα ωφέλιμα κριτήρια και ελαχιστοποιεί τα κριτήρια κόστους ενώ η μη ιδανική λύση είναι ακριβώς το αντίθετο. Η εναλλακτική που θα προτιμηθεί θα είναι αυτή που θα είναι πιο κοντά στην ιδανική λύση αλλά ταυτόχρονα και πιο μακριά από την μη ιδανική λύση. Η εφαρμογή της μεθόδου είναι απλή και παράγει πάντα μια αδιαμφισβήτητη σειρά προτίμησης. Στη διαδικασία εφαρμογής της TOPSIS οι συντελεστές στάθμισης και τα κριτήρια δίνονται με απόλυτες αξίες (crisp values), αυτό όμως δεν είναι αρκετό για να μορφοποιήσουμε ένα υπόδειγμα για πολύπλοκα προβλήματα όπως αυτό της αξιολόγησης προσωπικού. Τα βήματα της μεθόδου είναι τα εξής:

1<sup>ο</sup> βήμα: Ορίζονται τα κριτήρια αξιολόγησης (evaluation criteria). Τέτοια κριτήρια επιλέγονται ανάλογα με το πρόβλημα που εξετάζεται.

2<sup>ο</sup> βήμα: Αφού έχουν οριστεί τα προηγούμενα, συγκεντρώνονται οι συντελεστές στάθμισης κριτηρίων που έχουν προκύψει είτε με εφαρμογή κάποιας μεθοδολογίας υπολογισμού συντελεστών στάθμισης είτε με βάση την εμπειρία σε παρόμοια προβλήματα που έχουν διερευνηθεί και στο παρελθόν.

3<sup>ο</sup> βήμα: Στη συνέχεια κατασκευάζεται ο πίνακας αποφάσεων (decision matrix), ο οποίος περιέχει τα αριθμητικά αποτελέσματα κάθε στόχου.

4<sup>ο</sup> βήμα: Στη συνέχεια, κανονικοποιούμε τους πίνακες απόφασης για κάθε εναλλακτική λύση. Η κανονικοποίηση γίνεται ώστε οι αριθμοί που περιέχονται στους πίνακες να ανήκουν στο διάστημα [0,1]. Τέλος, αυτούς τους πίνακες τους σταθμίζουμε με τη βοήθεια των συντελεστών στάθμισης των κριτηρίων.

$$u_{ij} = \frac{d_{ij} \times w_j}{\sqrt{\sum_i d_{ij}}} \quad (2.9)$$

5<sup>ο</sup> βήμα: Στο τελευταίο βήμα υπολογίζουμε την απόσταση κάθε υποψηφίου από την ιδανική θετική λύση A+ και την αρνητική ιδανική λύση A- και στη συνέχεια τον Συντελεστή Σύγκλισης (Closeness Coefficient, CC). Η ιεράρχηση των υποψηφίων λύσεων γίνεται από τους επικεφαλείς σύμφωνα με τις τιμές του CC και φυσικά η επιλογή του υποψηφίου με το μεγαλύτερο CC.

Δηλαδή υπολογίζεται η σχετική Ευκλείδεια απόσταση των λύσεων από μία φανταστική ιδανική λύση. Η λύση που πλησιάζει περισσότερο την ιδανική λύση και απομακρύνεται περισσότερο από την αρνητική-ιδανική λύση, επιλέγεται ως η βέλτιστη. Οι ιδανικές και οι αρνητικές-ιδανικές λύσεις είναι:

$$U^+ = \{(\max u_{ij} \mid j \in J) \text{ ή } (\min u_{ij} \mid j \in J'), i = 1, 2, \dots, m\} \\ = (u_1^+, u_2^+, \dots, u_n^+)$$

$$U^- = \{(\min u_{ij} \mid j \in J) \text{ ή } (\max u_{ij} \mid j \in J'), i = 1, 2, \dots, m\} \\ = (u_1^-, u_2^-, \dots, u_n^-)$$

όπου

$J = \{j = 1, 2, \dots, n \mid u_{ij}, \text{ μια μεγαλύτερη απόδοση είναι επιθυμητή}\}$

$J' = \{j = 1, 2, \dots, n \mid u_{ij}, \text{ μια μικρότερη απόδοση είναι επιθυμητή}\}$

Η Ευκλείδεια απόσταση μεταξύ κάθε λύσης και της ιδανικής και αρνητικής-ιδανικής λύσης ορίζεται αντίστοιχα ως:

$$S_i^+ = \sqrt{\sum_{j=1}^n (u_{ij} - u_j^+)^2} \quad (2.10)$$

$$S_i^- = \sqrt{\sum_{j=1}^n (u_{ij} - u_j^-)^2} \quad (2.11)$$

Υπολογισμός του συντελεστή σύγκλισης στην ιδανική επίλυση και κατάταξη. Ο συντελεστής σύγκλισης  $C_i$  είναι το μέγεθος που δείχνει

πόσο πλησιάζει η λύση την ιδανική λύση δίνεται από τη σχέση (Τριανταφύλλου, 1996; Nauman, 1998):

$$C_i = \frac{S_i^-}{S_i^+ + S_i^-} \quad (2.12)$$

Όπου:

- $C_i$  κυμαίνεται μεταξύ του 0 και του 1.
- Όσο τείνει το  $C_i$  προς το 1, τόσο μεγαλύτερος ο βαθμός προτεραιότητας της  $i^{\text{th}}$  εναλλακτικής.
- Η καλύτερη εναλλακτική λύση είναι αυτή που έχει την πιο κοντινή απόσταση στην ιδανική λύση και τη μεγαλύτερη απόσταση στην αρνητικά ιδανική λύση.

Η μέθοδος TOPSIS μπορεί να χρησιμοποιηθεί και σε πολλά προβλήματα, όπως της επιλογής έργου (project selection), επιλογή πρώτων υλών και σε άλλους τομείς της διοίκησης.

## 2.4. Συντελεστές βαρύτητας κριτηρίων

Ο καθορισμός των συντελεστών βαρύτητας είναι ιδιαίτερα σημαντικό μέρος της πολυκριτηριακής αξιολόγησης καθώς επηρεάζει την συνολική βαθμολογία και κατάταξη κάθε επιλογής. Οι συντελεστές βαρύτητας των κριτηρίων μπορεί να είναι αριθμητικής κλίμακας ή λόγοι με κάθε φορά διαφορετικές ερμηνείες ανάλογα την πολυκριτηριακή μέθοδο που έχει εφαρμοστεί. Έτσι οι συντελεστές βαρύτητας μπορεί να σημαίνουν (Μπουτσιούκης, 2011):

1. ποσοστιαία συμμετοχή ανά μονάδα επίδοσης κάθε επιλογής σε κάθε κριτήριο.
2. Λόγοι παραγόντων που ανάγονται σε συνολική αξία

Ο προσδιορισμός των συντελεστών βαρύτητας σε κάθε κριτήριο μπορεί να γίνει:

Με μεθόδους λήψης της υποκειμενικής γνώμης των αποφασιζόντων και απλής στάθμισης τους με αριθμητικό μέσο όρο, είτε με γεωμετρικό μέσο όρο κ.α.

Με μεθόδους επεξεργασίας της πληροφορίας που υπάρχει στις επιδόσεις των εναλλακτικών λύσεων στα διάφορα κριτήρια και συνδυασμό με την υποκειμενική γνώμη των αποφασιζόντων.

### 2.4.1. Υποκειμενικός υπολογισμός

Οι περισσότερες πολυκριτηριακές μέθοδοι λαμβάνουν τους συντελεστές βαρύτητας από την προτίμηση του κάθε αποφασίζοντα ως προς τους στόχους, τις επιδιώξεις και άλλες σχετικές εργασίες σχετικές με το πρόβλημα που αντιμετωπίζεται.

Η παραπάνω προσέγγιση όταν εφαρμόζεται αποκλειστικά εμπεριέχει ένα σημαντικό βαθμό υποκειμενικότητας που σε ορισμένες περιπτώσεις μπορεί να είναι θεμιτός καθώς επιδιώκεται η γνώμη των αποφασιζόντων.

Συγχρόνως όμως, αγνοείται η κλίμακα της επίδοσης σε κάθε κριτήριο (που σχετίζεται με τον τρόπο κανονικοποίησης των επιδόσεων) και η αξιοπιστία του αποφασίζοντα ως προς την αποτίμηση της σημασίας του κάθε κριτηρίου. Αυτές οι σημαντικές εγγενείς αδυναμίες ενισχύονται όταν υπάρχει μεγάλος αριθμός αποφασιζόντων με εντελώς διαφορετικές αντιλήψεις αποτίμησης των κριτηρίων, καθώς πολλοί από αυτούς μπορεί να αγνοούν τις δυνατότητες επίτευξης καλής επίδοσης σε ένα κριτήριο ή τις πιθανότητες μιας κακής επίδοσης σε κάποιο άλλο.

### 2.4.2. Αντικειμενικός υπολογισμός

Από τις μεθόδους που αξιολογούν τις επιδόσεις των επιλογών για τον υπολογισμό των συντελεστών βαρύτητας των κριτηρίων, χαρακτηριστική είναι η μέθοδος εντροπίας που έχει δοκιμαστεί σε μεγάλο πλήθος πολυκριτηριακών προβλημάτων (Μπουτσιούκης, 2011).

Η συγκριτική μέθοδος βασίζεται στο γεγονός ότι κάθε επίδοση είναι μια πληροφορία σχετική με το πρόβλημα. Δηλαδή αρχικά λαμβάνονται υπόψη οι επιδόσεις των εναλλακτικών και όχι οι προτιμήσεις των αποφασιζόντων.

Το περιεχόμενο της πληροφορίας εκφράζεται με το αδιάστατο μέγεθος εντροπίας (μέγεθος προερχόμενο από τη θερμοδυναμική), όπου όσο πιο μικρή τιμή λαμβάνει τόσο πιο μεγάλο όγκο πληροφορίας περιέχουν οι επιδόσεις των εναλλακτικών στο συγκεκριμένο κριτήριο. Επιπλέον από την μέθοδο κύριων συνιστωσών μπορούμε να πάρουμε πληροφορία από το σύστημα για τον υπολογισμό των βαρών των κριτηρίου του προβλήματος που μελετάται.



### 2.4.2.1. Μέθοδος Εντροπίας (Entropy Weight Method)

Κατά την μεθοδολογία αυτή από τον πίνακα αποφάσεων-επιδόσεων με  $n$  κριτήρια και  $m$  εναλλακτικές:

$$A = \begin{matrix} & w_1 & w_2 & w_3 \\ & c_1 & c_2 & c_3 \\ A_1 & [a_{11} & \dots & a_{1n}] \\ \dots & [ \dots & \dots & \dots ] \\ A_m & [a_{m1} & \dots & a_{mn}] \end{matrix} \quad (2.13)$$

όπου  $w_1 \dots w_n$  οι συντελεστές βαρύτητας των κριτηρίων  $c_1 \dots c_n$  και κανονικοποιούμε τα παραπάνω δεδομένα με βάση το τύπο:

$$X_{ij} = \frac{a_{ij}}{\sum_{i=1}^m a_{ij}}, i = 1, 2, \dots, m, j = 1, 2, \dots, n \quad (2.14)$$

Επομένως προκύπτει ο κανονικοποιημένος πίνακας επιδόσεων έχει την παρακάτω μορφή

$$R = \begin{bmatrix} X_{11} & X_{12} & \dots & X_{1n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ X_{m1} & X_{m2} & \dots & X_{mm} \end{bmatrix} \quad (2.15)$$

Στη συνέχεια υπολογίζουμε την εντροπία του δείκτη  $j$ :

$$e_j = -k \sum_{i=1}^m X_{ij} \ln X_{ij}, j=1, 2, \dots, n \quad (2.16)$$

Όπου  $k = -\frac{1}{\ln m}$

Τέλος υπολογίζουμε τα βάρη (weight) με βάση τους τύπους:

$$g_j = 1 - e_j, j = 1, 2, \dots, n \quad (2.17)$$

$$w_j = g_j / \sum_{i=1}^n g_i, j = 1, 2, \dots, n \quad (2.18)$$

(Gray, 2009).

### 2.4.2.2. Μέθοδος PCA (Principle Component Analysis)

Η μέθοδος PCA (Ανάλυση Κύριων Συνιστωσών), αποτελεί μία γραμμική μέθοδο συμπίεσης Δεδομένων η οποία συνίσταται από τον επαναπροσδιορισμό των συντεταγμένων ενός συνόλου δεδομένων σε ένα άλλο σύστημα συντεταγμένων το οποίο θα είναι καταλληλότερο στην επικείμενη ανάλυση δεδομένων. Αυτές οι νέες συντεταγμένες είναι το αποτέλεσμα ενός γραμμικού συνδυασμού προερχόμενου από τις αρχικές μεταβλητές και εκπροσωπούνται σε ορθογώνιο άξονα, ενώ τα επικείμενα σημεία διατηρούν μια φθίνουσα σειρά όσο αφορά στη τιμή της διακύμανσής τους. Για το λόγο αυτό, το πρώτο κύριο συστατικό (principal component) διατηρεί περισσότερες πληροφορίες δεδομένων σε σύγκριση με το δεύτερο το οποίο δεν διατηρεί πληροφορίες οι οποίες έχουν εισέλθει νωρίτερα (στο πρώτο συστατικό). Τα principal components δεν συσχετίζονται.

Η συνολική ποσότητα των κύριων συνιστωσών (principal components) είναι ίση με τη ποσότητα των αρχικών μεταβλητών και παρουσιάζει τις ίδιες πληροφορίες στατιστικής. Εντούτοις, η συγκεκριμένη μέθοδος επιτρέπει την μείωση του συνόλου των μεταβλητών, καθώς τα πρώτα συστατικά (principal components) διατηρούν περισσότερο από το 90% των στατιστικών δεδομένων από τα αρχικά δεδομένα. Λόγω αυτών των σημαντικών πλεονεκτημάτων, η μέθοδος αυτή είναι ευρέως διαδεδομένη στην συμπίεση εικόνας.

Η ανάλυση κύριων συνιστωσών αποτελεί την απλούστερη και πλέον διαδεδομένη ανάλυση πολλών μεταβλητών και στοχεύει στην ανεύρεση από ένα πλήθος  $p$  μεταβλητών ορισμένων νέων ολιγάριθμων μεταβλητών οι οποίες έχουν την ιδιότητα να είναι γραμμικοί συνδυασμοί των αρχικών μεταβλητών και παράλληλα να μη συσχετίζονται μεταξύ τους. Το μεγάλο πλεονέκτημά τους έγκειται στην ιδιαιτερότητα που διαθέτουν, λόγω της ανάλυσης, να εξηγούν πολύ μεγάλο ποσοστό της ολικής μεταβλητότητας που αναπτύσσεται μεταξύ των  $p$  μεταβλητών, το οποίο τελικά κατανέμεται σε μερικές μόνο νέες μεταβλητές. Έτσι, το μέγιστο μέρος της πληροφόρησης που θα αντλούνταν αν λαμβάνονταν υπόψη οι  $p$  μεταβλητές συγκρατείται με τη δημιουργία αυτών των νέων μεταβλητών.

Η διαδικασία της ανάλυσης βασίζεται στην ακόλουθη αρχή:

1. Από τις  $p$  μεταβλητές  $X_1, X_2, \dots, X_p$ , δημιουργούνται  $p$  συνδυασμοί αυτών  $Z_1, Z_2, \dots, Z_p$ , με τέτοιο τρόπο ώστε να μη συσχετίζονται μεταξύ τους. Η απουσία συσχετισμού μεταξύ των μεταβλητών  $Z_i$  προδιαθέτει ότι αυτές μετρούν διαφορετικές «διαστάσεις» των στοιχείων.
2. Οι διακυμάνσεις (μεταβλητότητα) που αναπτύσσονται μεταξύ των μεταβλητών  $Z_i$ , διαβαθμίζονται με τέτοιο τρόπο ώστε η πρώτη μεταβλητή  $Z_1$  επιλέγεται να εξηγεί ένα όσο το δυνατόν μέγιστο ποσοστό της ολικής μεταβλητότητας, η  $Z_2$  ένα δεύτερο μέγιστο ποσοστό αυτής κοκ., υπακούοντας στη σχέση:  $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_p$ , όπου  $\lambda_i$  η  $i$  ποσότητα της διακύμανσης. Οι νέες μεταβλητές  $Z_i$  καλούνται κύριες συνιστώσες και με τον τρόπο αυτόν δημιουργούνται ολιγάριθμες  $Z$  συνιστώσες, οι οποίες, ωστόσο, εξηγούν μεγάλο ποσοστό της συνολικής διακύμανσης Σλ<sub>ι</sub>. Ταυτόχρονα, πολυάριθμες δευτερεύουσες συνιστώσες εξηγούν μικρό έως ελάχιστο ποσοστό και συνεπώς το στατιστικό τους αποτέλεσμα μπορεί να αγνοηθεί χωρίς την απώλεια ουσιαστικής πληροφόρησης.

Η τεχνική των κύριων συνιστωσών έχει ως βάση, κατά τη διαδικασία υπολογισμού της, τη μήτρα των κατά ζεύγη συσχετίσεων (correlation matrix) των μεταβλητών. Κατά συνέπεια, για να θεωρείται η τεχνική επιτυχημένη, να παρέχει δηλαδή ουσιώδη πληροφόρηση, απαραίτητη προϋπόθεση είναι κάποιοι συντελεστές συσχέτισης των αρχικών μεταβλητών της μήτρας συσχετίσεων να φέρουν υψηλές τιμές θετικές ή αρνητικές (π.χ.  $r \geq \pm 0,700$ ). Έτσι, είναι δυνατό ένα σύνολο 20 έως 30 μεταβλητών να είναι σε θέση να αντιπροσωπευτεί από δύο έως τρεις κύριες συνιστώσες, αρκεί να καλύπτεται η προϋπόθεση της παρουσίας υψηλών συντελεστών στη μήτρα των συσχετίσεων.

Από την άλλη πλευρά, αρχικές μεταβλητές με πολύ ισχυρές τιμές συσχετίσεων  $> \pm 0,990$  θεωρούνται πλεονάζουσες και κάποιες από αυτές θα πρέπει να απορρίπτονται πριν από την εφαρμογή της μεθόδου.

Η ανάλυση προλογίζει τη θεώρηση  $p$  μεταβλητών  $n$  δειγμάτων (ατομικών παρατηρήσεων), αφού προηγουμένως οι μεταβλητές μετασχηματιστούν σε τυποποιημένες, σύμφωνα με τη σχέση:

$$(X_i - \bar{X})/s \quad (2.19)$$

Η πρώτη κύρια συνιστώσα προκύπτει από το γραμμικό συνδυασμό  $p$  μεταβλητών,

$$Z_1 = a_{11}X_1 + a_{12}X_2 + \dots + a_{1p}X_p \quad (2.20)$$

όπου  $a_{ij}$  ειδικός συντελεστής στάθμισης (weight) της  $j$  μεταβλητής στην  $i$  συνιστώσα και με τον περιορισμό ότι

$$a_{11}^2 + a_{12}^2 + \dots + a_{1p}^2 = 1 \quad (2.21)$$

Με την παραπάνω διαδικασία δημιουργούνται  $p$  συνιστώσες  $Z_i$  όσες δηλαδή και οι αρχικές μεταβλητές. Οι συντελεστές στάθμισης  $a_{ij}$  υπολογίζονται με τη βοήθεια της μήτρας  $C$  των συνδιακυμάνσεων των αρχικών μεταβλητών,

$$C = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \dots & c_{1p} \\ c_{21} & c_{22} & \dots & c_{2p} \\ c_{p1} & c_{p2} & \dots & c_{pp} \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

όπου τα διαγώνια στοιχεία  $c_{ii}$  είναι οι διακυμάνσεις της  $X_i$  και  $c_{ij}$  οι συνδιακυμάνσεις των μεταβλητών  $X_i$  και  $X_j$ .

Με την τυποποίηση των αρχικών μεταβλητών η μήτρα των συνδιακυμάνσεων μεταπίπτει στη μήτρα των συσχετίσεων ως

$$C = \begin{pmatrix} 1 & c_{12} & \dots & c_{1p} \\ c_{21} & 1 & \dots & c_{2p} \\ c_{p1} & c_{p2} & \dots & 1 \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

και έτσι προκύπτει  $c_{ii}=1$ , ενώ  $c_{ij}=c_{ji}$  είναι ο συντελεστής συσχέτισης μεταξύ των  $X_i$  και  $X_j$ . Ουσιαστικά, η ανάλυση των κύριων συνιστωσών εκτελείται με βάση τη μήτρα των συσχετίσεων.

Οι διακυμάνσεις των κύριων συνιστωσών καλούνται χαρακτηριστικές ρίζες ή ιδιοτιμές  $\lambda_i$  (eigenvalues) και αριθμούν όσες και οι συνιστώσες  $p$ , επιπροσθέτως δε ισχύει γι' αυτές  $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_p$  (όλες  $> 0$ ). Σημαντική ιδιότητα των χαρακτηριστικών ριζών είναι ότι το άθροισμά τους ισοδυναμεί με το άθροισμα των διακυμάνσεων των αρχικών μεταβλητών:  $\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_p = c_{11} + c_{22} + \dots + c_{pp}$ .

Αφού  $c_{ii}$  είναι η διακύμανση της  $X_i$  και  $\lambda_i$  η διακύμανση της  $Z_i$ , εύκολα συνάγεται με βάση τους παραπάνω υπολογισμούς ότι οι κύριες συνιστώσες εξηγούν πλήρως όλη τη μεταβλητότητα των αρχικών δεδομένων.

Συνοψίζοντας, τα στάδια της ανάλυσης των κύριων συνιστωσών έχουν ως εξής:

1. Τυποποίηση των αρχικών μεταβλητών  $X_1, X_2, \dots, X_p$ , έτσι ώστε να έχουν μέσο όρο μηδέν και διακύμανση ίση με 1.
2. Υπολογισμός της μήτρας των συνδιακυμάνσεων, η οποία πλέον έχει την έννοια της μήτρας των συσχετίσεων.
3. Εκτίμηση των χαρακτηριστικών ριζών  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$ , και των συντελεστών στάθμισης  $a_{ij}$  ή καλύτερα των διανυσμάτων  $a_1, a_2, \dots, a_p$ . Οι συντελεστές της  $i$  κύριας συνιστώσας εμφανίζονται με το διάνυσμα  $a_i$  και η διακύμανση αυτής με τη χαρακτηριστική ρίζα  $\lambda_i$ .
4. Απορρίπτονται όλες οι συνιστώσες που εξηγούν μικρό ποσοστό της ολικής μεταβλητότητας και επιλέγονται μόνον οι πλέον σημαντικές. Για παράδειγμα, εκκινώντας με 20 αρχικές μεταβλητές είναι δυνατόν μέσω της ανάλυσης να εντοπιστούν οι 3 πρώτες κύριες συνιστώσες ότι εξηγούν το 90% της ολικής μεταβλητότητας και κατά συνεπώς να αγνοηθούν οι υπόλοιπες 17, αφού το αποτέλεσμα της δράσης αυτών συγκεντρώνεται στο 10% και συνεπώς σχεδόν ασήμαντο.

Η μέθοδος PCA δίνει περισσότερο **βάρος** στις μεταβλητές με μεγαλύτερη διακύμανση. Έτσι τα βάρη που θα χρησιμοποιηθούν σε μεθόδους GRC ή TOPSIS χρησιμοποιούνται ως η διακύμανση – ιδιοτιμή της κάθε μεταβλητής (Jolliffe I.T., 2002).



## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: ΑΝΑΛΥΣΗ ΤΗΣ ΔΙΑΚΥΜΑΝΣΗΣ (ANOVA)

### 3.1 Εισαγωγή στην ανάλυση διακύμανσης (ANOVA)

Η ανάλυση της διακύμανσης (ANalysis Of Variance – ANOVA) είναι μία στατιστική μέθοδος με την οποία η μεταβλητότητα που υπάρχει σ' ένα σύνολο δεδομένων διασπάται στις επιμέρους συνιστώσες της με στόχο την κατανόηση της σημαντικότητας των διαφορετικών πηγών προέλευσής της (Turner J. Rick and Thayer F. Julian, 2001). Η ανάπτυξη της μεθοδολογίας οφείλεται στον θεμελιωτή της σύγχρονης στατιστικής επιστήμης, άγγλο στατιστικό Sir Ronald Aylmer Fisher (1890-1962). Στην πραγματικότητα η ANOVA περιλαμβάνει μία ομάδα στατιστικών μεθόδων καταλλήλων για την ανάλυση δεδομένων που προκύπτουν από πειραματικούς σχεδιασμούς.

Τα δεδομένα ενός δείγματος ανάλογα με την προέλευσή τους διακρίνονται σε παρατηρήσεις (observational sampling) η σε πειραματικά (designed sampling). Στην πρώτη κατηγορία ο στατιστικός ερευνητής απλά παρατηρεί τις τιμές που εμφανίζονται χωρίς να έχει δυνατότητα επέμβασης στις αντίστοιχες μεταβλητές. Αντίθετα στη δεύτερη κατηγορία ο στατιστικός ερευνητής προσπαθεί να ελέγξει τα επίπεδα μιας η περισσότερων ανεξάρτητων (independent) μεταβλητών προκειμένου να προσδιορίσει την επίδραση που έχουν πάνω στην υπό μελέτη μεταβλητή που καλείται εξαρτημένη (dependent) η απόκριση (response). Για παράδειγμα, απόκριση μπορεί να είναι η βαθμολογία στην εξέταση του μαθήματος της στατιστικής, ο όγκος των πωλήσεων μιας επιχείρησης η το συνολικό εισόδημα μιας οικογένειας κατά τη διάρκεια του έτους.

Στόχος κάθε στατιστικού πειράματος είναι ο προσδιορισμός της επίδρασης μίας η περισσότερων ανεξάρτητων μεταβλητών πάνω στην απόκριση. Οι μεταβλητές αυτές αναφέρονται συνήθως σαν παράγοντες (factors) και μπορεί να είναι είτε ποσοτικές είτε ποιοτικές. Για παράδειγμα θα ήταν ενδιαφέρον να διερευνήσουμε την επίδραση που

έχει ο ποιοτικός παράγων “φύλο” στη βαθμολογία της στατιστικής η ο ποσοτικός παράγων “πλήθος καταστημάτων πώλησης” στον όγκο των πωλήσεων. Σε άλλες πάλι περιπτώσεις ενδεχομένως να ενδιαφερόμαστε για την επίδραση που έχουν πάνω στην απόκριση περισσότερες της μίας ανεξάρτητες μεταβλητές όπως ο ποσοτικός παράγων “πλήθος εργαζομένων” και ο ποιοτικός παράγων “πόλη διαμονής” πάνω στο οικογενειακό εισόδημα.

Οι τιμές του παράγοντα που προσδιορίζονται στο πείραμα λέγονται επίπεδα (levels). Σε ένα πείραμα με ένα παράγοντα οι μεταχειρίσεις (treatments) του πειράματος είναι τα επίπεδα του παράγοντα. Σε ένα πείραμα με δύο ή περισσότερους παράγοντες οι μεταχειρίσεις είναι οι συνδυασμοί παραγόντων-επιπέδων. (Γεροντίδης, 2009; Τσαούλη Α., 2010).



### 3.2 Ανάλυση της διακύμανσης κατά ένα παράγοντα

Στην απλούστερη μορφή της η ANOVA μας δίνει τη δυνατότητα να δοκιμάσουμε την υπόθεση ότι οι μέσες τιμές διαφόρων πληθυσμών είναι ίσες. Κάτω από το πλαίσιο αυτό μπορούμε να θεωρήσουμε την ANOVA σαν προέκταση της δοκιμασίας  $t$  για την σύγκριση των μέσων τιμών δύο πληθυσμών. Υπάρχουν όμως δύο λόγοι για τους οποίους χρησιμοποιούμε την ANOVA έναντι της δοκιμασίας  $t$ . Ο ένας είναι η συντομότερη διαδικασία ανάλυσης και ο δεύτερος (και πιο σημαντικός) η ακρίβεια της διάγνωσης.

Από τους υπάρχοντες πειραματικούς σχεδιασμούς ο απλούστερος είναι εκείνος που χαρακτηρίζεται από την ανάλυση της διακύμανσης κατά ένα παράγοντα (one factor ANOVA) και καλείται πλήρως τυχαιοποιημένος σχεδιασμός (completely randomized design).

Η ανάπτυξη της ανάλυσης διασποράς θα γίνει μέσω της παρουσίασης χρήσης των βασικών βημάτων που ακολουθούνται.

#### 3.2.1. Προσδιορισμός του μοντέλου

Στη γενική περίπτωση υποθέτουμε ότι έχουμε  $k$  ομάδες με  $n_j$  παρατηρήσεις ανά ομάδα για  $j=1, \dots, k$ . Τα δεδομένα του δείγματος μπορούν να ταξινομηθούν σε ένα πίνακα της μορφής:

Πίνακας 3.1: Διάταξη παρατηρήσεων του πλήρως τυχαιοποιημένου σχεδιασμού

	1	2	3	...	$k$	
	$X_{11}$	$X_{12}$	$X_{13}$	...	$X_{1k}$	
	$X_{21}$	$X_{22}$	$X_{23}$	...	$X_{2k}$	
	$X_{31}$	$X_{32}$	$X_{33}$	...	$X_{3k}$	
	.	.	.	...	.	
	.	.	.	...	.	
	.	.	.	...	.	
	$X_{n_1 1}$	$X_{n_2 2}$	$X_{n_3 3}$	...	$X_{n_k k}$	
Σύνολα	$T_{\square 1}$	$T_{\square 2}$	$T_{\square 3}$	...	$T_{\square k}$	$T_{\square}$
Μέσοι όροι	$\bar{X}_{\square 1}$	$\bar{X}_{\square 2}$	$\bar{X}_{\square 3}$		$\bar{X}_{\square k}$	$\bar{X}_{\square}$

όπου

- $X_{ij}$  είναι η  $i$  παρατήρηση της  $j$  ομάδας
- $T_{ij} = \sum_{i=1}^{n_j} X_{ij}$  = άθροισμα των παρατηρήσεων της  $j$  στήλης
- $\bar{X}_{ij} = \frac{T_{ij}}{n_j}$  = αριθμητικός μέσος της  $j$  στήλης
- $T_{.j} = \sum_{j=1}^k T_{ij} = \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^{n_j} X_{ij}$  = άθροισμα όλων των παρατηρήσεων
- $\bar{X}_{.j} = \frac{T_{.j}}{N} = \frac{\sum_{i=1}^{n_j} X_{ij}}{\sum_{j=1}^k n_j}$  = αριθμητικός μέσος όλων των παρατηρήσεων και  $N = \sum_{j=1}^k n_j$ .

Υποθέτουμε ότι για την  $j$  ομάδα οι παρατηρήσεις  $X_{ij}$  έχουν την μορφή

$$X_{ij} = \mu_j + e_{ij} \quad (3.1)$$

όπου  $\mu_j$  είναι ο μέσος όρος του πληθυσμού της  $j$  ομάδας και  $e_{ij}$  είναι το σφάλμα (error), για  $i=1, \dots, n_j$  και  $j=1, \dots, k$ . Με τον όρο σφάλμα δεν εννοούμε κάποια λανθασμένη μέτρηση ή εκτίμηση αλλά τη μη ελεγχόμενη διακύμανση που υπάρχει στον πληθυσμό. Λύνοντας την (3.1) ως προς  $e_{ij}$  έχουμε

$$e_{ij} = X_{ij} - \mu_j \quad (3.2)$$

Ο καθολικός μέσος όρος (grand mean)  $\mu$  όλων των παρατηρήσεων είναι

$$\mu = \frac{1}{k} = \sum_{j=1}^k \mu_j \quad (3.3)$$

Με την ίδια λογική που το  $X_{ij}$  διαφέρει από το  $\mu_j$  μπορούμε να υποθέσουμε ότι το  $\mu_j$  διαφέρει από το  $\mu$  κατά ένα ποσό

$$\tau_j = \mu_j - \mu \quad (3.4)$$

που εκφράζει την επίδραση (effect) του γεγονότος ότι το  $\mu_j$  υπολογίστηκε από τις παρατηρήσεις της  $j$  ομάδας. Από τη σχέση (3.4) έχουμε ότι

$$\mu_j = \mu + \tau_j \quad (3.5)$$

Συνδυάζοντας την (3.1) με την (3.5) παίρνουμε την τελική έκφραση

$$X_{ij} = \mu + \tau_j + e_{ij} \quad (3.6)$$

για  $i=1, \dots, n_j$  και  $j=1, \dots, k$ . Συνοψίζοντας από την (3.6) προκύπτει ότι η παρατήρηση  $X_{ij}$  είναι άθροισμα τριών ποσοτήτων, του καθολικού μέσου, της επίδρασης της ομάδας (μεταχείρισης) και του σφάλματος. Για το λόγο αυτό το μοντέλο (3.6) λέγεται προσθετικό (additive) (Γεροντίδης, 2009; Τσαούλη Α., 2010).

### 3.2.2. Υποθέσεις του μοντέλου

Οι υποθέσεις που διέπουν το μοντέλο (3.6) είναι:

1. Οι παρατηρήσεις  $X_{ij}$  κάθε ομάδας αποτελούν  $k$  ανεξάρτητα δείγματα από αντίστοιχους πληθυσμούς.
2. Καθένας από τους  $k$  πληθυσμούς ακολουθεί την κανονική κατανομή με μέση τιμή  $\mu_j$  και κοινή διακύμανση  $\sigma^2$ , για  $j=1, \dots, k$ .

3. Οι επιδράσεις των ομάδων (μεταχειρίσεων)  $\tau_j$  είναι σταθεροί αριθμοί που ικανοποιούν τη σχέση

$$\sum_{j=1}^k \tau_j = 0 \quad (3.6)$$

Από τη σχέση (3.2) και τις υποθέσεις 1-3 προκύπτει ότι τα σφάλματα  $e_{ij}$  είναι ανεξάρτητες τυχαίες μεταβλητές από την κανονική κατανομή με μέση τιμή 0 και διακύμανση  $\sigma^2$ .

### 3.2.3. Δοκιμασία υποθέσεων

Μπορούμε τώρα να δοκιμάσουμε την μηδενική υπόθεση ότι όλες οι ομάδες (μεταχειρίσεις) έχουν ίσες μέσες τιμές

$$H_0 : \mu_1 = \mu_2 = \dots = \mu_k$$

με εναλλακτική

$$H_1 : \text{όλα τα } \mu_j \text{ δεν είναι ίσα}$$

Όταν οι μέσες τιμές των πληθυσμών είναι ίσες, τότε οι επιδράσεις  $\tau_j$  των μεταχειρίσεων είναι μηδέν. Κατά συνέπεια οι ισοδύναμες υποθέσεις που μπορούμε να δοκιμάσουμε είναι

$$H_0 : \tau_j = 0, j = 1, \dots, k$$

με εναλλακτική

$$H_1 : \text{όλα τα } \tau_j \text{ δεν είναι μηδέν}$$

Στο παράδειγμα 1 θα δοκιμάσουμε τις υποθέσεις

$$H_0 : \mu_1 = \mu_2 = \mu_3$$

με εναλλακτική

$$H_1 : \text{όλα τα } \mu_j \text{ δεν είναι ίσα.}$$

(Γεροντίδης, 2009; Τσαούλη Α., 2010).

### 3.2.4. Υπολογισμός των αθροισμάτων των τετραγώνων

Στην αρχή του κεφαλαίου ορίσαμε την ANOVA σαν μία διαδικασία κατά την οποία η ολική μεταβλητότητα που υπάρχει στα δεδομένα διασπάται σε επιμέρους συνιστώσες που οφείλονται σε διαφορετικές πηγές προέλευσης. Ο όρος μεταβλητότητα αναφέρεται στο άθροισμα των τετραγώνων των αποκλίσεων των παρατηρήσεων από την μέση τιμή τους που για συντομία καλείται άθροισμα τετραγώνων (Sum of Squares –  $SS$ ).

Αρχικά υπολογίζουμε το ολικό άθροισμα τετραγώνων (total sum of squares -  $SS_{\text{total}}$ ) των αποκλίσεων των παρατηρήσεων από τον καθολικό μέσο

$$SS_{\text{total}} = \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^{n_j} (X_{ij} - \bar{X}_{\square})^2 \quad (3.7)$$

όπου με το  $\sum_{i=1}^{n_j}$  αθροίζουμε τις τετραγωνισμένες αποκλίσεις μέσα σε κάθε ομάδα, ενώ με το  $\sum_{j=1}^k$  αθροίζουμε τα αποτελέσματα των  $k$  ομάδων. Στην πραγματικότητα το  $SS_{\text{total}}$  αντιστοιχεί στον αριθμητή που υπάρχει στον τύπο υπολογισμού της δειγματικής διακύμανσης

$$s^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2}{N-1} \quad (3.8)$$

ενός τυχαίου δείγματος με  $N$  παρατηρήσεις.

Στη συνέχεια θα διασπάσουμε το  $SS_{\text{total}}$  στις επιμέρους συνιστώσες του, χρησιμοποιώντας την ισοδύναμη έκφραση

$$\begin{aligned} SS_{\text{total}} &= \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^{n_j} [(X_{ij} - \bar{X}_{\square j}) + (\bar{X}_{\square j} - \bar{X}_{\square})]^2 \\ &= \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^{n_j} (X_{ij} - \bar{X}_{\square j})^2 + 2 \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^{n_j} (X_{ij} - \bar{X}_{\square j})(\bar{X}_{\square j} - \bar{X}_{\square}) + \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^{n_j} (\bar{X}_{\square j} - \bar{X}_{\square})^2 \end{aligned} \quad (3.8)$$

Ο μεσαίος όρος της (3.8) γράφεται

$$2 \sum_{i=1}^{n_j} (X_{ij} - \bar{X}_{\square j}) \sum_{j=1}^k (\bar{X}_{\square j} - \bar{X}_{\square})$$

απ' όπου προκύπτει ότι είναι ίσος με μηδέν διότι

$$\sum_{i=1}^{n_j} (X_{ij} - \bar{X}_{\square j}) = 0$$

Τελικά η (3.8) γίνεται

$$SS_{\text{total}} = \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^{n_j} (X_{ij} - \bar{X}_{\square j})^2 + \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^{n_j} (\bar{X}_{\square j} - \bar{X}_{\square})^2$$

η ισοδύναμα

$$SS_{\text{total}} = \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^{n_j} (X_{ij} - \bar{X}_{\square j})^2 + \sum_{j=1}^k n_j (\bar{X}_{\square j} - \bar{X}_{\square})^2 \quad (3.9)$$

Στην περίπτωση που το πλήθος των παρατηρήσεων είναι το ίδιο με  $n$  για όλες τις ομάδες (όπως στο παράδειγμα 1) η (3.9) γίνεται

$$SS_{\text{total}} = \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^{n_j} (X_{ij} - \bar{X}_{\square j})^2 + n \sum_{j=1}^k (\bar{X}_{\square j} - \bar{X}_{\square})^2 \quad (3.10)$$

**Το άθροισμα των τετραγώνων μέσα στις ομάδες**

Το πρώτο άθροισμα στο δεξιό μέρος της εξίσωσης (3.9) υπολογίζει αρχικά το άθροισμα των τετραγωνισμένων αποκλίσεων των παρατηρήσεων από τον μέσο κάθε ομάδας και κατόπιν αθροίζει τα επιμέρους αποτελέσματα για όλες τις ομάδες. Το τελικό αποτέλεσμα λέγεται άθροισμα τετραγώνων μέσα στις ομάδες (within groups sum of squares -  $SS_{\text{within}}$  )

$$SS_{\text{within}} = \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^{n_j} (X_{ij} - \bar{X}_{\square j})^2 \quad (3.10)$$

**Το άθροισμα των τετραγώνων μεταξύ των ομάδων**

Το δεύτερο άθροισμα στο δεξιό πλευρό της (3.9) υπολογίζει αρχικά για κάθε ομάδα την τετραγωνισμένη απόκλιση του μέσου της ομάδας από τον καθολικό μέσο και κατόπιν πολλαπλασιάζει το αποτέλεσμα με το πλήθος των παρατηρήσεων της ομάδας. Τα επιμέρους αποτελέσματα αθροίζονται για όλες τις ομάδες και το τελικό αποτέλεσμα λέγεται άθροισμα τετραγώνων μεταξύ ομάδων (between groups sum of squares -  $SS_{\text{between}}$  )

$$SS_{\text{between}} = \sum_{j=1}^k n_j (\bar{X}_{\square j} - \bar{X}_{\square})^2$$

και στην περίπτωση που όλες οι ομάδες έχουν  $n$  παρατηρήσεις προκύπτει

$$SS_{\text{between}} = n \sum_{j=1}^k (\bar{X}_{\square j} - \bar{X}_{\square})^2 \quad (3.11)$$

Συνοψίζοντας τα αριθμητικά αποτελέσματα παίρνουμε ότι

$$SS_{\text{total}} = SS_{\text{within}} + SS_{\text{between}} \quad (3.12)$$

(Γερωντίδης, 2009; Τσαούλη Α., 2010).

### 3.2.5. Πίνακας ανάλυσης της διακύμανσης

Από τα αθροίσματα των τετραγώνων που υπολογίσαμε μπορούμε τώρα να πάρουμε δύο εκτιμητές της πληθυσμιακής διακύμανσης  $\sigma^2$ . Αποδεικνύεται ότι όταν οι πληθυσμιακές μέσες τιμές των ομάδων είναι ίσες, τότε τα  $SS_{\text{within}}$  και  $SS_{\text{between}}$  όταν διαιρεθούν με τους αντίστοιχους βαθμούς ελευθερίας δίνουν αμερόληπτους εκτιμητές για το  $\sigma^2$ .

#### Ο πρώτος εκτιμητής του $\sigma^2$

Μέσα σε κάθε ομάδα το μέσο τετράγωνο (mean square)

$$MS_j = \frac{\sum_{i=1}^{n_j} (X_{ij} - \bar{X}_{\square j})^2}{n_j - 1} \quad (3.13)$$

δίνει ένα αμερόληπτο εκτιμητή για την διακύμανση της ομάδας. Κάτω από την υπόθεση ότι οι διακυμάνσεις είναι ίσες μπορούμε να συγχωνεύσουμε τους  $k$  εκτιμητές και να πάρουμε ένα εκτιμητή για την διακύμανση μέσα στις ομάδες (within groups variance) σύμφωνα με τον τύπο του μέσου τετραγώνου

$$MS_{\text{within}} = \frac{\sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^{n_j} (X_{ij} - \bar{X}_{\square j})^2}{\sum_{j=1}^k (n_j - 1)} \quad (3.14)$$

#### Ο δεύτερος εκτιμητής του $\sigma^2$

Ο δεύτερος εκτιμητής του  $\sigma^2$  προκύπτει από τον γνωστό τύπο για την διακύμανση του δειγματικού μέσου ενός δείγματος με  $n$  παρατηρήσεις :

$$\sigma_{\bar{X}}^2 = \frac{\sigma^2}{n} \quad (3.15)$$

απ' όπου παίρνουμε



$$\sigma^2 = n\sigma_{\bar{X}}^2 \quad (3.16)$$

Ένας αμερόληπτος εκτιμητής του  $\sigma_{\bar{X}}^2$  που είναι η διακύμανση μεταξύ των ομάδων (between groups variance) προκύπτει από το μέσο τετράγωνο

$$MS_{\bar{X}} = \frac{\sum_{j=1}^k (\bar{X}_{\cdot j} - \bar{X}_{\cdot})^2}{k-1}$$

συνεπώς στην ειδική περίπτωση που όλες οι ομάδες (μεταχειρίσεις) έχουν  $n$  παρατηρήσεις ένας αμερόληπτος εκτιμητής για το  $\sigma^2$  είναι

$$MS_{\text{between}} = \frac{n \sum_{j=1}^k (\bar{X}_{\cdot j} - \bar{X}_{\cdot})^2}{k-1} \quad (3.18)$$

Στη γενική περίπτωση που το πλήθος των παρατηρήσεων των ομάδων δεν είναι ίδιο ο αμερόληπτος εκτιμητής για το  $\sigma^2$  έχει τη μορφή

$$MS_{\text{between}} = \frac{\sum_{j=1}^k n_j (\bar{X}_{\cdot j} - \bar{X}_{\cdot})^2}{k-1} \quad (3.19)$$

### Ο λόγος των διακυμάνσεων

Όταν η μηδενική υπόθεση  $H_0 : \mu_1 = \mu_2 = \dots = \mu_k$  είναι αληθινή, τότε αναμένεται οι δύο εκτιμητές του  $\sigma^2$  να είναι περίπου ίσοι. Όταν η μηδενική υπόθεση δεν ισχύει, έτσι ώστε οι μέσες τιμές των πληθυσμών να διαφέρουν, τότε αναμένεται το  $MS_{\text{between}}$  να είναι μεγαλύτερο από το  $MS_{\text{within}}$ . Για το λόγο αυτό και προκειμένου να συγκρίνουμε τους δύο εκτιμητές του  $\sigma^2$  υπολογίζουμε το λόγο των διακυμάνσεων (Variance Ratio - VR)

$$VR = \frac{MS_{\text{between}}}{MS_{\text{within}}} \quad (3.20)$$

Όταν οι δύο εκτιμητές είναι περίπου ίσοι το  $VR$  είναι κοντά στο 1 και το γεγονός αυτό αποτελεί κριτήριο αποδοχής της  $H_0$ . Στην περίπτωση που το  $MS_{\text{between}}$  είναι μεγαλύτερο από το  $MS_{\text{within}}$  τότε το  $VR$  είναι μεγαλύτερο από το 1 και το γεγονός αυτό είναι το κριτήριο απόρριψης της  $H_0$ .

### Η δοκιμασία F

Είναι γνωστό ότι η ύπαρξη του τυχαίου σφάλματος που οφείλεται στη δειγματοληψία δεν επιτρέπει στα  $MS_{\text{between}}$  και  $MS_{\text{within}}$  να είναι ίσα ακόμη και στην περίπτωση που η μηδενική υπόθεση  $H_0 : \mu_1 = \mu_2 = \dots = \mu_k$  είναι αληθινή. Για το λόγο αυτό θα πρέπει να έχουμε ένα μέτρο ανοχής για το πόσο μεγάλη θα πρέπει να είναι η παρατηρούμενη διαφορά προκειμένου να συμπεράνουμε ότι δεν οφείλεται μόνο σε τυχαίο σφάλμα. Απάντηση στο ερώτημα αυτό μας δίνει η κατανομή δειγματοληψίας του λόγου των διακυμάνσεων

$$VR = \frac{MS_{\text{between}}}{MS_{\text{within}}} \quad (3.22)$$

Επειδή το  $VR$  είναι λόγος δύο  $\chi^2$  τυχαίων μεταβλητών από την παράγραφο 2 προκύπτει ότι ακολουθεί την κατανομή  $F$  με βαθμούς ελευθερίας αριθμητή  $(k-1)$  και βαθμούς ελευθερίας παρονομαστή

$$\sum_{j=1}^k (n_j - 1) = \sum_{j=1}^k n_j - k = N - k \quad (3.23)$$

Από τη στιγμή που θα προσδιορίσουμε και το επίπεδο σημαντικότητας  $\alpha$  τότε η κρίσιμη τιμή του  $F$  προσδιορίζει τις περιοχές αποδοχής και απόρριψης της δοκιμασίας. Οι απαιτούμενοι υπολογισμοί συνοψίζονται στον παρακάτω πίνακα ANOVA.

Πίνακας 3.2: Πίνακας ANOVA για τον πλήρως τυχαιοποιημένο σχεδιασμό (κατά ένα παράγοντα)

Πηγή προέλευσης	Άθροισμα τετραγώνων	Βαθμοί ελευθερίας	Μέσο τετράγωνο	Λόγος διακυμάνσεως
Μεταξύ ομάδων	$SS_{\text{between}} = \sum_{j=1}^k n_j (\bar{X}_{\square j} - \bar{X}_{\square})^2$	$k-1$	$MS_{\text{between}} = \frac{\sum_{j=1}^k n_j (\bar{X}_{\square j} - \bar{X}_{\square})^2}{k-1}$	$VR = \frac{MS_{\text{between}}}{MS_{\text{within}}}$
Μέσα στις ομάδες	$SS_{\text{within}} = \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^{n_j} (X_{ij} - \bar{X}_{\square j})^2$	$N-k$	$MS_{\text{within}} = \frac{\sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^{n_j} (X_{ij} - \bar{X}_{\square j})^2}{\sum_{j=1}^k (n_j - 1)}$	

### Η απόφαση

Κάτω από τη μηδενική υπόθεση  $H_0 : \mu_1 = \mu_2 = \dots = \mu_k$  το  $VR$  ακολουθεί την κατανομή  $F$  με βαθμούς ελευθερίας αριθμητή  $(k-1)$  και βαθμούς ελευθερίας παρονομαστή  $(N-k)$ . Για συγκεκριμένο επίπεδο σημαντικότητας  $\alpha$  και προκειμένου να πάρουμε μία απόφαση συγκρίνουμε την υπολογισμένη τιμή  $VR$  με την κρίσιμη τιμή της κατανομής  $F_{(k-1), (N-k), \alpha}$ . Όταν

$$VR > F_{(k-1), (N-k), \alpha} \quad (3.24)$$

δεν μπορούμε να αποδεχθούμε την  $H_0$  με βάση τα δεδομένα του δείγματος, όπου  $F_{(k-1), (N-k), \alpha}$  είναι το  $(1-\alpha)100$  εκατοστιαίο σημείο της κατανομής  $F_{(k-1), (N-k)}$  για το οποίο ισχύει

$$P(F_{(k-1), (N-k)} > F_{(k-1), (N-k), \alpha}) = \alpha \quad (3.25)$$

Η διακύμανση που υπάρχει στα δεδομένα μεταξύ των ομάδων (στηλών) ερμηνεύεται (explained) από το γεγονός ότι οι ομάδες ενδεχομένως να προέρχονται από διαφορετικούς πληθυσμούς. Η διακύμανση μέσα στις ομάδες είναι η εναπομένουσα διακύμανση (residual variance) που μένει ανερμήνευτη (unexplained). Συνεπώς

$$VR = \frac{\text{ερμηνευμένη διακύμανση}}{\text{ανερμήνευτη διακύμανση}} \quad (3.26)$$

Το γεγονός αυτό μας παροτρύνει να αναπτύξουμε διαδικασίες προκειμένου να ενδυναμώσουμε τη δοκιμασία  $F$ . Αν για παράδειγμα ένα σημαντικό ποσοστό της ανερμήνευτης διακύμανσης οφείλεται σε υπάρχουσες διαφορές στις γραμμές, τότε απομονώνοντας την διακύμανση αυτή θα είχε σαν αποτέλεσμα την μείωση του παρονομαστή στο  $VR$ . Με τον τρόπο αυτό προκύπτει ένα μεγαλύτερο  $VR$  το οποίο ενδυναμώνει τη δοκιμασία για την ύπαρξη διαφορών μεταξύ των στηλών. Συνεπώς η ικανότητα προσδιορισμού κατά πόσο ένας παράγοντας (στήλες) είναι σημαντικός μπορεί να ενισχυθεί με την εισαγωγή και ενός δευτέρου παράγοντα (γραμμές) προκειμένου να ερμηνευθεί η εναπομένουσα διακύμανση. Έτσι έχουμε την ανάλυση διακύμανσης κατά δύο παράγοντες (two way ANOVA) (Τσαούλη Α., 2010; Γεροντίδης, 2009; Turner J. Rick and Thayer F. Julian, 2001)



## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: ΔΙΕΡΓΑΣΙΑ ΧΗΜΙΚΗΣ ΑΠΟΘΕΣΗΣ ΑΠΟ ΑΤΜΟ (ΧΑΑ)

### 4.1 Φυσικό πρόβλημα

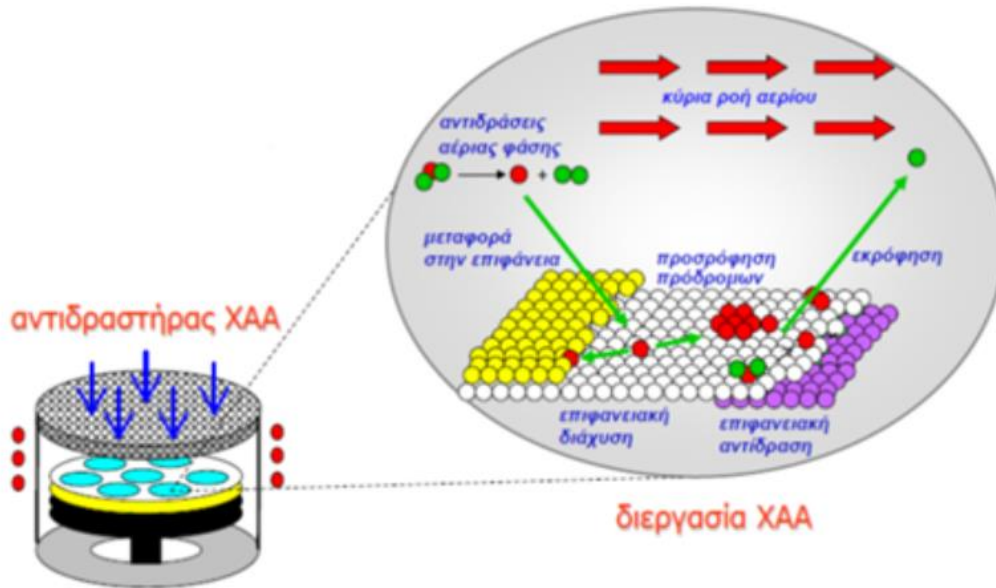
#### 4.1.1 Χημική Απόθεση από Ατμό (ΧΑΑ)

Η παρούσα εργασία μελετά το φυσικό πρόβλημα της χημικής απόθεσης από ατμό. Η χημική απόθεση από ατμό αποτελεί μια χημική διεργασία ανάπτυξης λεπτών υμενίων στην επιφάνεια στερεών υποστρωμάτων. Σύμφωνα με τη μέθοδο αυτή, λαμβάνει χώρα μια σειρά χημικών αντιδράσεων μεταξύ υλικών, τα οποία βρίσκονται συνήθως σε αέρια φάση και καλούνται πρόδρομα υλικά (precursors). Η απαιτούμενη ενέργεια για την πραγματοποίηση των χημικών αντιδράσεων παρέχεται συνήθως μέσω θέρμανσης του υποστρώματος.

Μια τυπική πειραματική διάταξη ΧΑΑ, περιλαμβάνει τα ακόλουθα επιμέρους τμήματα:

- τον αντιδραστήρα ΧΑΑ
- τη διάταξη ανάμειξης των προδρόμων υλικών,
- την πηγή θερμότητας, η οποία παρέχει την απαραίτητη ενέργεια για την ενεργοποίηση των χημικών αντιδράσεων
- το σύστημα απαγωγής των αερίων παραπροϊόντων.

Στις περιπτώσεις που τα παραπροϊόντα των χημικών αντιδράσεων που σχηματίζονται με χρήση της προαναφερθείσας μεθόδου θεωρούνται δηλητηριώδη, εύφλεκτα και διαβρωτικά. Συνεπώς, απαιτείται η ανάπτυξη ελεγχόμενης διαδικασίας απομάκρυνσης αυτών.



Σχήμα 4.1: Σχηματική αναπαράσταση της διεργασίας Χημικής Απόθεση από Ατμό (Ξενίδου, 2003)

Πιο συγκεκριμένα, η διεργασία της χημικής απόθεσης ατμών ξεκινά με τη μεταφορά των προδρόμων υλικών στο εσωτερικό του αντιδραστήρα, τη διάχυση και την προσρόφηση μέρους αυτών στην επιφάνεια. Στη συνέχεια, εφαρμόζοντας την κατάλληλη ενέργεια, έχουμε εκκίνηση των χημικών αντιδράσεων μεταξύ των προδρόμων υλικών, οι οποίες λαμβάνουν χώρα τόσο στην επιφάνεια του υποστρώματος όσο και στον αέριο χώρο άνωθεν της επιφάνειας. Με τον τρόπο αυτό συγκροτείται κρυσταλλικό πλέγμα που οδηγεί στη δημιουργία των στερεών υμενίων. Το τελικό στάδιο της διεργασίας περιλαμβάνει την εκρόφιση των αέριων παραπροϊόντων των χημικών αντιδράσεων, την μεταφορά και την απομάκρυνση αυτών προς την έξοδο του αντιδραστήρα.

Η διεργασία χημικής απόθεσης ατμών έχει αρκετές παραλλαγές, οι οποίες βρίσκουν ευρεία εφαρμογή στη βιομηχανία, όπως:

- η ατμοσφαιρική ΧΑΑ (AP-C.V.D/ Atmospheric Pressure CVD)
- η ΧΑΑ ατομικού στρώματος (AL-CVD/ Atomic Layer CVD)
- η ΧΑΑ χαμηλής πίεσης (LP-CVD/ Low Pressure CVD)
- η ΧΑΑ μεταλλική οργανική (MO-CVD/ Metallic Organic CVD).

Οι αντιδραστήρες ΧΑΑ έχουν τοιχώματα κατασκευασμένα με τρόπο τέτοιο ώστε να ρυθμίζονται κατάλληλα και να ψύχονται ή να θερμαίνονται, ανάλογα με τις εκάστοτε απαιτήσεις. Ψύχοντας τα τοιχώματα, επιτυγχάνεται μείωση της συσσωμάτωσης και των προβλημάτων προσμίξεων τα οποία παρουσιάζονται από αποθέσεις στα τοιχώματα. Από την άλλη πλευρά, θερμαίνοντας τα τοιχώματα, επιτυγχάνεται μείωση των αναπτυσσόμενων θερμοκρασιακών βαθμίδων στο εσωτερικό των αντιδραστήρων ΧΑΑ. Με τον τρόπο αυτό περιορίζεται η δημιουργία περίπλοκων δευτερευουσών ανωστικών ροών, οι οποίες παρεμποδίζουν την απόθεση του υλικού καθώς επιτυγχάνεται ομοιόμορφη θερμοκρασία στον αντιδραστήρα. Η δημιουργία κενού στο εσωτερικό των αντιδραστήρων κρίνεται απαραίτητη σε κάποιες περιπτώσεις για τους παρακάτω λόγους:

- Η πίεση του αερίου παρουσιάζει μείωση, σε τέτοιο βαθμό ώστε τα αεριοποιημένα άτομα έχουν μεγαλύτερη μέση διαδρομή εντός του δοχείου του αντιδραστήρα και αδυνατούν για το λόγο αυτό να δημιουργήσουν ανεπιθύμητα ιζήματα μέσω συγκρούσεων με το περιβάλλον.
- Το επίπεδο «μόλυνσης» του υμενίου μειώνεται και ελέγχονται με καλύτερο τρόπο οι συνθήκες δημιουργίας του.

Η μέθοδος ΧΑΑ παρουσιάζει αρκετά πλεονεκτήματα όσον αφορά τη δημιουργία στερεών υμενίων / επιστρώσεων:

- Μεγάλο ρυθμό απόθεσης
- Εξαιρετική πρόσφυση στην επιφάνεια των υποστρωμάτων
- Δυνατότητα ελέγχου στοιχειομετρίας και κρυσταλλικής δομής των υμενίων / επιστρώσεων
- Δυνατότητα επικάλυψης μεγάλων επιφανειών.
- Έλεγχο ομοιομορφίας του πάχους των λεπτών υμενίων / επιστρώσεων.

Η μέθοδος παρουσιάζει και μειονεκτήματα παρουσιάζει, μεταξύ των οποίων είναι και τα ακόλουθα:



- Οι υψηλές θερμοκρασίες, που απαιτούνται μπορεί να προκαλέσουν αλλοιώσεις στις μηχανικές ιδιότητες ενώ σε κάποιες περιπτώσεις θερμική καταστροφή των μεταλλικών υποστρωμάτων.
- Ο αριθμός των προδρόμων υλικών παραμένει ακόμα και σήμερα περιορισμένος, μειώνοντας έτσι το εύρος των υλικών που μπορούν να αποτεθούν.
- Η χρήση διαβρωτικών και τοξικών αντιδραστηρίων αυξάνουν την πιθανότητα μόλυνσης του υπόστρωματος, το οποίο πρέπει να είναι καθαρό από την ύπαρξη ανεπιθύμητων σωματιδίων, τα οποία μπορούν να δράσουν ως καταστροφικοί παράγοντες στη χημική σύσταση του υποστρώματος.

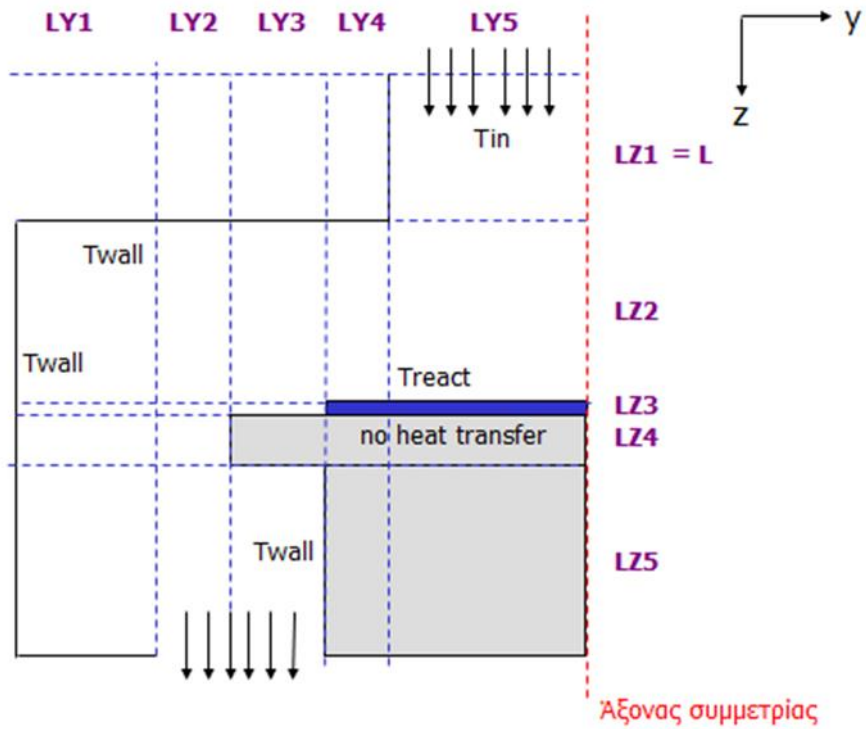
Η πλειοψηφία των εταιριών που δραστηριοποιούνται στην ανάπτυξη επικαλύψεων πάνω σε επιφάνειες υλικών με σκοπό την προστασία αυτών από τη διάβρωση και τη φθορά. Η ικανότητα της ΧΑΑ να ελέγχει τη μικροδομή ή/και τη χημική σύσταση του αποτιθέμενου υλικού, την καθιστά ιδιαίτερα ανταγωνιστική σε αρκετές εφαρμογές για το σχηματισμό σύνθετων υλικών, σφαιρικών εξαρτημάτων, συνθετικών διαμαντιών, καταλυτών, πολυκρυσταλλικών και άμορφων υλικών καθώς και διαφόρων διηλεκτρικών με υψηλό συντελεστή διηλεκτρικής σταθεράς  $k$ . Η πλειοψηφία των ανωτέρω υλικών χρησιμοποιείται στη βιομηχανία των ημιαγωγών και των ηλεκτρονικών για την παραγωγή συστημάτων όπως για παράδειγμα φωτοβολταϊκών, οπτικο-ηλεκτρονικών συσκευών κλπ (Kodas and Hampden-Smith, 1994).

### 4.1.2 Εξεταζόμενη Περίπτωση

Η υπό μελέτη περίπτωση είναι η προσομοίωση αντιδραστήρα χημικής απόθεσης λεπτών υμενίων βολφραμίου σε κατακόρυφο αντιδραστήρα ψυχρού τοιχώματος. Στόχος της μελέτης είναι η διερεύνηση της ποιότητας του παραγόμενου υμενίου με λειτουργικές παραμέτρους της διεργασίας, όπως η πίεση, η θερμοκρασία και η παροχή των αέριων αντιδρώντων.

Το αντικείμενο της ολοκληρωμένης προσομοίωσης της χημικής απόθεσης από ατμό είναι η περιγραφή και η μοντελοποίηση των μηχανισμών και των φαινομένων που ελέγχουν τη διεργασία της απόθεσης.

Για την υλοποίηση της προσομοίωσης, πραγματοποιείται σύζευξη ενός λεπτομερούς μοντέλου μεταφοράς με ένα απλουστευμένο μοντέλο περιγραφής της χημικής κινητικής της διεργασίας (Ξενίδου, 2003). Οι πραγματοποιούμενοι υπολογισμοί εξειδικεύονται στη χημική απόθεση βολφραμίου, W, μέσω της διάσπασης ατμών  $WF_6$  στο εσωτερικό κατακόρυφου αντιδραστήρα ψυχρού τοιχώματος. Οι εξισώσεις διατήρησης μάζας, ορμής, ενέργειας και συστατικών του αερίου μίγματος διακριτοποιούνται με τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων ελέγχου κι επιλύονται σε ένα δισδιάστατο καρτεσιανό πλέγμα σε συνθήκες μόνιμης κατάστασης και στρωτής ροής. Το μοντέλο μεταφοράς λαμβάνει υπόψη την εξάρτηση των φυσικών ιδιοτήτων από παραμέτρους όπως είναι η θερμοκρασία, η πίεση, η σύσταση του αερίου μίγματος, η ακτινοβολία, η πολυσυστατική διάχυση και τέλος η θερμική διάχυση. Ένα σκαρίφημα του αντιδραστήρα στον οποίο πραγματοποιείται η παρούσα μελέτη απεικονίζεται στο σχήμα 4.2. Στον Πίνακα 4.1 δίνονται οι διαστάσεις του αντιδραστήρα.



Σχήμα 4.2: Σχηματική αναπαράσταση 2-D κατακόρυφου αντιδραστήρα Χημικής Απόθεσης από Ατμό εξαεζόμενου προβλήματος

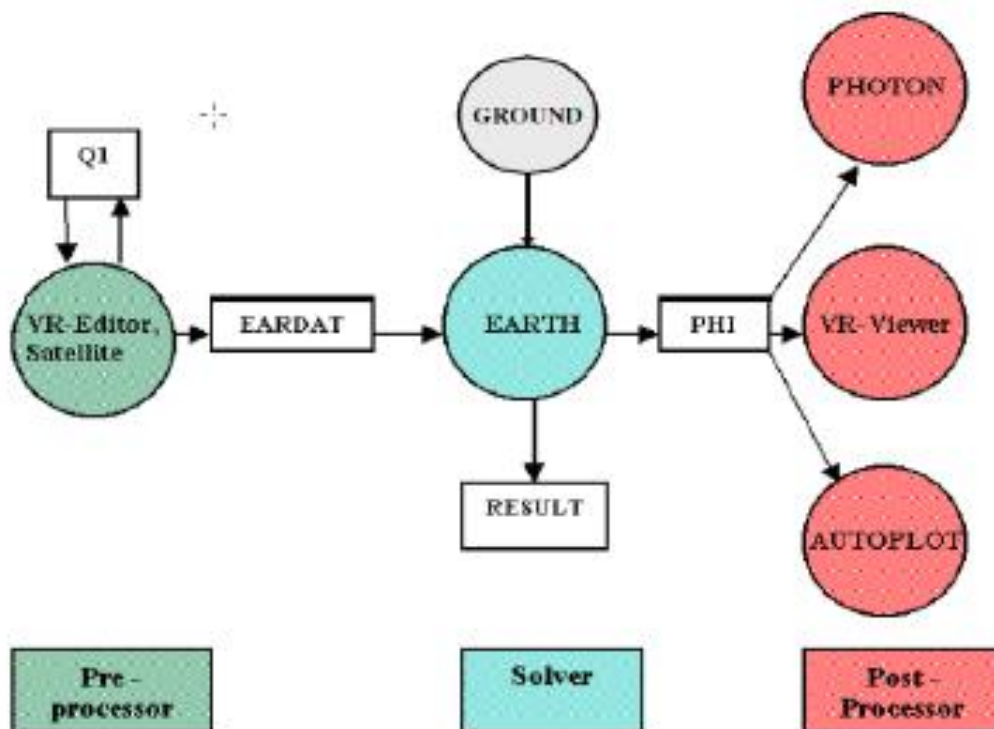
Πίνακας 4.1: Διαστάσεις αντιδραστήρα Χημικής Απόθεσης από Ατμό Σχήματος 4.2

Μεταβλητή	Διάσταση	Μεταβλητή	Διάσταση
$T_{wall}$	20 °C	LY5	0,3 m
$T_{react}$	340-540 °C	LZ1	0,3 m
$T_{in}$	20 °C	LZ2	0,48 m
LY1	0,12 m	LZ3	0,015 m
LY2	0,15 m	LZ4	0,15 m
LY3	0,24 m	LZ5	0,48 m
LY4	0,12 m		

### 4.1.3 Εμπορικό Λογισμικό PHOENICS

Το λογισμικό PHOENICS, το οποίο αναπτύχθηκε από την εταιρία CHAM, είναι ένας κώδικας υπολογιστικής ρευστοδυναμικής (Computational Fluid Dynamics, CFD) γενικής χρήσης που μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την προσομοίωση ενός μεγάλου εύρους φαινομένων ροής ρευστών, μεταφοράς θερμότητας και χημικών διεργασιών. Αποτελείται από τρία κυρίως τμήματα: το πρόγραμμα SATELLITE, το πρόγραμμα EARTH και την υπορουτίνα GROUND ([www.cham.co.uk](http://www.cham.co.uk)).

Στο σχήμα που ακολουθεί υπάρχει σχηματική απεικόνιση της συνεργασίας και της αλληλεξάρτησης μεταξύ των βασικών και των βοηθητικών κωδίκων.



Σχήμα 4.3: Αναπαράσταση λειτουργίας του εμπορικού πακέτου υπολογιστικής ρευστοδυναμικής Phoenics ([www.cham.co.uk](http://www.cham.co.uk)).

Το πρόγραμμα SATELLITE αποτελεί έναν προεπεξεργαστή, ο οποίος χρησιμοποιείται για τον ορισμό του προβλήματος. Μέσω αυτού προσδιορίζονται οι διαστάσεις του πεδίου ροής, το πλέγμα που θα χρησιμοποιηθεί για την επίλυση του προβλήματος, οι μερικές διαφορικές εξισώσεις που θα επιλυθούν καθώς και οι συνοριακές συνθήκες. Δίνονται επίσης στοιχεία τα οποία αφορούν τη σύγκλιση, όπως είναι οι αρχικές συνθήκες των μεταβλητών, ο αριθμός των επαναλήψεων και η απαραίτητη υπο-χαλάρωση.

Το πρόγραμμα SATELLITE μετά την επεξεργασία των δεδομένων που δέχθηκε, παράγει το αρχείο δεδομένων EARDAT, το οποίο διαβάζεται από το πρόγραμμα EARTH. Το πρόγραμμα EARTH χρησιμοποιείται για την επίλυση των διαφορικών εξισώσεων. Το πρόγραμμα EARTH, αφού επιλύσει τις εξισώσεις δημιουργεί το αρχείο εξόδου PHI, το οποίο περιέχει τα αποτελέσματα της προσομοίωσης.

Η υπορουτίνα GROUND είναι γραμμένη σε γλώσσα προγραμματισμού FORTRAN και έχει τη δυνατότητα σύνδεσης με το πρόγραμμα EARTH.

Τέλος, το πρόγραμμα PHOENICS περιέχει και τον κώδικα PHOTON, ο οποίος είναι γραφικός επεξεργαστής απεικόνισης των αποτελεσμάτων.

## 4.2 Μαθηματικό Μοντέλο

Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιείται το μοντέλο προσομοίωσης διεργασιών ΧΑΑ που αναπτύχθηκε στη Μονάδα Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής της σχολής Χημικών Μηχανικών του Εθνικού Μετσοβίου Πολυτεχνείου (Ξενίδου, 2003).

### 4.2.1 Διαφορικές εξισώσεις ροής και συστατικού

Το φαινόμενο το οποίο λαμβάνει χώρα στη διεργασία χημικής απόθεσης με ατμό περιγράφεται με τις εξισώσεις διατήρησης συνέχειας, ορμής, ενέργειας και διατήρησης των συστατικών. Η γενική μορφή των εξισώσεων διατήρησης είναι η ακόλουθη (Versteeg and Malalasekera, 1995):

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\phi\vec{u}) = \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla\phi) + S_\phi \quad (4.1)$$

όπου:

- $\rho$ , η πυκνότητα,
- $\vec{u}$ , το διάνυσμα της ταχύτητας,
- $\Gamma_\phi$ , ο γενικευμένος συντελεστής εναλλαγής (ιξώδες, συντελεστής διάχυσης, συντελεστής εναλλαγής θερμότητας κλπ),
- $S_\phi$ , οι όροι πηγής που εξαρτώνται από την αντίστοιχη εξίσωση διατήρησης,
- $\phi$ , η αντίστοιχη ποσότητα για την οποία διατυπώνεται η εξίσωση διατήρησης.

Η εξίσωση (4.1) εκφράζει την ισότητα μεταξύ του αθροίσματος του ρυθμού αύξησης και του καθαρού ρυθμού εκροής της ποσότητας  $\phi$  με το ρυθμό αύξησης της ποσότητας λόγω διάχυσης, επαυξημένου κατά το ρυθμό αύξησης λόγω της ύπαρξης πηγών.

Για τη μακροσκοπική ανάλυση της ροής στο εσωτερικό ενός αντιδραστήρα χημικής απόθεσης από ατμό είναι απαραίτητο να γνωρίζουμε εάν το ρευστό συμπεριφέρεται ως μοριακό ή ως συνεχές μέσο. Για να χρησιμοποιήσουμε την υπόθεση του συνεχούς μέσου πρέπει οι διαστάσεις του εξεταζόμενου συστήματος, σε όρους ενός χαρακτηριστικού μήκους  $L$ , να είναι μεγαλύτερες, τουλάχιστον, από τη

μέση ελεύθερη διαδρομή,  $\lambda_m$ , των μορίων του ρευστού. Συνήθως για το χαρακτηρισμό ενός ρευστού ως συνεχές ή ως μοριακό μέσο χρησιμοποιείται ο αδιάστατος αριθμός Knudsen,  $Kn$ , ο οποίος ορίζεται από τη σχέση:

$$Kn = \frac{\lambda_m}{L} \quad (4.2)$$

Το ρευστό συμπεριφέρεται ως συνεχές μέσο όταν  $Kn < 1$ . Σε συνήθεις συνθήκες η μέση ελεύθερη διαδρομή των μορίων,  $\lambda_m$ , είναι πολύ μικρή (π.χ. για τον αέρα σε συνθήκες ατμοσφαιρικής πίεσης η μέση ελεύθερη διαδρομή των μορίων είναι περίπου  $6.3 \times 10^{-5}$  mm), οπότε ικανοποιείται η συνθήκη  $Kn < 1$  (Παπαϊωάννου, 1996, Τόμος I).

Οι αντιδραστήρες χημικής απόθεσης από ατμό λειτουργούν συνήθως σε χαμηλές πιέσεις, όπου η μέση ελεύθερη διαδρομή των μορίων αυξάνεται σημαντικά (για παράδειγμα  $\lambda_m \cong 5$  cm, σε πίεση 10-3 Torr) (Kodas and Hampden-Smith, 1994). Στην παρούσα διατριβή, το χαρακτηριστικό μήκος των αντιδραστήρων που μοντελοποιούνται σε συνδυασμό με τις πιέσεις λειτουργίας εξασφαλίζουν  $Kn < 0.1$ , γεγονός που επιτρέπει την υπόθεση του συνεχούς μέσου.

Για το χαρακτηρισμό της ροής ως στρωτή ή τυρβώδης χρησιμοποιείται ο αριθμός Reynolds,  $Re$ , ο οποίος ορίζεται από τη σχέση (Παπαϊωάννου, 1996, Τόμος II):

$$Re = \frac{\rho u L}{\mu} \quad (4.3)$$

Σε συνήθεις κυκλικούς αγωγούς, η ροή μετατρέπεται από στρωτή σε τυρβώδη για τιμές  $Re$  μεγαλύτερες από  $Re = 2000$  (Tennekes and Lumley, 1983). Στους περισσότερους αντιδραστήρες χημικής απόθεσης από ατμό λόγω των χαμηλών ταχυτήτων του ρευστού, ο αριθμός  $Re$  κυμαίνεται από 0.1 έως 100, οπότε θεωρούμε στρωτή ροή. Στους αντιδραστήρες χημικής απόθεσης από ατμό η πυκνότητα του ρευστού μεταβάλλεται εξαιτίας των μεγάλων βαθμίδων θερμοκρασίας που παρατηρούνται στο εσωτερικό συστημάτων στα οποία τα τοιχώματα ψύχονται σε χαμηλές θερμοκρασίες. Μεταβολές της πυκνότητας συνδέονται συνήθως με μεταβολές της πίεσης οι οποίες προκύπτουν όταν η ταχύτητα του ρευστού,  $u$ , μεταβάλλεται σημαντικά. Για το χαρακτηρισμό μιας ροής ως συμπιεστή ή ασυμπιεστή χρησιμοποιείται ο αριθμός Mach,  $Ma$ , ο οποίος ορίζεται από τη σχέση (Παπαϊωάννου, 1996, Τόμος I):

$$Ma = \frac{u}{a_s} \quad (4.4)$$

Ως ασυμπίεστη χαρακτηρίζεται κάθε ροή στην οποία ο αριθμός Mach είναι μικρότερος ή ίσος με 0.3. Η συνθήκη αυτή ικανοποιείται στους αντιδραστήρες χημικής απόθεσης από ατμό αφού λόγω των χαμηλών ταχυτήτων ο αριθμός Mach είναι πολύ μικρότερος από τη μονάδα. Επομένως, η ροή θεωρείται ασυμπίεστη.

Ο σχηματισμός του λεπτού υμενίου πάνω στο θερμαινόμενο υπόστρωμα είναι ένα δυναμικό φαινόμενο. Ωστόσο, για τη μοντελοποίηση της χημικής απόθεσης από ατμό θεωρούμε ψευδομόνιμη κατάσταση. Η παραδοχή αυτή είναι επιτρεπτή όταν οι κλίμακες χρόνου που συνδέονται με μεταβατικά φαινόμενα στη διάρκεια της απόθεσης (όπως, για παράδειγμα, η αστάθεια που προκαλείται στο πεδίο συγκέντρωσης κατά την έναρξη αλλά και κατά τη διακοπή της παροχής τροφοδοσίας) είναι μικρές συγκρινόμενες με το συνολικό χρόνο απόθεσης. Ο τελευταίος κυμαίνεται συνήθως από 5 έως 10 min σε αντιδραστήρες με ένα δισκίο απόθεσης. Ωστόσο, σε διεργασίες απόθεσης που πραγματοποιούνται με ταχεία θέρμανση του υποστρώματος (RTCVD), οι δυναμικές επιδράσεις είναι σημαντικές και πρέπει να λαμβάνονται υπόψη στη μοντελοποίηση (Kleijn et al., 1989).

Η επίδραση Dufour,  $q^{(x)}$ , που οφείλεται στις βαθμίδες της συγκέντρωσης, δε λαμβάνεται υπόψη στην εξίσωση διατήρησης της ενέργειας αφού είναι συνήθως αμελητέα στις συνθήκες που επικρατούν στους αντιδραστήρες χημικής απόθεσης από ατμό (Jenkinson and Pollard, 1984). Στη διαπίστωση πως η επίδραση Dufour μπορεί να αμελείται γενικά στη μοντελοποίηση της χημικής απόθεσης από ατμό, κατέληξε και ο Kleijn (Kleijn, 1991), ο οποίος βρήκε πως η επίδραση Dufour έχει αμελητέα συνεισφορά (<0.1%) στον υπολογισμό της θερμοκρασίας για όλες τις συνθήκες λειτουργίας που εξετάσθηκαν.

Οι εξισώσεις διατήρησης με βάση τις παραπάνω παραδοχές λαμβάνουν την ακόλουθη ακόλουθη μορφή:

- Εξίσωση συνέχειας:

$$\nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (4.5)$$



- Εξίσωση διατήρησης της ορμής:

$$\rho \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = -\nabla p + \rho \vec{g} + \nabla \cdot \left[ \mu \nabla \vec{u} + \mu (\nabla \vec{u})^T - \frac{2}{3} \mu I (\nabla \cdot \vec{u}) \right] \quad (4.6)$$

- Εξίσωση διατήρησης της ενέργειας:

$$\rho C_p \vec{u} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) - \sum_i \vec{j}_i \nabla H_i - \sum_k \sum_i H_i u_{ik} (R_k^g - R_k^{-g}) \quad (4.7)$$

Ο δεύτερος όρος στο δεξί μέλος της εξίσωσης διατήρησης της ενέργειας, αντιστοιχεί στην ενέργεια που μεταφέρεται λόγω ενδοδιάχυσης του μίγματος, ενώ ο τελευταίος όρος συνδέεται με την παραγωγή και την κατανάλωση των συστατικών στις αντιδράσεις αέριας φάσης.

- Η εξίσωση διατήρησης του συστατικού i:

$$\nabla \cdot (\rho \vec{u} \omega_i) = -\nabla \vec{j}_i + m_i \sum_k u_{ik} (R_k^g - R_k^{-g}) \quad (4.8)$$

Στην παραπάνω εξίσωση, ο δεύτερος όρος του δεξιού μέλους αντιστοιχεί στην παραγωγή ή την κατανάλωση του συστατικού i στις αντιδράσεις αέριας φάσης.

Στις παραπάνω εξισώσεις, η ροή μάζας  $j_i$  ισούται με το άθροισμα της συνήθους διάχυσης και της θερμικής διάχυσης.

$$\vec{j}_i = -\rho D_i^{eff} \nabla \omega_i - \rho \omega_i D_i^{eff} \nabla (\ln m) + m \omega_i D_i^{eff} \sum_{j=1}^N \frac{\vec{j}_j^c}{m_j D_{ij}} - D_i^T \nabla (\ln T) \quad (4.9)$$

Η ανωτέρω εξίσωση διατήρησης του συστατικού-i επιλύεται για N-1 συστατικά, ενώ το μοριακό κλάσμα του φέροντος αερίου υπολογίζεται από το γεγονός ότι το άθροισμα των κλασμάτων μάζας,  $\omega_i$ , όλων των συστατικών ισούται με τη μονάδα.

Λόγω των μεγάλων βαθμίδων της θερμοκρασίας, οι οποίες παρατηρούνται στο εσωτερικό των αντιδραστήρων ΧΑΑ, δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί η προσέγγιση Boussinesq για την περιγραφή των δυνάμεων άνωσης  $\rho \vec{g}$  (Incropera and Dewitt, 1996). Αντιθέτως, η

πυκνότητα στον όρο της άνωσης των εξισώσεων διατήρησης της ορμής, περιγράφεται από τη σχέση:

$$\rho = \rho_0 + (\rho - \rho_0) \quad (4.10)$$

Η πυκνότητα αναφοράς  $\rho_0$ , αντιστοιχεί στη θερμοκρασία αναφοράς,  $T_0$ . Ο όρος  $\rho_0 \vec{g}$ , οποίος προκύπτει στις εξισώσεις διατήρησης της ορμής απορροφάται στον όρο της βαθμίδας της πίεσης.

Η χημική αντίδραση που λαμβάνει χώρα στην απόθεση βολφραμίου είναι η ακόλουθη:



με ρυθμό αντίδρασης:

$$R_s = c_H [P_{WF_6}]^0 \cdot [P_{H_2}]^{0.5} \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (4.12)$$

Από πειραματικές μετρήσεις που είχε πραγματοποιήσει ο Broadent το 1984, είχε προκύψει  $E=69\text{KJ/mol}$  και  $c_H=1.7 \text{ Pa}^{-0.5}\text{m}^{-2}\text{s}^{-1}$  (Reid and Prausnitz, 1988). Σε αρκετά υψηλές συγκεντρώσεις  $WF_6$ , ο ρυθμός της κινητικής βρέθηκε να είναι ανεξάρτητος από τη συγκέντρωση του  $WF_6$  και να εξαρτάται μόνο από τη μερική πίεση του  $H_2$  και τη θερμοκρασία.

Ο ρυθμός ανάπτυξης  $G$  του υμενίου πάνω στο δισκίο απόθεσης υπολογίζεται από τη σχέση:

$$G = \frac{M_s}{\rho_s} R_d \quad (4.13)$$

όπου,  $M_s$  και  $\rho_s$  το μοριακό βάρος και η πυκνότητα του στερεού υμενίου, αντίστοιχα.

Ο ρυθμός απόθεσης  $R_d$  λαμβάνει υπόψη τόσο την αντίδραση  $R_s$ , όσο και τη διάχυση των αντιδρώντων/προϊόντων στην επιφάνεια απόθεσης ( $R_{D,WF_6}$  και  $R_{D,H_2}$ ):

$$\frac{1}{R_d} = \frac{1}{R_s} + \frac{1}{R_{D,WF_6}} + \frac{1}{R_{D,H_2}} \quad (4.14)$$

Ο ρυθμός διάχυσης κάθε συστατικού  $j$  υπολογίζεται από τη σχέση:

$$R_{D,j} = \frac{1}{m_j} \frac{\rho D_j \omega_j}{\Delta} \quad (4.15)$$

όπου  $\Delta$  η απόσταση από τη στερεή επιφάνεια και  $D$  ο ενεργός συντελεστής διάχυσης του συστατικού  $j$ , ο οποίος υπολογίζεται από τη σχέση:

$$D_j = -\frac{\dot{J}_j}{\rho \nabla \omega_j} \quad (4.16)$$

Η ροή διάχυσης προς την επιφάνεια απόθεσης παίρνει τη μέγιστη τιμή της όταν η συγκέντρωση του συστατικού  $j$ ,  $\omega_j$ , γίνεται μηδενική στην επιφάνεια απόθεσης.

#### 4.2.2 Συνοριακές συνθήκες

Προκειμένου να επιτευχθεί επίλυση του συστήματος των διαφορικών εξισώσεων (4.5) έως (4.8), είναι απαραίτητη η χρήση κατάλληλων συνοριακών συνθηκών για τις συνιστώσες της ταχύτητας, τη θερμοκρασία και τις συγκεντρώσεις των συστατικών του μίγματος.

Στα στερεά τοιχώματα του αντιδραστήρα γίνεται χρήση της συνθήκης μη ολίσθησης και μη διείδυσης θέτοντας στα σημεία εκείνα

$$\vec{u} = 0 \quad (4.17).$$

Για την προσομοίωση του αντιδραστήρα ψυχρών τοιχωμάτων, θεωρείται σταθερή η θερμοκρασία στα τοιχώματα:

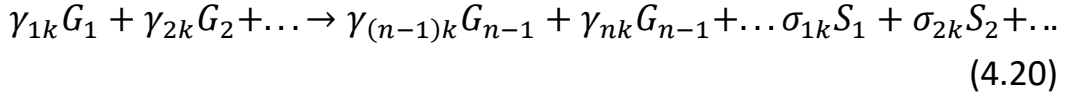
$$T = T_{\text{wall}} \quad (4.18)$$

Η συνολική ροή όλων των συστατικών του αέριου μίγματος θεωρείται μηδενική:

$$\vec{n} \cdot (\vec{J}_i^C + \vec{J}_i^T) = 0 \quad (4.19)$$

Στην επιφάνεια απόθεσης, λόγω της ενσωμάτωσης των ατόμων και της έκλυσης των αερίων προϊόντων, υπάρχει μια πεπερασμένη ταχύτητα κάθετα σε αυτή. Συγκεκριμένα, ο σχηματισμός του λεπτού

υμενίου, στην επιφάνεια του θερμαινόμενου υποστρώματος λαμβάνει χώρα μέσω επιφανειακών αντιδράσεων της μορφής



Λόγω των αντιδράσεων αυτών, υπάρχει ένας καθαρός ρυθμός παραγωγής ή κατανάλωσης της μάζας του συστατικού  $i$ ,  $MF_i$ , στην επιφάνεια απόθεσης:

$$MF_i = M_i \sum_{k=1}^{KS} \gamma_{ik} R_k^S \quad (4.21)$$

Η συνολική καθαρή ροή μάζας στην επιφάνεια απόθεσης,  $MF$ , υπολογίζεται από τη σχέση:

$$MF = \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^{KS} M_i \gamma_{ik} R_k^S \quad (4.22)$$

Λόγω της ροής μάζας, δημιουργείται κάθετα στην επιφάνεια απόθεσης μια συνιστώσα ταχύτητας  $u_s$ :

$$u_s = \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^{KS} M_i \gamma_{ik} R_k^S \quad (4.23)$$

Στην περίπτωση των πολύ αραιών μιγμάτων ( $\omega_i < 1$ ), η ταχύτητα αυτή είναι μικρή κι έτσι, σε κάποιες περιπτώσεις η ανωτέρω συνθήκη μπορεί να αντικατασταθεί με τη συνθήκη μη ολίσθησης στη στερεή επιφάνεια απόθεσης.

Για τα αέρια συστατικά που συμμετέχουν στις επιφανειακές αντιδράσεις, η καθαρή ροή στην επιφάνεια απόθεσης ισούται ουσιαστικά με τον καθαρό ρυθμό παραγωγής ή κατανάλωσης:

$$\vec{n} \cdot (\rho \vec{u}_i + j_i^C + j_i^T) = M_i \sum_{k=1}^{KS} \gamma_{i,k} R_k^S \quad (4.24)$$

Για την εξίσωση διατήρησης της ενέργειας στην επιφάνεια απόθεσης χρησιμοποιείται ισοθερμοκρασιακή συνθήκη, καθώς αυτή θερμαίνεται με ακτινοβολία μέσω λαμπτήρων.

$$T = T_{\text{wafer}} \quad (4.25)$$

Στην είσοδο του αντιδραστήρα καθορίζονται οι αρχικές τιμές για όλες τις μεταβλητές επίλυσης:

$$\vec{u} = \vec{u}_{inlet} \quad (4.26)$$

$$T = T_{inlet} \quad (4.27)$$

$$\omega_i = \omega_{i,inlet} \quad (4.28)$$

Στην έξοδο του αντιδραστήρα, η ροή θεωρείται πλήρως ανεπτυγμένη:

$$\vec{n} \cdot \nabla \vec{u} = 0 \quad (4.29)$$

$$\vec{n} \nabla T = 0 \quad (4.30)$$

$$\vec{n} \nabla \omega_i = 0 \quad (4.31)$$

### 4.2.3. Θερμοφυσικές ιδιότητες των συστατικών και του μίγματος

Η επίλυση της εξίσωσης διατήρησης της ενέργειας (εξίσωση 4.7) απαιτεί τον υπολογισμό των θερμοφυσικών ιδιοτήτων των συστατικών και του μίγματος. Για τον υπολογισμό της ειδικής θερμότητας,  $C_{pi}$ , και της ενθαλπίας σχηματισμού,  $H_i$ , των συστατικών χρησιμοποιούνται πολυωνυμικές συναρτήσεις της θερμοκρασίας, σύμφωνα με τη βάση δεδομένων CHEMKIN (Kee et al., 1987):

$$\frac{C_{pi}(T)}{R} = \alpha_{1i} + \alpha_{2i} T + \alpha_{3i} T^2 + \alpha_{4i} T^3 + \alpha_{5i} T^4 \quad (4.32)$$

$$\frac{H_i(T)}{RT} = \alpha_{1i} + \frac{\alpha_{2i}}{2} T + \frac{\alpha_{3i}}{3} T^2 + \frac{\alpha_{4i}}{4} T^3 + \frac{\alpha_{5i}}{5} T^4 + \frac{\alpha_{6i}}{T} \quad (4.33)$$

Οι πολυωνυμικοί συντελεστές λαμβάνονται από διαθέσιμα βιβλιογραφικά δεδομένα. Η ειδική θερμότητα του μίγματος,  $C_p$ , υπολογίζεται από τη σχέση:

$$C_p = \sum_{i=1}^N \omega_i C_{pi} \quad (4.34)$$

#### 4.2.4. Ιδιότητες μεταφοράς των συστατικών και του μίγματος

Η πυκνότητα του μίγματος,  $\rho$ , υπολογίζεται από το νόμο των τελείων αερίων:

$$\rho = \frac{PM}{RT} \quad (4.35)$$

Το δυναμικό ιξώδες του συστατικού  $i$ ,  $\mu_i$ , μπορεί να υπολογισθεί από τη σχέση (Bird et al., 1960):

$$\mu_i = 2.6693 \cdot 10^{-5} \frac{\sqrt{M_i T}}{\sigma_i^2 \Omega_{\mu,i}} \quad (4.36)$$

Η αδιάστατη παράμετρος (collision integral),  $\Omega_{\mu,i}$ , υπολογίζεται ανάλογα με την παράμετρο  $\Omega_{D,ij}$  μέσω της εμπειρικής σχέσης (Neufeld et al., 1972):

$$\Omega_{\mu,ij} = \frac{A}{(T^*)^B} + \frac{C}{\exp(DT^*)} + \frac{E}{\exp(FT^*)} + \frac{G}{\exp(HT^*)} \quad (4.37)$$

όπου,  $A = 1.16145$ ,  $B = 0.14874$ ,  $C = 0.52487$ ,  $D = 0.77320$ ,

$E = 2.16178$ ,  $F = 2.43787$ ,  $G = 0.00000$ ,  $H = 0.00000$

Η θερμική αγωγιμότητα του συστατικού  $i$ ,  $\lambda_i$ , για μονοατομικά αέρια υπολογίζεται από τη σχέση (Bird et al., 1960):

$$\lambda_i = \frac{15}{4} \frac{R}{M_i} \mu_i \quad (4.38)$$

ενώ για πολυατομικά αέρια χρησιμοποιείται η διόρθωση Eucken (Reid, 1988):

$$\lambda_i = \left( \frac{15}{4} + 1.32 \left( \frac{C_p}{R} - \frac{5}{2} \right) \right) \frac{R}{M_i} \mu_i \quad (4.39)$$

Για τον υπολογισμό του δυναμικού ιξώδες του μίγματος,  $\mu$ , χρησιμοποιείται η εμπειρική σχέση που προτάθηκε από τον Wilke (Reid, 1988):

$$\mu = \sum_{i=1}^N \left( \frac{x_i \mu_i}{\sum_j x_j \Phi_{ij}} \right) \quad (4.40)$$

όπου, ο παράγοντας συσχέτισης  $\Phi_{ij}$  υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\Phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left( 1 + \frac{M_i}{M_j} \right)^{-1/2} \left( 1 + \left( \frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} \left( \frac{M_j}{M_i} \right)^{1/4} \right)^2 \quad (4.41)$$

Η θερμική αγωγιμότητα του μίγματος,  $\lambda$ , υπολογίζεται από ανάλογη εμπειρική σχέση.

#### 4.2.5. Τελικοί υπολογισμοί του μοντέλου

Στα πειράματα που πραγματοποιούνται σε αντιδραστήρες χημικής απόθεσης από ατμό, οι μετρήσεις που προκύπτουν αφορούν κυρίως στην κατανομή του πάχους του παραγόμενου υμενίου στην επιφάνεια του δισκίου αλλά και στο μέσο ρυθμό απόθεσης πάνω σε αυτό. Για το λόγο αυτό, εκτός από τις κατανομές της ταχύτητας, της θερμοκρασίας και της συγκέντρωσης των συστατικών του μίγματος, το μοντέλο προσομοίωσης της λειτουργίας αντιδραστήρων χημικής απόθεσης από ατμό υπολογίζει το ρυθμό απόθεσης πάνω στην επιφάνεια του υποστρώματος. Για τον υπολογισμό του θεωρούμε ένα μηχανισμό ο οποίος στηρίζεται στα διαδοχικά στάδια της διάχυσης των αερίων συστατικών του αντιδρώντος μίγματος προς την επιφάνεια απόθεσης και της επιφανειακής αντίδρασης που οδηγεί στο σχηματισμό του λεπτού υμενίου. Επομένως, για την επιφανειακή αντίδραση  $k$ , ο ρυθμός απόθεσης,  $R_k^d$ , πάνω στο θερμαινόμενο υπόστρωμα καθορίζεται από το πιο αργό στάδιο μέσω της σχέσης:

$$\frac{1}{R_k^d} = \frac{1}{R_k^s} + \sum_{i=1}^{NR} \frac{\gamma_{ik}}{R_{Di}} \quad (4.42)$$

Ο ρυθμός της επιφανειακής αντίδρασης,  $R_k^s$ , υπολογίζεται μέσω της εξίσωσης που περιγράφει την κινητική της αντίδρασης, ενώ για τον υπολογισμό της μέγιστης ροής διάχυσης του συστατικού  $i$ ,  $R_{Di}$ , στην επιφάνεια απόθεσης χρησιμοποιείται η σχέση:

$$R_{Di} = \frac{1}{M_i} \frac{(\rho D_i \omega_i)_1}{d_{1s}} \quad (4.43)$$

Ο δείκτης 1 δηλώνει τις τιμές των μεγεθών στο πρώτο πλεγματικό σημείο από την επιφάνεια απόθεσης. Η απόσταση  $d_{1s}$  ισούται με την απόσταση του σημείου αυτού από τη στερεή επιφάνεια. Ο ενεργός συντελεστής του αντιδρώντος συστατικού  $i$ ,  $D_i$ , στο αέριο μίγμα υπολογίζεται από τη σχέση:

$$D_i = - \frac{j_i^c}{\rho \nabla \omega_i} \quad (4.44)$$

Η σχέση (4.40) βασίζεται στο γεγονός ότι η ροή διάχυσης προς την επιφάνεια απόθεσης παίρνει τη μέγιστη τιμή της όταν η συγκέντρωση του συστατικού  $i$ ,  $\omega_i$ , γίνεται μηδενική στην επιφάνεια απόθεσης. Επειδή  $D_i^T \rightarrow 0$  για  $\omega_i \rightarrow 0$ , η εξίσωση (4.40) περιλαμβάνει μόνο τον όρο της συνήθους διάχυσης και όχι την επίδραση της θερμικής διάχυσης.

Για τη μετατροπή του ρυθμού απόθεσης,  $R_k^d$  [mol/m<sup>2</sup>s] στο συνολικό ρυθμό ανάπτυξης πάνω στο δισκίο απόθεσης,  $G$  [Å/min], που μετράται πειραματικά, χρησιμοποιείται η σχέση:

$$G = 6 \cdot 10^{-11} \cdot \frac{M_s}{\rho_s} \sum_{k=1}^{KS} \sigma_{sk} R_k^d \quad (4.45)$$



#### 4.2.6. Διακριτοποίηση με αλγεβρικές εξισώσεις

Η επίλυση των διαφορικών εξισώσεων πραγματοποιείται με διακριτοποίηση αυτών και τη μετατροπή τους σε σύστημα απλών αλγεβρικών εξισώσεων. Η επίλυση λαμβάνει χώρα σε υπολογιστικό πλέγμα, στο οποίο έχει διακριτοποιηθεί η γεωμετρία του αντιδραστήρα της παρούσας μελέτης. Η μέθοδος που εφαρμόζεται ονομάζεται Μέθοδος Πεπερασμένων Όγκων Ελέγχου και απαιτεί την ολοκλήρωση των ανωτέρω διαφορικών εξισώσεων σε δεδομένο διαφορικό όγκο (Versteeg and Malalasekera, 1995).

Προκειμένου να πραγματοποιηθεί η επίλυση, γίνεται χρήση των μεθόδων πλήρους πεδίου (whole-field method), με την οποία μέθοδο υπολογίζονται οι τιμές των βαθμωτών μεγεθών όπως η πίεση, η θερμοκρασία και κλάσματα βάρους των αντιδρώντων και της μεθόδου σημείου προς σημείο (point-by-point method), με την οποία υπολογίζονται τα διανυσματικά μεγέθη όπως οι συνιστώσες της ταχύτητας. Η διακριτοποίηση της μεθόδου πλήρους πεδίου φαίνεται στην πιο κάτω εξίσωση:

$$a_P \varphi_P^{new} - a_N \varphi_N^{new} - a_S \varphi_S^{new} - a_L \varphi_L^{new} - a_H \varphi_H^{new} = a_T \varphi_T + S_\Phi \quad (4.46)$$

ενώ η διακριτοποίηση της μεθόδου σημείο προς σημείο:

$$a_P \varphi_P^{new} - a_N \varphi_N^{old} - a_S \varphi_S^{old} - a_L \varphi_L^{old} - a_H \varphi_H^{old} = a_T \varphi_T + S_\Phi \quad (4.47)$$

Η διακριτοποίηση πραγματοποιείται με το σχήμα των ανάντη διαφορών, ενώ αφού υποθέτουμε στρωτή ροή λόγω της μικρής ταχύτητας και της σχετικά απλής γεωμετρίας, δε γίνεται χρήση κάποιου μοντέλου τύρβης.

### 4.2.7. Λεπτομέρειες Αριθμητικής Επίλυσης

Για την επίτευξη της σύγκλισης γίνεται χρήση συντελεστών χαλάρωσης. Στην περίπτωση της θερμοκρασίας και της πίεσης γίνεται χρήση γραμμικής υποχαλάρωσης, ενώ για τις συνιστώσες της ταχύτητας και για τα συστατικά της αντίδρασης γίνεται χρήση υποχαλάρωσης ψευδοχρονικού βήματος. Η γραμμική υποχαλάρωση δίνεται από τη σχέση:

$$\varphi^{new} = \alpha_L \varphi^{new} + (1 - \alpha_L) \varphi^{old} \quad (4.48)$$

ενώ η χαλάρωση ψευδοχρονικού βήματος από τη σχέση:

$$S_\varphi = (\rho V)_P \frac{\varphi^{new} - \varphi^{old}}{dt_f} \quad (4.49).$$

### 4.2.8 Ο αλγόριθμος SIMPLEST

Για τον υπολογισμό της πίεσης γίνεται χρήση του αλγορίθμου SIMPLEST. Ο αλγόριθμος SIMPLEST αποτελεί παραλλαγή κι εξέλιξη του αλγορίθμου SIMPLE (Versteeg and Malalasekera, 1995).

Τα κυριότερα βήματα τόσο στον αλγόριθμο SIMPLE όσο και στον SIMPLEST είναι τα ακόλουθα:

1. Αρχική εκτίμηση πεδίου πίεσης.
2. Επίλυση των εξισώσεων ορμής κάνοντας χρήση του πεδίου πίεσης, παίρνοντας κατ' αυτό τον τρόπο ταχύτητες οι οποίες ικανοποιούν τη διατήρηση της ορμής, αλλά όχι κατ' ανάγκη και τη συνέχεια.
3. Δημιουργία των σφαλμάτων της συνέχειας για κάθε κελί: εισροή-εκροή.
4. Επίλυση μιας εξίσωσης διόρθωσης πίεσης. Οι συντελεστές είναι  $A^{d(vel)}/dp$  και οι πηγές τα σφάλματα της συνέχειας.
5. Διόρθωση του πεδίου πίεσης ανάλογα.
6. Διόρθωση του πεδίου ταχύτητας αναλόγως, όπως για παράδειγμα:

$$velocity^{new} = velocity^{old} + \frac{d(vel)}{dr} * pressure\_difference \quad (4.50)$$

7. Επιστροφή στο βήμα 2 και επανάληψη για το νέο πεδίο πίεσης. Η επαναληπτική διαδικασία ολοκληρώνεται όταν τα σφάλματα στις εξισώσεις διατήρησης ορμής και συνέχειας είναι αποδεκτά.

Ο αλγόριθμος SIMPLEST αποτελεί εξέλιξη του αλγορίθμου SIMPLE και διαφέρει με τον προκάτοχό του στη μορφή της διακριτοποιημένης εξίσωσης. Ενώ στον αλγόριθμο SIMPLE η εξίσωση είναι η:

$$aP * uP = aN * uN + aS * uS + aE * uE + aW * uW + etc \quad (4.51)$$

στην οποία οι συντελεστές  $a_N, a_S, a_E, a_W$  κτλ αντιπροσωπεύουν την επίδραση τόσο των όρων συναγωγής όσο και των όρων διάχυσης. Οι όροι όμως συναγωγής και διάχυσης διαφέρουν σημαντικά καθώς οι πρώτοι αντιπροσωπεύουν αμφίδρομη κατεύθυνση, ενώ οι πρώτοι μονόδρομη. Ο αλγόριθμος SIMPLEST αντιμετωπίζει αυτούς τους δύο όρους διαφορετικά, διαχωρίζοντάς τον αρχικό όρο σε δύο, δηλαδή,  $a_N = c_N + d_N$ , κτλ. Έτσι, οι όροι στη διακριτοποιημένη εξίσωση των πεπερασμένων όγκων γράφονται ως εξής:

$$aP * uP = cN * uN + dN * uN + cS * uS + dS * uS + etc \quad (4.52)$$

Το επόμενο βήμα είναι ο διαχωρισμός των όρων συναγωγής από τους όρους διάχυσης και η τοποθέτηση αυτών με τους όρους πηγής στο ισοζύγιο της ορμής, όπου αντιμετωπίζονται ως γνωστές σταθερές. Έτσι:

$$aP * uP = dN * uN + dS * uS + etc + (cN * uN + cS * uS + etc + \text{πηγές}) \quad (4.53)$$

Με τον τρόπο αυτό, ο όρος διόρθωσης του  $u_N$  αποτελείται μόνο από συντελεστές  $d_N$ . Ο αλγόριθμος SIMPLEST με τον τρόπο αυτό μπορεί να συγκλίνει πολύ πιο ομαλά από τον προκάτοχό του, αλγόριθμο SIMPLE και με χρήση αρκετά μικρότερης υπο-χαλάρωσης.



## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5: ΑΝΑΛΥΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ

### 5.1. Βασικά στοιχεία μεθόδων

Οι μέθοδοι που αναπτύχθηκαν αποτελούν έναν ευέλικτο συνδυασμό τεχνικών και μεθόδων που βασίζονται στη φιλοσοφία Taguchi, τη θεωρία της εντροπίας ή την ανάλυση κύριων συνιστωσών, για τον υπολογισμό των συντελεστών βαρύτητας και τη θεωρία των γκρίζων συστημάτων ή την έννοια της γεωμετρικής απόστασης.

Οι μέθοδοι επιτρέπουν:

- τη μοντελοποίηση του πολυκριτηριακού προβλήματος με έναν τρόπο σαφή που περιγράφει τις ιδιαιτερότητες των κριτηρίων, των προτιμήσεων και των περιορισμών του προβλήματος.
- την αλληλεπίδραση των μεθόδων με εναλλακτικές τεχνικές, ώστε να επιτρέπεται η βελτιστοποίηση και η εξισορρόπηση των επιδόσεων σύμφωνα με τους περιορισμούς και τους στόχους.
- τη δυνατότητα ευέλικτης μοντελοποίησης σύνθετων προβλημάτων με εύκολη προσθήκη κριτηρίων ή εναλλακτικών.

Οι μέθοδοι στηρίζονται:

- 1) στη μοντελοποίηση του προβλήματος μέσω του εμπορικού πακέτου υπολογιστικής ρευστοδυναμικής Phoenics.
- 2) την ανάλυση της σημασίας των κριτηρίων μέσω της εντροπίας και της ανάλυσης κύριων συνιστωσών.
- 3) στη διαμόρφωση και επίλυση διαφορετικών σεναρίων του μοντέλου μέσω ορθογώνιων πινάκων που προτείνει η μέθοδος Taguchi.
- 4) στην αξιολόγηση των αποτελεσμάτων της επίλυσης με τη μέθοδο GRA (Grey Relational Analysis) που βασίζεται στη θεωρία των γκρίζων συστημάτων (Grey Systems Theory) ή με τη μέθοδο

TOPSIS που βασίζεται στην ευκλείδεια απόσταση από την καλύτερη εναλλακτική επιλογή.

- 5) στην ανάλυση ευαισθησίας των αποτελεσμάτων και την επιβεβαίωση των προτεινόμενων συνθηκών βέλτιστης λειτουργίας.

Τα βήματα που εφαρμόζονται για το σχεδιασμό μίας ποιοτικής διεργασίας, παρουσιάζονται συνοπτικά παρακάτω (Roy, 2010):

1. Ταυτοποίηση προβλήματος - Καθορισμός στόχων
2. Καταιγισμός Ιδεών - Καθορισμός παραγόντων ελέγχου (παράμετροι και επίπεδα αυτών)
3. Πειραματικός σχεδιασμός - Διαμόρφωση ορθογώνιων πινάκων για τον καθορισμό συγκεκριμένων προσομοιώσεων
4. Διεξαγωγή προσομοιώσεων - Εξαγωγή αποτελεσμάτων των στόχων
5. Ανάλυση αποτελεσμάτων - Χρήση του λόγου σήματος προς θόρυβο (S/N ratio) από τη μέθοδο Taguchi. Στην περίπτωση πολυκριτηριακής βελτιστοποίησης χρησιμοποιούνται συγκεκριμένες μεθοδολογίες για τη μετατροπή του προβλήματος πολλών στόχων σε πρόβλημα ενός στόχου. Στη συνέχεια, γίνεται ο καθορισμός των βέλτιστων επιπέδων για όλους τους παράγοντες. Τέλος, ακολουθεί η ανάλυση διασποράς (ANOVA) για την εύρεση της μεταβλητής εκείνης που έχει μεγαλύτερη συνεισφορά στον καθορισμό της συμπεριφοράς των στόχων.
6. Επιβεβαίωση προσομοίωσης - Επικύρωση αποτελεσμάτων

## 5.2. Μελέτη περίπτωσης - Παρουσίαση αποτελεσμάτων

### 5.2.1. Εφαρμογή μεθοδολογιών Taguchi - TOPSIS και Taguchi - GRA

Για την εύρεση των βέλτιστων συνθηκών λειτουργίας ενός αντιδραστήρα χημικής απόθεσης από ατμό τα βήματα που ακολουθούνται διαμορφώνονται ως εξής:

1. Καθορίζονται οι στόχοι που περιλαμβάνουν το μέγιστο ρυθμό απόθεσης και ταυτόχρονα μικρότερη ανομοιομορφία παραγόμενου στερεού υμενίου.
2. Οι μεταβλητές ελέγχου που επιλέγονται είναι: η πίεση λειτουργίας του αντιδραστήρα, η παροχή του κύριου αντιδρώντος συστατικού (εξαφθοριούχο βολφράμιο,  $WF_6$ ) και η θερμοκρασία απόθεσης. Τα επίπεδα που επιλέγονται είναι τρία για κάθε μεταβλητή και παρατίθενται στον παρακάτω πίνακα:

Πίνακας 5.1: Μεταβλητές ελέγχου με τα αντίστοιχα επίπεδα

	Πίεση P (atm)	Παροχή Q (sccm)	Θερμοκρασία T (°C)
<b>Επίπεδο 1</b>	0,1	100	340
<b>Επίπεδο 2</b>	1	200	440
<b>Επίπεδο 3</b>	2	300	540

3. Επιλογή προκαθορισμένων σεναρίων σύμφωνα με τους ορθογώνιους πίνακες. Στην εξεταζόμενη περίπτωση που περιλαμβάνει 3 μεταβλητές με 3 επίπεδα χρησιμοποιείται ένας  $L_9$  ορθογώνιος πίνακας.

Πίνακας 5.2: Ορθογώνιος πίνακας L9

Προσομοίωση	Πίεση P (atm)	Παροχή Q (sccm)	Θερμοκρασία T (°C)
1	0,1	100	340
2	0,1	200	440
3	0,1	300	540
4	1	100	440
5	1	200	540
6	1	300	340
7	2	100	540
8	2	200	340
9	2	300	540

4. Για την εξαγωγή των αριθμητικών αποτελεσμάτων χρησιμοποιείται ο κώδικας του υπολογιστικού λογισμικού Phoenics για αριθμητική επίλυση του συστήματος των διαφορικών εξισώσεων.

Πίνακας 5.3: Αποτελέσματα Phoenics για ρυθμό απόθεσης και ανομοιομορφία

Προσομοίωση	Ρυθμός απόθεσης (A/min)	Ανομοιομορφία u(%)
1	43,86	0,001667
2	272,64	0,005538
3	917,65	0,014617
4	581,55	0,817239
5	1168,59	1,885877
6	125,95	0,004327
7	753,87	3,847798
8	179,49	0,008368
9	932,23	0,064448

5. Στην ανάλυση των αποτελεσμάτων ακολουθούνται τα εξής βήματα:

- 1) Κάνοντας χρήση των λόγων S/N στις τιμές των αριθμητικών αποτελεσμάτων των στόχων με τη συνάρτηση που πρότεινε ο Taguchi ανάλογα με το στόχο. Για την περίπτωση του ρυθμού απόθεσης χρησιμοποιείται η σχέση 1.2 , ενώ για



την περίπτωση της ανομοιομορφίας του παραγόμενου υμενίου γίνεται χρήση της σχέσης 1.1 .

Πίνακας 5.4: S/N Αποτελέσματα για ρυθμό απόθεσης και ανομοιομορφία

Προσομοίωση	Depo (A/min)	u(%)
1	32,84126	55,56291
2	48,71195	71,4336
3	59,25356	36,70304
4	55,2917	1,753017
5	61,35324	-5,51027
6	42,00406	47,27613
7	57,54598	-11,7042
8	45,08057	41,54717
9	59,39043	23,81583

- 2) Μετατροπή του προβλήματος πολλών στόχων σε πρόβλημα ενός στόχου. Οι δύο μεθοδολογίες που χρησιμοποιούνται είναι η Grey Relational Analysis (GRA) και η TOPSIS. Και για τις δύο μεθοδολογίες απαιτείται για να σταθμίσουμε τα αποτελέσματα να υπολογίσουμε ένα αθροιστικό συντελεστή στάθμισης. Υπάρχουν μεθοδολογίες για να υπολογίσουμε αυτούς τους συντελεστές. Επιλέγεται η μεθοδολογία εντροπίας (Entropy method) ή η ανάλυση κύριων συνιστωσών (Principal Component Analysis PCA). Η πληροφορία λαμβάνεται από τις προκαθορισμένες προσομοιώσεις.

Ο υπολογισμός των συντελεστών βαρύτητας με τη μέθοδο της εντροπίας έγινε με βάση την μεθοδολογία που παρουσιάστηκε στο κεφάλαιο 2 (παράγραφος 2.4.2.1). Οι συντελεστές που προέκυψαν είναι 0,2 για το ρυθμό απόθεσης και 0,8 για την ανομοιομορφία. Παρόμοιους συντελεστές πήραμε και με την μέθοδο της ανάλυσης των κύριων συνιστωσών (PCA) που παρουσιάστηκε στο κεφάλαιο 2 (παράγραφος 2.4.2.2).

Στη συνέχεια με εφαρμογή των μεθοδολογιών, όπως αυτές αναπτύχθηκαν στο κεφάλαιο 2 οδηγούν στα παρακάτω αποτελέσματα:

### Μέθοδος TOPSIS

Η πρώτη μέθοδος που εφαρμόζεται είναι η μέθοδος TOPSIS (The Technique for Order Preference by Similarity to Ideal Solution). Πρώτο βήμα είναι η κανονικοποίηση του πίνακα 5.4 με τη βοήθεια της σχέσης 2.9.

Πίνακας 5.5: Κανονικοποίηση αποτελεσμάτων πίνακα 5.4

Ρυθμός απόθεσης (A/min)	Ανομοιομορφία $u(\%)$
0.061185	0.330108
0.090754	0.424398
0.110393	0.218059
0.103012	0.010415
0.114305	-0.03274
0.078256	0.280875
0.107212	-0.06954
0.083988	0.246838
0.110648	0.141494

Στη συνέχεια, υπολογίζεται η Ευκλείδεια σχετική απόσταση των λύσεων από μία φανταστική ιδανική λύση. Η λύση που πλησιάζει περισσότερο την ιδανική λύση και απομακρύνεται περισσότερο από την αρνητική-ιδανική λύση, επιλέγεται ως η βέλτιστη. Η Ευκλείδεια απόσταση μεταξύ κάθε λύσης και της ιδανικής και αρνητικής-ιδανικής λύσης υπολογίζεται από τις σχέσεις 2.10, 2.11 αντίστοιχα. Τέλος, γίνεται ο υπολογισμός του συντελεστή σύγκλισης στην ιδανική επίλυση και κατάταξη. Ο συντελεστής σύγκλισης  $C_i$  που δείχνει πόσο πλησιάζει η λύση την ιδανική λύση, δίνεται από τη σχέση 2.12.

Πίνακας 5.6: Υπολογισμός συντελεστή σύγκλισης  $C_i$  μεθόδου TOPSIS

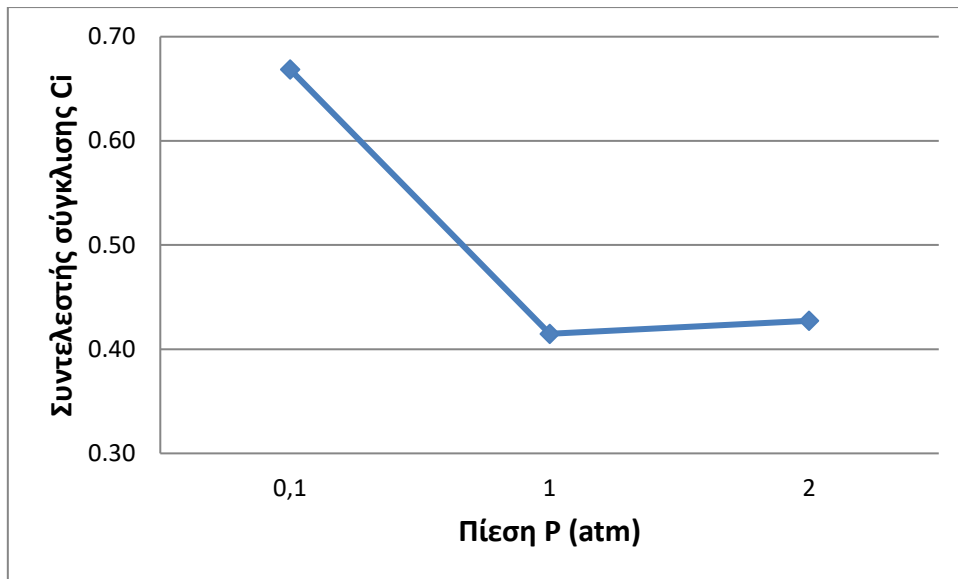
Προσομοίωση	Συντελεστής Σύγκλισης $C_i$
1	0.622
2	0.825
3	0.559
4	0.349
5	0.307
6	0.589
7	0.233
8	0.561
9	0.488

Κατόπιν γίνεται υπολογισμός των μέσων τιμών του συντελεστή  $C_i$  του TOPSIS για τα επίπεδα και τους παράγοντες της προσομοίωσης\_με βάση τα αποτελέσματα του πίνακα 5.6 .

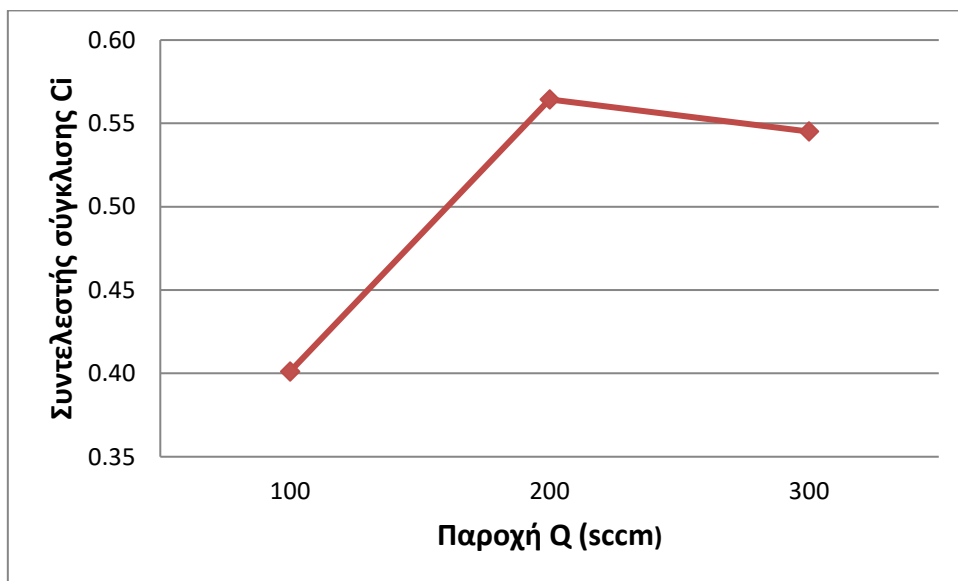
Πίνακας 5.7: Μέσες τιμές του συντελεστή TOPSIS για τους παράγοντες και τα επίπεδα της προσομοίωσης

Μεταβλητή	TOPSIS		
	Πίεση P (atm)	Παροχή Q (scm)	Θερμοκρασία T (°C)
Επίπεδο 1	<b>0.669</b>	<b>0.401</b>	<b>0.591</b>
Επίπεδο 2	<b>0.415</b>	<b>0.564</b>	<b>0.554</b>
Επίπεδο 3	<b>0.427</b>	<b>0.545</b>	<b>0.366</b>
Μέγιστο - Ελάχιστο	0.254	0.163	0.224
Κατάταξη	1	3	2
Μέσος όρος	0.504	0.503528	0.503528

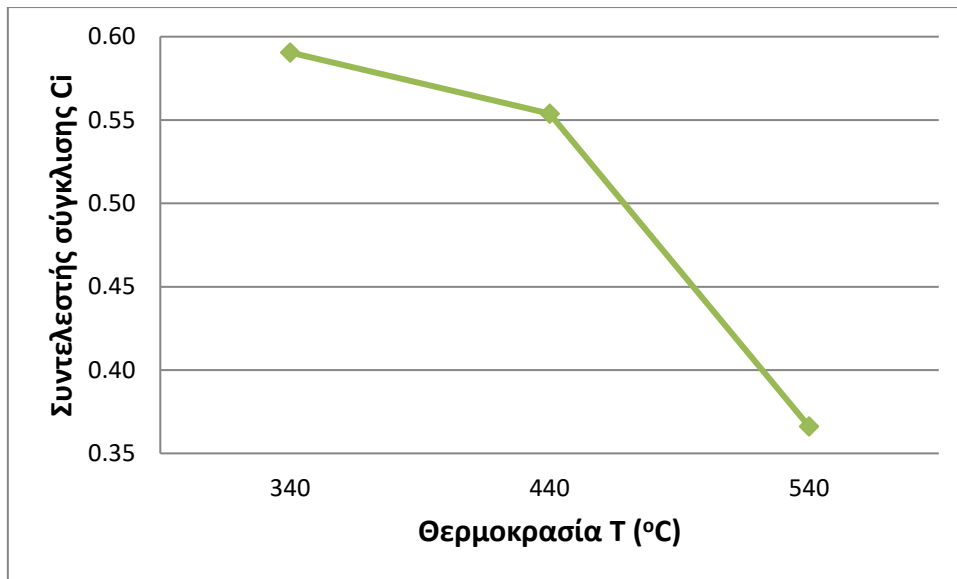
Ακολουθούν τα διαγράμματα με τα βέλτιστα επίπεδα για κάθε μεταβλητή.



Σχήμα 5.1: Επίδραση πίεσης επί του μέσου όρου του συντελεστή σύγκλισης Ci



Σχήμα 5.2: Επίδραση παροχής επί του μέσου όρου του συντελεστή σύγκλισης Ci



Σχήμα 5.3: Επίδραση θερμοκρασίας επί του μέσου όρου του συντελεστή σύγκλισης Ci

Στον παρακάτω πίνακα παρουσιάζονται συνοπτικά οι συνθήκες λειτουργίας του αντιδραστήρα σύμφωνα με τη μέθοδο TOPSIS.

Πίνακας 5.8 : Βέλτιστες συνθήκες λειτουργίας αντιδραστήρα με τη μέθοδο TOPSIS

Βέλτιστες Συνθήκες Λειτουργίας – Μέθοδος TOPSIS	
Πίεση P (atm)	0,1
Παροχή Q (sccm)	200
Θερμοκρασία T (°C)	340

Τέλος, ακολουθεί η ανάλυση διασποράς (ANOVA) για την εκτίμηση της μεταβλητής που έχει τη μεγαλύτερη επίδραση στο αποτέλεσμα.

Πίνακας 5.9: Αποτελέσματα ανάλυσης διασποράς για τον συντελεστή TOPSIS

ANOVA						
	DOF	SS	MS	F	P	%
Πίεση P	2	0.1228	0.0614	1.4309	0.4113	35.77
Παροχή Q	2	0.0477	0.0239	0.5563	0.6425	13.90
Θερμοκρασία T	2	0.0869	0.0434	1.0126	0.4968	25.32
Σφάλμα	2	0.0858	0.0429			
Συνολικά	8	0.3434				

Από τον πίνακα 5.9 φαίνεται ότι μεγαλύτερη επίδραση έχει η πίεση P (36%), ακολουθεί η θερμοκρασία αντίδρασης (25%) και μικρότερη συνεισφορά έχει η παροχή (14%).

### Μέθοδος GRA

Το πρώτο βήμα της μεθόδου GRA είναι η κανονικοποίηση των δεδομένων για κάθε ποιοτικό χαρακτηριστικό, που βρίσκονται στον πίνακα αποφάσεων και γίνεται με βάση την επιθυμητή συμπεριφορά του καθενός. Στην εξεταζόμενη περίπτωση γίνεται χρήση της σχέσης 2.2 καθώς πρόκειται για πρόβλημα μεγιστοποίησης ως προς τους δύο στόχους.

Το επόμενο βήμα είναι ο υπολογισμός του συντελεστή κατάστασης, ο οποίος αναφέρεται στη σχέση ενός παράγοντα με τη βέλτιστη επίδοση. Ο υπολογισμός αυτής της τιμής του συντελεστή κατάστασης  $\xi_i(k)$  (grey relational coefficient) δίνεται από τη σχέση 2.3 .

Πίνακας 5.10 : Υπολογισμός του συντελεστή κατάστασης για κάθε στόχο

Ρυθμός απόθεσης (A/min)	Ανομοιομορφία u(%)
0.333333	0.723698
0.530016	1
0.871624	0.544813
0.701659	0.373655
1	0.350755
0.42422	0.632454
0.789226	0.333333
0.466971	0.581747
0.878979	0.466089

Ο υπολογισμός του βαθμού σχετικότητας (grey relational grade) βασίζεται στη σχέση 2.8 .

Πίνακας 5.11: Υπολογισμός βαθμού σχετικότητας γι

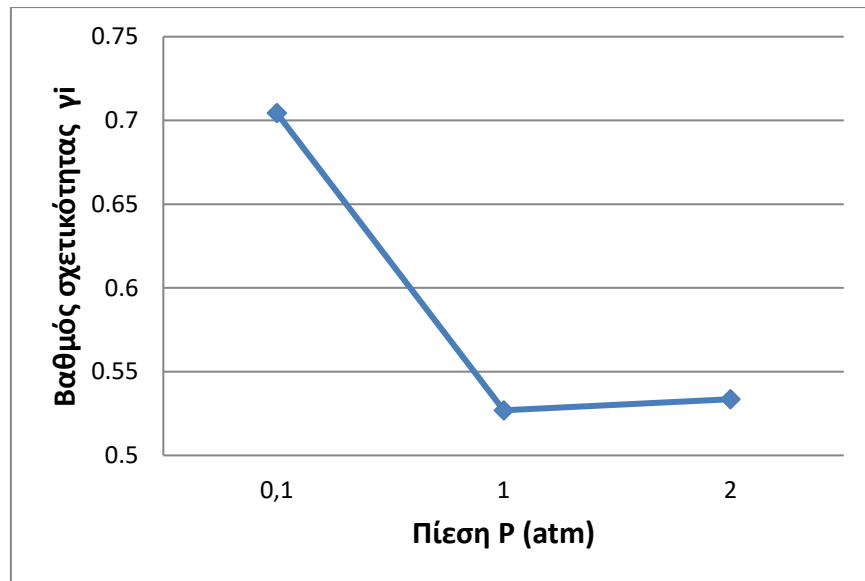
Προσομοίωση	Βαθμός σχετικότητας (γ <sub>i</sub> )
1	0.610049
2	0.863172
3	0.639958
4	0.469148
5	0.539772
6	0.57183
7	0.466059
8	0.548332
9	0.586295

Κατόπιν γίνεται υπολογισμός των μέσων τιμών του βαθμού σχετικότητας γ<sub>i</sub> της μεθόδου GRA για τα επίπεδα και τους παράγοντες της προσομοίωσης, με βάση τα αποτελέσματα του πίνακα 5.10 .

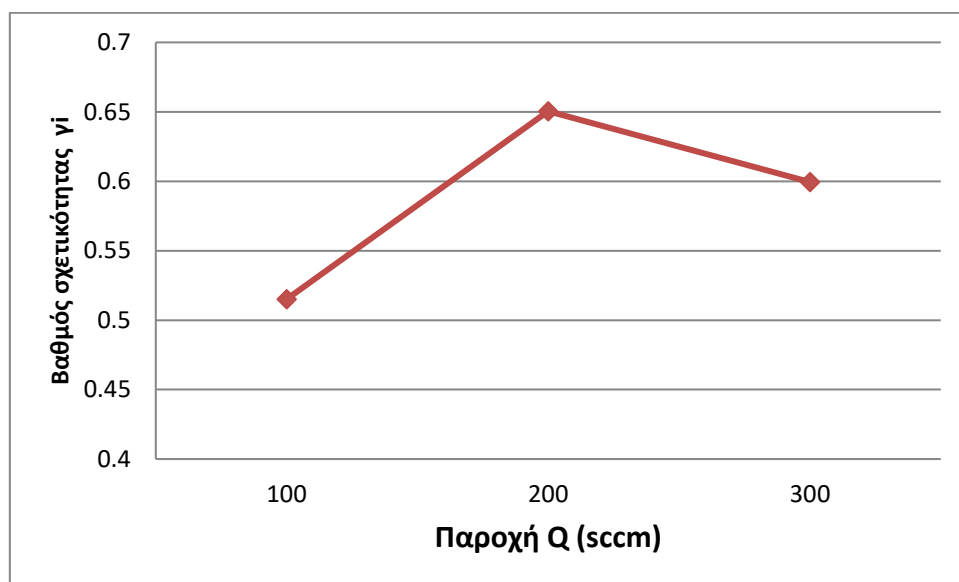
Πίνακας 5.12: Μέσες τιμές του βαθμού σχετικότητας για τους παράγοντες και τα επίπεδα της προσομοίωσης

Μεταβλητή	GRA		
	Πίεση P (atm)	Παροχή Q (sccm)	Θερμοκρασία T (°C)
Επίπεδο 1	0.704	0.515	0.577
Επίπεδο 2	0.527	0.650	0.639
Επίπεδο 3	0.533	0.599	0.548
Ελάχιστο - Μέγιστο	0.177	0.135	0.091
Κατάταξη	1	2	3
Μέσος όρος	0.588	0.588	0.588

Ακολουθούν τα διαγράμματα με τα βέλτιστα επίπεδα για κάθε μεταβλητή.

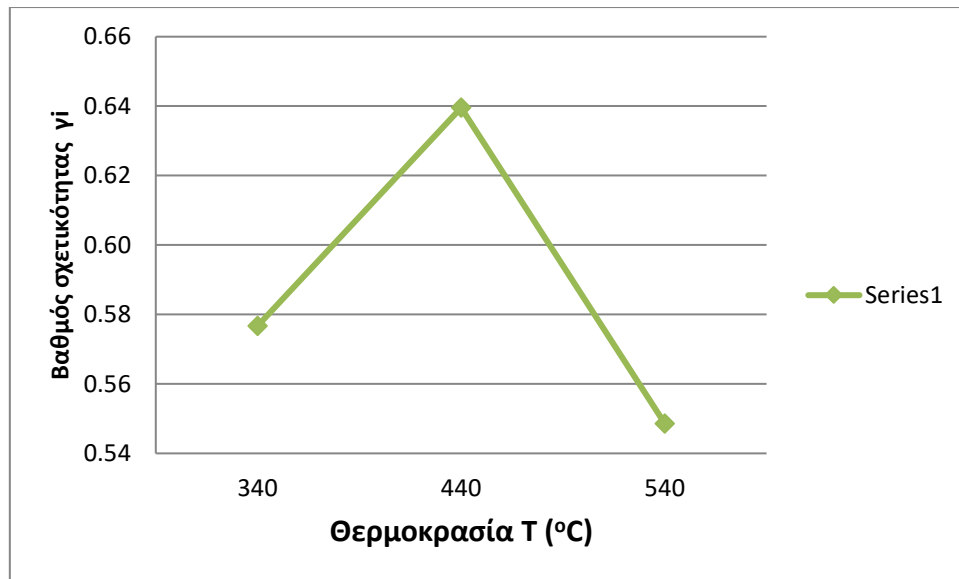


Σχήμα 5.4: Επίδραση πίεσης επί του μέσου όρου του βαθμού σχετικότητας  $\gamma_i$



Σχήμα 5.5: Επίδραση παροχής επί του μέσου όρου του βαθμού σχετικότητας  $\gamma_i$





Σχήμα 5.6: Επίδραση θερμοκρασίας επί του μέσου όρου του βαθμού σχετικότητας γ<sub>i</sub>

Στον παρακάτω πίνακα παρουσιάζονται συνοπτικά οι συνθήκες λειτουργίας του αντιδραστήρα σύμφωνα με τη μέθοδο GRA.

Πίνακας 5.13 : Βέλτιστες συνθήκες λειτουργίας αντιδραστήρα με τη μέθοδο GRA

Βέλτιστες Συνθήκες Λειτουργίας – Μέθοδος GRA	
Πίεση P (atm)	0,1
Παροχή Q (sccm)	200
Θερμοκρασία T (°C)	440

Τέλος, ακολουθεί η ανάλυση διασποράς (ANOVA για τον προσδιορισμό της μεταβλητής που έχει τη μεγαλύτερη επίδραση στο αποτέλεσμα.

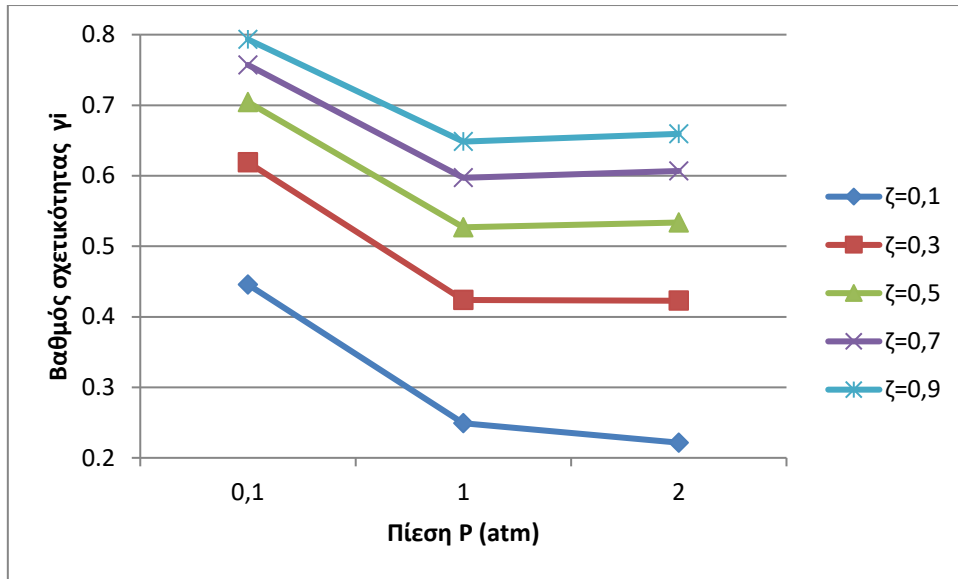
Πίνακας 5.14: Αποτελέσματα ανάλυσης διασποράς για το βαθμό σχετικότητας

ANOVA						
	DOF	SS	MS	F	P	%
Πίεση P	2	0.0607	0.0304	1.7903	0.3584	44.76
Παροχή Q	2	0.0280	0.0140	0.8263	0.5477	20.66
Θερμοκρασία T	2	0.0130	0.0065	0.3834	0.7228	9.59
Σφάλμα	2	0.0339	0.01696			
Συνολικά	8	0.1357				

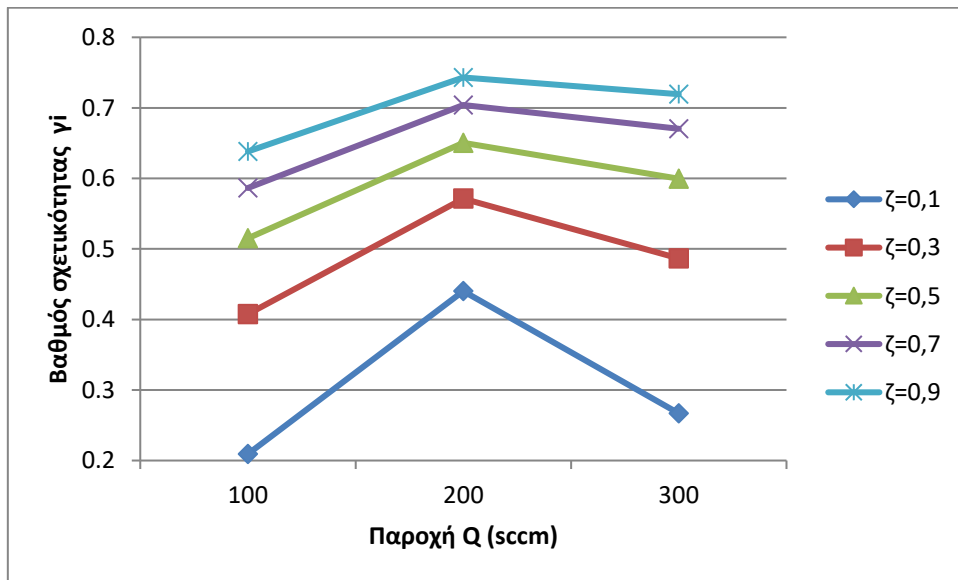
Στον πίνακα 5.12 φαίνεται ότι μεγαλύτερη επίδραση έχει η πίεση P με ποσοστό 45%, ακολουθεί η παροχή Q με ποσοστό 21% και μικρότερη συνεισφορά έχει η θερμοκρασία αντίδρασης  $T_{\text{react}}$  με ποσοστό 10%

- 3) Η ανάλυση διασποράς (ANOVA) δείχνει την παράμετρο που έχει τη μεγαλύτερη συνεισφορά στο αποτελέσμα. Με την εφαρμογή της ανάλυσης διασποράς στα αποτελέσματα που προέκυψαν από την εφαρμογή των δύο μεθοδολογιών δηλαδή της Taguchi-TOPSIS και της Taguchi-GRA διαπιστώθηκε ότι, και στις δύο περιπτώσεις, μεγαλύτερη συνεισφορά έχει η πίεση λειτουργία του αντιδραστήρα.
- 4) Πραγματοποιείται ανάλυση παλινδρόμησης (regression analysis) η οποία δεν οδήγησε σε κανένα αξιοσημείωτο αποτέλεσμα.
- 5) Στη μέθοδο Grey Relational Analysis (GRA) πραγματοποιήθηκε η ανάλυση ευαισθησίας που μελετά τις συνέπειες που υφίσταται η βέλτιστη λύση ενός γραμμικού μοντέλου ως συνέπεια των μεταβολών στις τιμές των παραμέτρων του. Στη συγκεκριμένη περίπτωση, η παράμετρος ως προς την οποία γίνεται η ανάλυση ευαισθησίας, είναι ο συντελεστής διαφοροποίησης ( $\zeta$ ) που χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό του συντελεστή

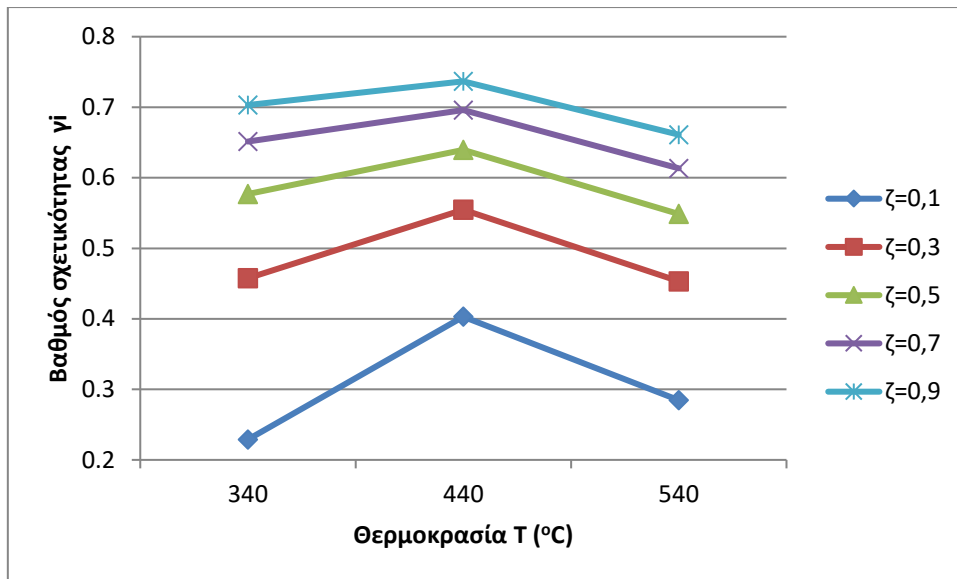
κατάστασης (σχέση 2.3) κατά την εφαρμογή της μεθόδου Grey Relational Analysis (GRA).



Σχήμα 5.7: Ανάλυση ευαισθησίας ως προς συντελεστή διαφοροποίησης στην επίδραση πίεσης επί του μέσου όρου του βαθμού σχετικότητας  $\gamma_i$



Σχήμα 5.8: Ανάλυση ευαισθησίας ως προς συντελεστή διαφοροποίησης στην επίδραση παροχής επί του μέσου όρου του βαθμού σχετικότητας  $\gamma_i$



Σχήμα 5.9: Ανάλυση ευαισθησίας ως προς συντελεστή διαφοροποίησης στην επίδραση θερμοκρασίας επί του μέσου όρου του βαθμού σχετικότητας  $\gamma_i$

## 6. Επιβεβαίωση προσομοίωσης

Για την επιβεβαίωση των αποτελεσμάτων και τον έλεγχο της αξιοπιστίας αυτών πραγματοποιούνται όλες οι προσομοιώσεις με όλους τους πιθανούς συνδυασμούς παραμέτρων-επιπέδων (full factorial analysis), δηλαδή  $3^3=27$  προσομοιώσεις.

Πίνακας 5.15: Πλήρης παραγοντική ανάλυση

Προσομοίωση	Πίεση P (atm)	Παροχή Q (sccm)	Θερμοκρασία T (°C)
1	0,1	100	340
2	0,1	100	440
3	0,1	100	540
4	0,1	200	340
5	0,1	200	440
6	0,1	200	540
7	0,1	300	340
8	0,1	300	440
9	0,1	300	540
10	1	100	340
11	1	100	440
12	1	100	540
13	1	200	340
14	1	200	440
15	1	200	540
16	1	300	340
17	1	300	440
18	1	300	540
19	2	100	340
20	2	100	440
21	2	100	540
22	2	200	340
23	2	200	440
24	2	200	540
25	2	300	340
26	2	300	440
27	2	300	540

Από την πλήρη παραγοντική ανάλυση παρατηρούμε ότι και οι δύο μεθοδολογίες οδηγούν στο ίδιο αποτέλεσμα και προτείνουν ως βέλτιστη την προσομοίωση 5 του πίνακα 5.15.

Με βάση την μεθοδολογία Taguchi-GRA ως βέλτιστη λύση προτείνεται η προσομοίωση 5 του πίνακα 5.15 ενώ με την μεθοδολογία Taguchi-TOPSIS προτείνεται η προσομοίωση 4 του πίνακα 5.15 που όμως δεν είναι η βέλτιστη.

Πίνακας 5.16 : Βέλτιστες συνθήκες λειτουργίας αντιδραστήρα ανά μέθοδο

Βέλτιστες συνθήκες λειτουργίας αντιδραστήρα				
	TOPSIS-Taguchi	GRA- Taguchi	TOPSIS- Πλήρης	GRA- Πλήρης
<b>Πίεση P (atm)</b>	0,1	0,1	0,1	0,1
<b>Παροχή Q (scm)</b>	200	200	200	200
<b>Θερμοκρασία T (°C)</b>	340	440	440	440

Επομένως, η μεθοδολογία GRA εντοπίζει τη βέλτιστη λύση ενώ η TOPSIS αδυνατεί να την εντοπίσει καθώς προτείνει διαφορετική προσομοίωση ως βέλτιστη.

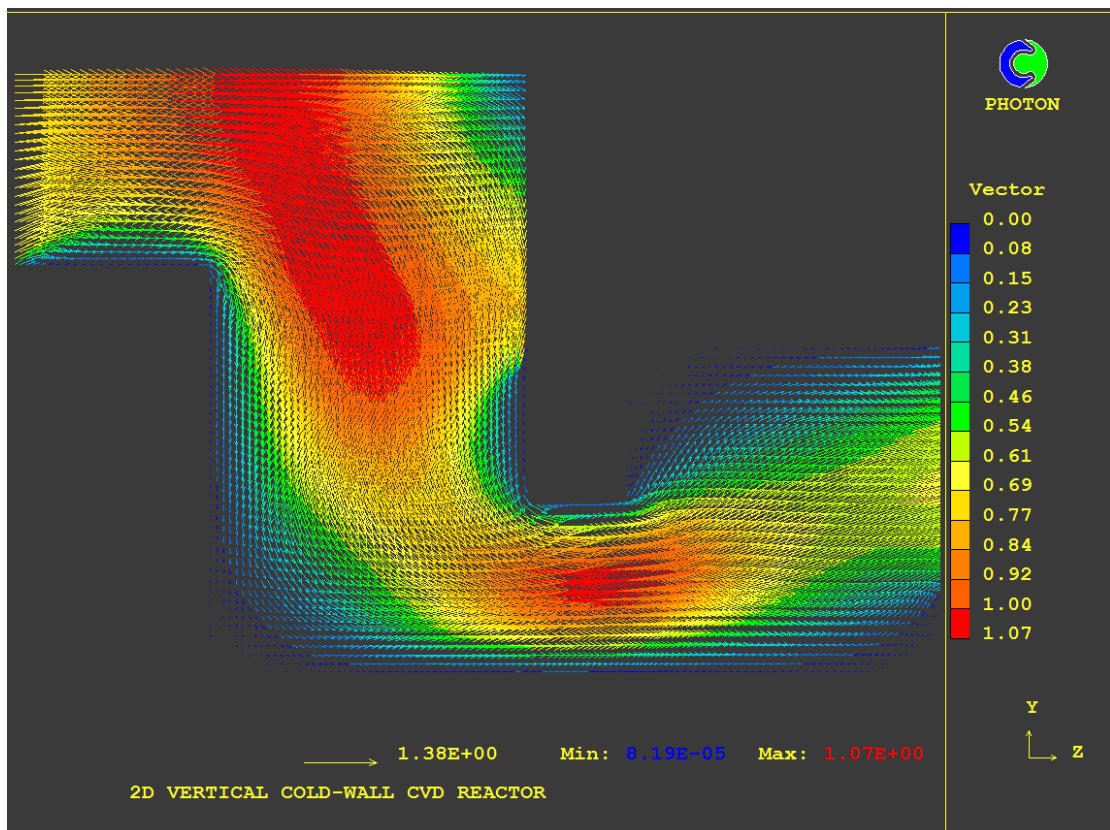
Από την ανάλυση διακύμανσης (ANOVA) και οι δυο μεθοδολογίες προτείνουν ότι την μεγαλύτερη συνεισφορά στο καθορισμό του αποτελέσματος έχει η πίεση λειτουργίας P.

Όταν ο αριθμός των δυνατών προσομοιώσεων είναι απαγορευτικά μεγάλος για να εκτελεστεί η πλήρης παραγοντική ανάλυση τότε ελέγχεται εάν ο βέλτιστος συνδυασμός των παραμέτρων οδηγεί σε καλύτερα αποτελέσματα σε σχέση με μία προσομοίωση αναφοράς.

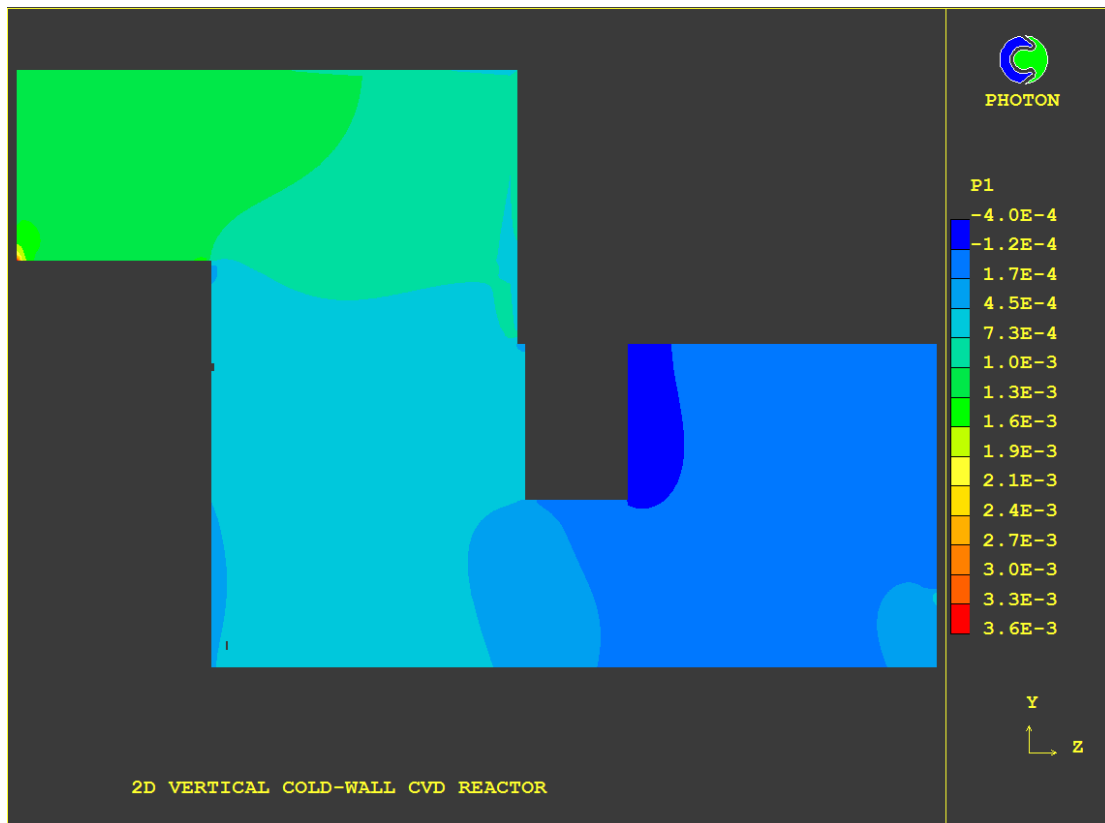
### 5.2.2. Παρουσίαση ισοϋψών καμπύλων μεταβλητών επίλυσης για το βέλτιστο συνδυασμό παραμέτρων

Σε αυτό το σημείο θα γίνει παρουσίαση και σχολιασμός των αποτελεσμάτων που προέκυψαν από το εμπορικό πακέτο υπολογιστικής ρευστοδυναμικής Phoenics για τις μεταβλητές επίλυσης της περίπτωσης των βέλτιστων συνθηκών λειτουργίας.

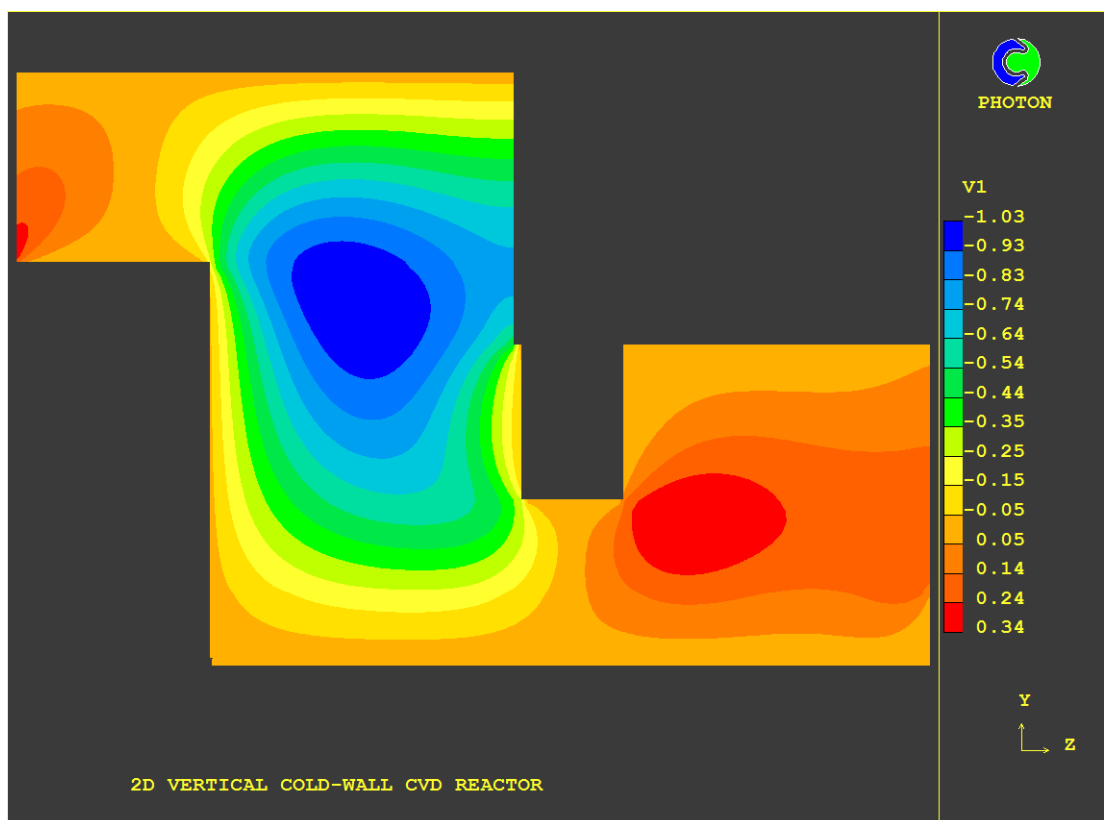
Παρακάτω φαίνονται οι ισοϋψείς καμπύλες και οι ροϊκές γραμμές των μεταβλητών επίλυσης:



Σχήμα 5.10: Απεικόνιση ροϊκών γραμμών για το βέλτιστο συνδυασμό παραμέτρων.

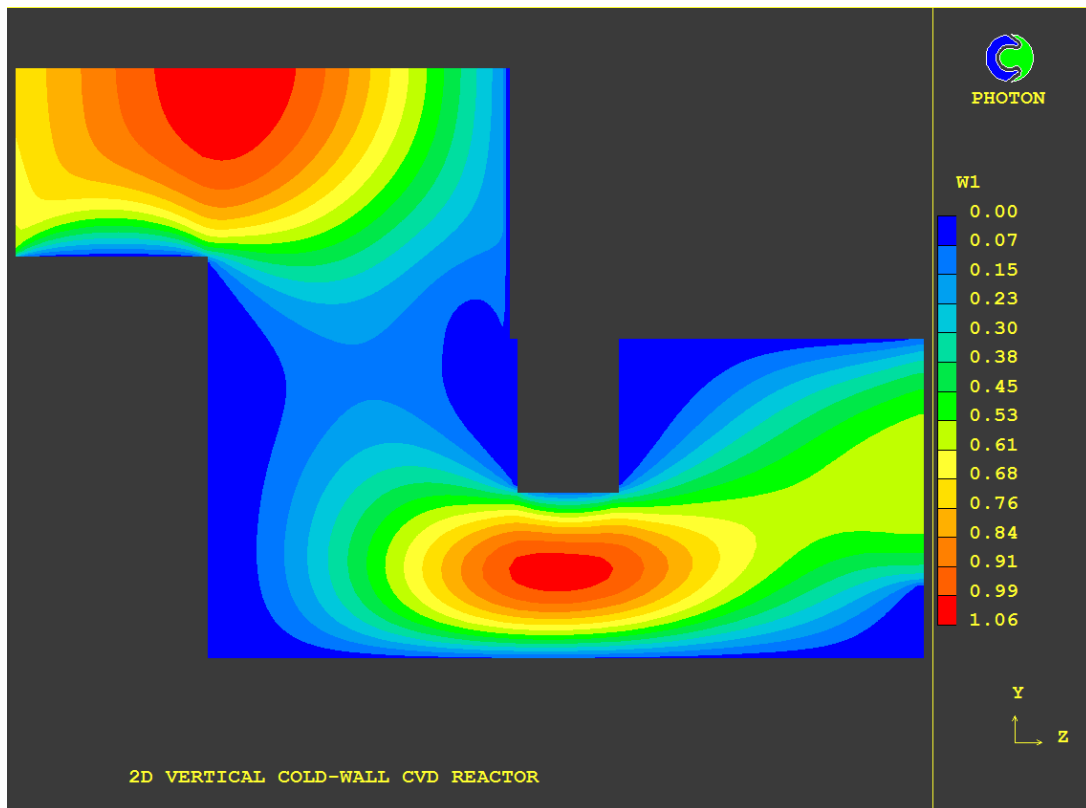


Σχήμα 5.11: Απεικόνιση ισοψής καμπύλης πίεσης για το βέλτιστο συνδυασμό παραμέτρων.

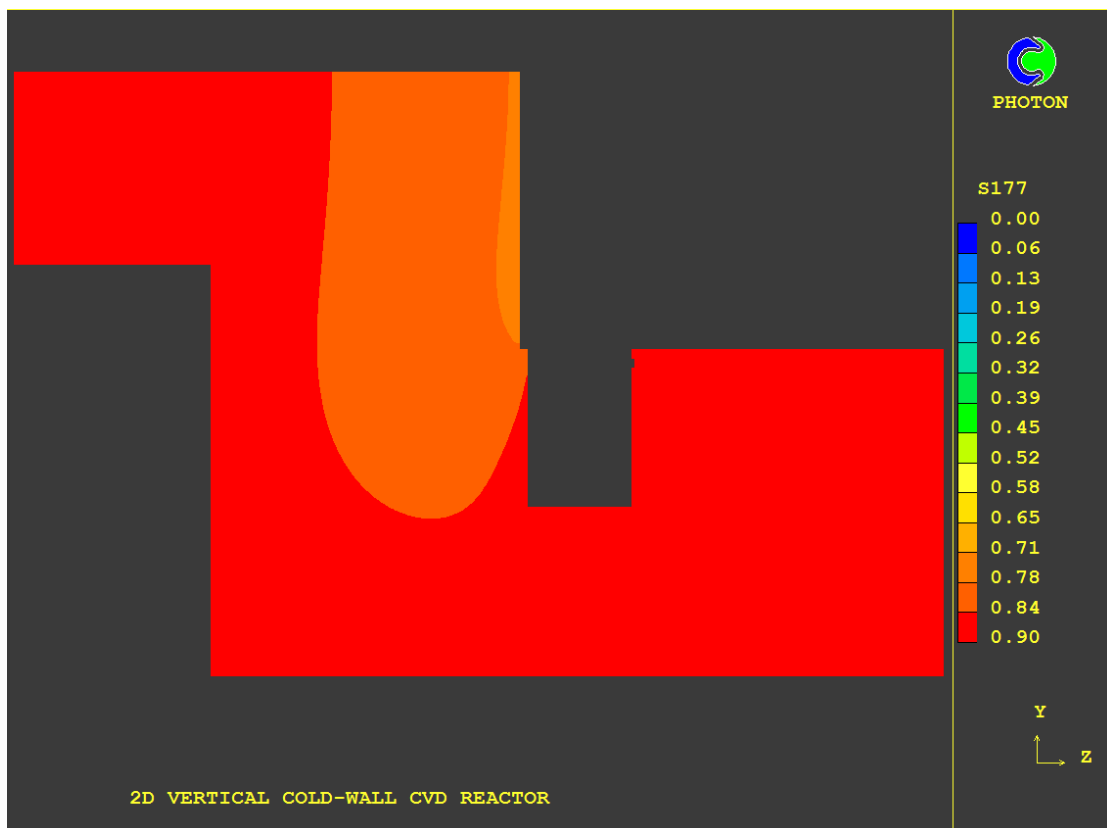


Σχήμα 5.12: Απεικόνιση ισοψής καμπύλης ταχύτητας στην y κατεύθυνση για το βέλτιστο συνδυασμό παραμέτρων.

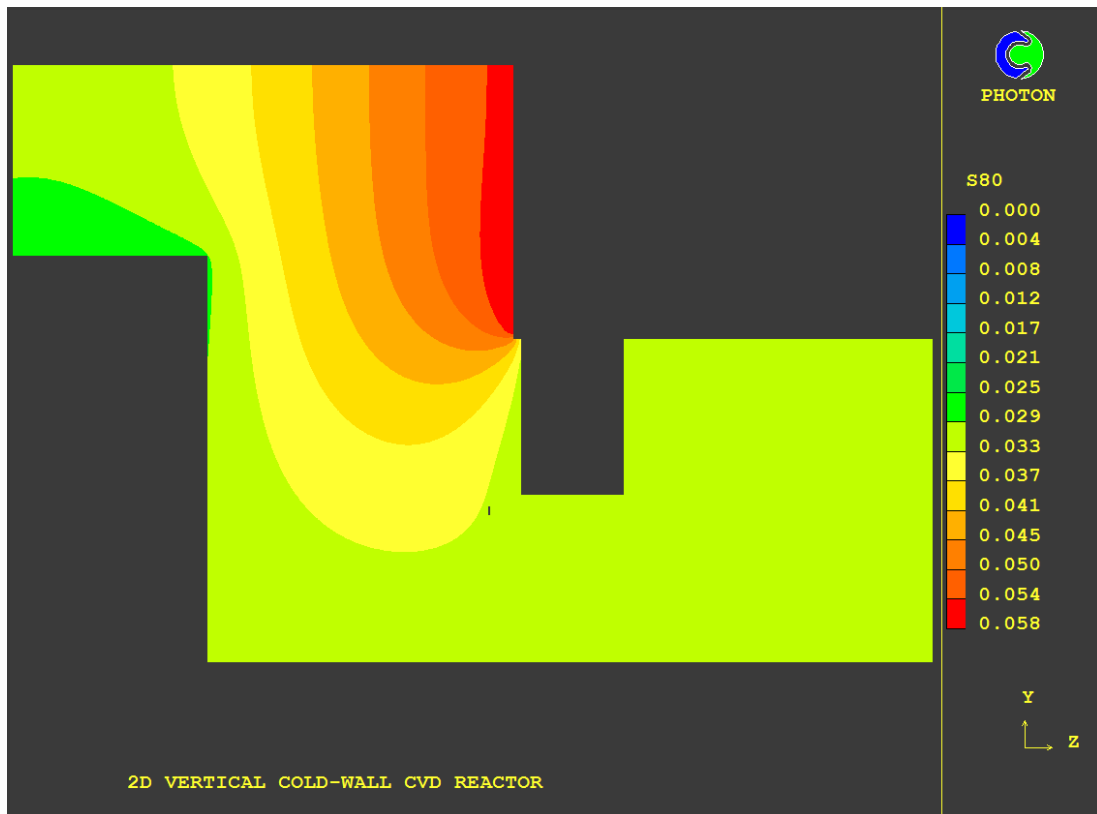




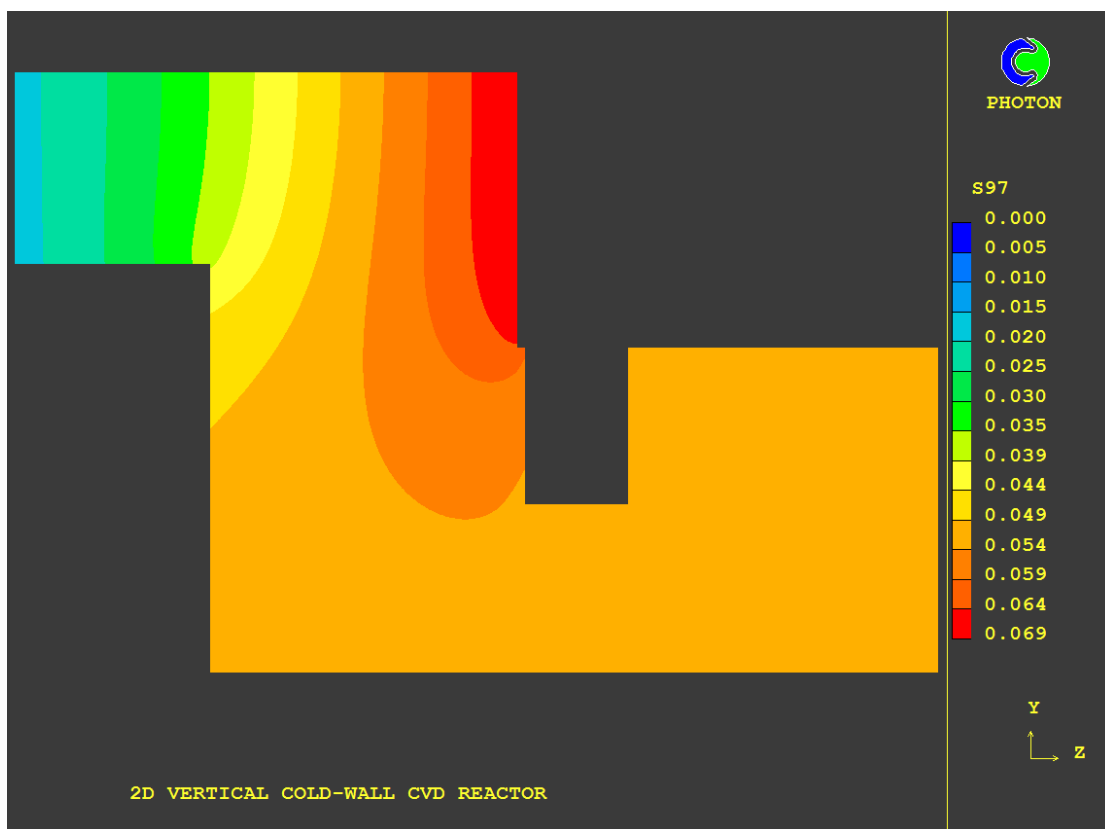
Σχήμα 5.13: Απεικόνιση ισοψής καμπύλης ταχύτητας στην z κατεύθυνση w1 για το βέλτιστο συνδυασμό παραμέτρων.



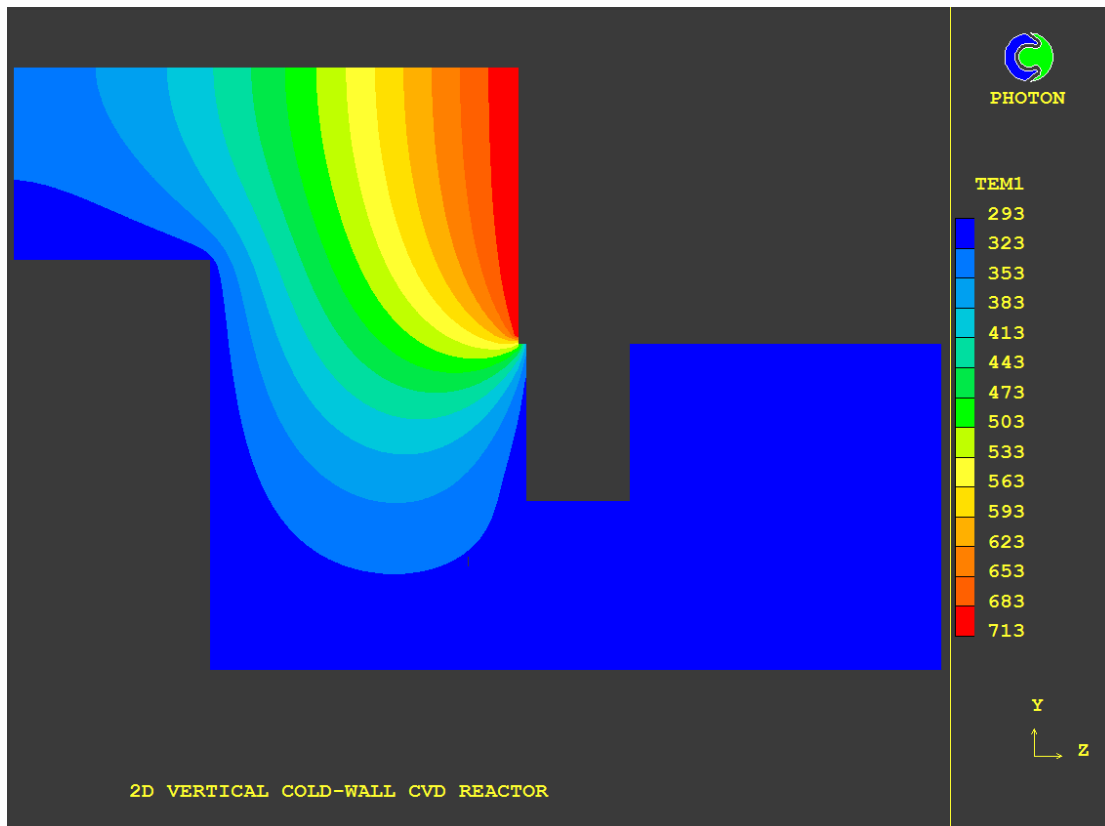
Σχήμα 5.14: Απεικόνιση ισοψής καμπύλης του συστατικού  $WF_6$  για το βέλτιστο συνδυασμό παραμέτρων.



Σχήμα 5.15: Απεικόνιση ισοψής καμπύλης του συστατικού  $H_2$  για το βέλτιστο συνδυασμό παραμέτρων.



Σχήμα 5.16: Απεικόνιση ισοψής καμπύλης του συστατικού  $HF$  για το βέλτιστο συνδυασμό παραμέτρων.



Σχήμα 5.17: Απεικόνιση ισοψής καμπύλης της θερμοκρασίας για το βέλτιστο συνδυασμό παραμέτρων.

Παρατηρούμε τα εξής:

Όσο αφορά την πίεση λειτουργίας, οι μεγαλύτερες τιμές παρατηρούνται κατά απόλυτη τιμή στην είσοδο του αντιδραστήρα ενώ οι μικρότερες τιμές στην έξοδο.

Από την απεικόνιση των ροϊκών γραμμών αλλά και των ταχυτήτων, όπως φαίνονται στα σχήματα 5.10, 5.12 και 5.13, αντίστοιχα, παρατηρείται η ύπαρξη μικρών δινών-ανακυκλοφοριών λόγω της απότομης διεύρυνσης της εισόδου του αντιδραστήρα όπως φαίνεται και στη σχηματική αναπαράσταση του αντιδραστήρα στο σχήμα 4.2.

Με βάση το σχήμα 5.16 παρατηρείται ότι, για τις τιμές της θερμοκρασίας εντός του αντιδραστήρα ισχύουν τα εξής:

- α) λαμβάνει μέγιστη τιμή πάνω στην επιφάνεια απόθεσης.
- β) παρουσιάζει αυξημένες τιμές κοντά στην επιφάνεια απόθεσης.
- γ) η τιμή της θερμοκρασίας στα εσωτερικά τοιχώματα του αντιδραστήρα είναι σταθερή και ίση με 20°C.

Από τις ισοϋψείς καμπύλες των συστατικών στα σχήματα 5.14, 5.15 και 5.16 παρατηρείται ότι το αντιδρών  $WF_6$  έχει μεγαλύτερη τιμή συγκέντρωσης στην είσοδο του αντιδραστήρα. Το  $H_2$  έχει μεγαλύτερες τιμές κοντά στην επιφάνεια απόθεσης όπως και το παραγόμενο παραπροϊόν HF.

### 5.2.3. Επίδραση συντελεστών βαρύτητας στόχων στο προσδιορισμό του βέλτιστου

Ο καθορισμός των συντελεστών βαρύτητας των στόχων είναι ιδιαίτερα σημαντικός στην πολυκριτηριακή ανάλυση καθώς επηρεάζει σημαντικά τις βέλτιστες συνθήκες του αντιδραστήρα.

Στους πίνακες 5.17 και 5.18, παρουσιάζονται τα αποτελέσματα που προέκυψαν με χρήση του ορθογώνιου πίνακα (orthogonal array), για διάφορους συνδυασμούς των συντελεστών βαρύτητας, για τις δύο μεθόδους πολυκριτηριακής ανάλυσης που χρησιμοποιήθηκαν. Αντίστοιχα, στους πίνακες 5.19 και 5.20, παρουσιάζονται τα αποτελέσματα που προέκυψαν από την πλήρη παραγοντική ανάλυση, για τις δύο μεθόδους, TOPSIS και GRA.

Πίνακας 5.17 : Επίδραση συντελεστών βαρύτητας στόχων στο προσδιορισμό του βέλτιστου στη μέθοδο TOPSIS με χρήση ορθογώνιου πίνακα (orthogonal array)

Μέθοδος TOPSIS				
Βάρος 1 (Ρυθμός απόθεσης)	Βάρος 2 (ανομοιομορφία)	Πίεση P (atm)	Παροχή Q (sccm)	Θερμοκρασία T (°C)
0	100	0,1	200	340
30	70	0,1	200	340
50	50	0,1	200	340
70	30	0,1	300	440
100	0	2	200	540

Πίνακας 5.18 : Επίδραση συντελεστών βαρύτητας στόχων στο προσδιορισμό του βέλτιστου στη μέθοδο GRA με χρήση ορθογώνιου πίνακα (orthogonal array)

Μέθοδος GRA				
Βάρος 1 (Ρυθμός απόθεσης)	Βάρος 2 (ανομοιομορφία)	Πίεση P (atm)	Παροχή Q (sccm)	Θερμοκρασία T (°C)
0	100	0,1	200	340
30	70	0,1	200	440
50	50	0,1	200	440
70	30	2	300	540
100	0	2	300	540

Πίνακας 5.19 : Επίδραση συντελεστών βαρύτητας στόχων στο προσδιορισμό του βέλτιστου στη μέθοδο TOPSIS με πλήρη παραγοντική ανάλυση

Μέθοδος TOPSIS				
Βαρος 1 (Ρυθμός απόθεσης)	Βαρος 2 (ανομοιομορφία)	Πίεση P (atm)	Παροχή Q (sccm)	Θερμοκρασία T (°C)
0	100	0,1	200	340
30	70	0,1	200	440
50	50	0,1	200	440
70	30	2	300	540
100	0	2	200	540

Πίνακας 5.20 : Επίδραση συντελεστών βαρύτητας στόχων στο προσδιορισμό του βέλτιστου στη μέθοδο GRA με πλήρη παραγοντική ανάλυση

Μέθοδος GRA				
Βαρος 1 (Ρυθμός απόθεσης)	Βαρος 2 (ανομοιομορφία)	Πίεση P (atm)	Παροχή Q (sccm)	Θερμοκρασία T (°C)
0	100	0,1	200	340
30	70	0,1	200	440
50	50	0,1	200	440
70	30	2	300	540
100	0	2	300	540

Από τα παραπάνω αποτελέσματα εξάγονται τα ακόλουθα συμπεράσματα:

Αρχικά παρατηρούμε ότι οι μεταβολές των συντελεστών βαρύτητας επιφέρουν αλλαγές στις βέλτιστες συνθήκες λειτουργίας του αντιδραστήρα και για τις δύο μεθόδους. Στη συνέχεια, παρατηρείται ότι αντιπαραβάλλοντας τη μέθοδο GRA με πλήρη παραγοντική ανάλυση (πίνακας 5.20) και τη GRA με χρήση ορθογώνιου πίνακα (πίνακας 5.17),

τα αποτελέσματά τους ταυτίζονται. Τα αποτελέσματα της μεθοδολογίας TOPSIS με χρήση του ορθογώνιου πίνακα (πίνακας 5.18) δεν οδηγούν πάντα στο ίδιο αποτέλεσμα με αυτό που προέκυψε από την πλήρη παραγοντική ανάλυση (πίνακας 5.19). Επομένως, διαπιστώνεται ότι η μεθοδολογία GRA είναι καλύτερη για την πρόβλεψη των βέλτιστων συνθηκών λειτουργίας πραγματοποιώντας μόνο τις προσομοιώσεις που καθορίζονται από τον ορθογώνιο πίνακα. Δηλαδή, εκτελώντας το 1/3 των υπολογισμών της πλήρους παραγοντικής ανάλυσης εντοπίζονται οι βέλτιστες συνθήκες, μειώνοντας έτσι το υπολογιστικό κόστος. Επίσης, πρέπει να αναφερθεί ότι και οι δύο μεθοδολογίες στις περιπτώσεις όπου ο ένας στόχος λαμβάνεται να μην έχει καθόλου βάρος (πρόβλημα ενός στόχου), εντοπίζουν και οι δύο με την ίδια επιτυχία τη βέλτιστη λύση με χρήση του ορθογώνιου πίνακα.



## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6: ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ – ΜΕΛΛΟΝΤΙΚΗ ΕΡΕΥΝΑ

### 6.1. Συμπεράσματα εφαρμογής μεθόδων πολυκριτηριακής αξιολόγησης

Αντικείμενο της μεταπτυχιακής εργασίας αποτέλεσε η προσομοίωση ενός αντιδραστήρα χημικής απόθεσης από ατμό καθώς και η ανάπτυξη μεθοδολογιών που βασίζονται στη φιλοσοφία Taguchi και στις πολυκριτηριακές μεθόδους λήψης απόφασης με στόχο την εύρεση των βέλτιστων συνθηκών λειτουργίας του αντιδραστήρα.

Η εφαρμογή των δύο πολυκριτηριακών μεθόδων λήψης απόφασης, της μεθόδου Grey Relational Analysis (GRA), που βασίζεται στη θεωρία γκριζών συστημάτων (Grey Systems Theory) και της μεθόδου Technique for Order Preference by Similarity to Ideal Solution (TOPSIS), που βασίζεται στην έννοια της ευκλείδειας απόστασης, ανέδειξε ιδιαιτερότητες και περιορισμούς, που επηρεάζουν καθοριστικά τα αποτελέσματα καθώς και τη διαδικασία ανάλυσης και αξιολόγησης.

Διαπιστώθηκε ότι η εφαρμογή των εξεταζόμενων μοντέλων στη Διεργασία της Χημικής Απόθεσης από Ατμό δεν οδηγούν στο ίδιο αποτέλεσμα. Συγκεκριμένα, με τη μέθοδο GRA, οι συνθήκες βέλτιστης λειτουργίας που προτείνονται με χρήση του ορθογώνιου πίνακα ταυτίζονται με αυτές της πλήρους παραγοντικής ανάλυσης, εν αντιθέσει με τη μέθοδο TOPSIS κατά την οποία τα αποτελέσματα που προέκυψαν με την χρήση του ορθογώνιου πίνακα κατά Taguchi και της πλήρους παραγοντικής ανάλυσης παρουσίασαν σημαντικές αποκλίσεις. Με εφαρμογή της μεθόδου GRA και χρήση του ορθογώνιου πίνακα κατά Taguchi, εντοπίζεται ο βέλτιστος συνδυασμός των παραμέτρων, μειώνοντας στο 1/3 το υπολογιστικό κόστος σε σχέση με την πλήρη παραγοντική ανάλυση.



Ο υπολογισμός της εντροπίας της πληροφορίας και η ανάλυση κύριων συνιστωσών (PCA) ενίσχυσαν τον καθορισμό των συντελεστών βαρύτητας που παίζουν σημαντικό ρόλο στη χρήση των πολυκριτηριακών μεθόδων λήψης απόφασης. Τόσο ο υπολογισμός των συντελεστών βαρύτητας από την εντροπία της πληροφορίας, όσο και από την ανάλυση κύριων συνιστωσών, ανέδειξαν ότι η ανομοιομορφία του πάχους του παραγόμενου υμενίου έχει μεγαλύτερο συντελεστή από τον άλλο στόχο, το ρυθμό απόθεσης.

Η ανάλυση ευαισθησίας που έγινε στη μέθοδο Grey Relational Analysis (GRA) μελετά τις συνέπειες που υφίσταται η βέλτιστη λύση ως συνέπεια αλλαγών στις τιμές του συντελεστή διαφοροποίησης ( $\zeta$ ). Η ανάλυση ευαισθησίας κατέδειξε τη στιβαρότητα των αποτελεσμάτων της GRA καθώς με μεταβολή του συντελεστή διαφοροποίησης ( $\zeta$ ) τα αποτελέσματα παρέμειναν αναλλοίωτα.

Οι μεταβολές των συντελεστών βαρύτητας επιφέρουν αλλαγές στις βέλτιστες συνθήκες λειτουργίας του αντιδραστήρα και για τις δύο μεθόδους. Τα αποτελέσματα της μεθόδου GRA με πλήρη παραγοντική ανάλυση και της GRA με χρήση ορθογώνιου πίνακα ταυτίζονται σε όλες τις περιπτώσεις. Αντίθετα αποτελέσματα της μεθοδολογίας TOPSIS με χρήση του ορθογώνιου πίνακα δεν οδηγούν πάντα στο ίδιο αποτέλεσμα με αυτό που προέκυψε από την πλήρη παραγοντική ανάλυση.

### 6.2. Μελλοντική έρευνα

Οι προτάσεις για μελλοντική έρευνα συνοψίζονται στις εξής:

- Εφαρμογή των δύο μεθοδολογιών (GRA, TOPSIS) που χρησιμοποιήθηκαν στην παρούσα εργασία, σε σχεδιαστικό πρόβλημα βελτιστοποίησης όπου οι μεταβλητές βελτιστοποίησης θα αφορούν τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του αντιδραστήρα, όπως για παράδειγμα τη διάμετρο εισόδου ή το ύψος του αντιδραστήρα απόθεσης.
- Εφαρμογή των μεθόδων με χρήση μεγαλύτερου αριθμού επιπέδων για τις εξεταζόμενες μεταβλητές βελτιστοποίησης. Σε περιπτώσεις που τα επίπεδα είναι μεγαλύτερα από 4, η πλήρης παραγοντική ανάλυση έχει απαγορευτικά μεγάλο υπολογιστικό κόστος. Σε αυτήν την περίπτωση, θα πρέπει να αναζητηθούν εναλλακτικού τρόποι επαλήθευσης των αποτελεσμάτων.
- Εφαρμογή εναλλακτικών μεθόδων πολυκριτηριακής ανάλυσης, εκτός των δύο που εφαρμόστηκαν στην παρούσα εργασία, σε συνδυασμό με τη φιλοσοφία Taguchi. Μια τέτοια μέθοδος είναι η ELECTRE που ανήκει στην κατηγορία των μεθόδων που βασίζονται σε σχέσεις υπεροχής.
- Εφαρμογή μεθόδων πολυκριτηριακής ανάλυσης σε συνδυασμό με τη φιλοσοφία Taguchi και σε άλλες διεργασίες ή προβλήματα μηχανικής, όπου δεν υπάρχει σχέση που να συνδέει τους στόχους με τις μεταβλητές βελτιστοποίησης.



## Βιβλιογραφικές Αναφορές

Bird R.B., W.E. Stewart and E.N. Lightfoot, Transport Phenomena, J. Wiley & Sons, New York (1960).

CHAM Ltd, PHOENICS Code, Version 3.4, London ([www.cham.co.uk](http://www.cham.co.uk)) (2004).

Chang, T.C., Lin, S.J., Grey relation analysis of carbon dioxide emissions from industrial production and energy uses in Taiwan. Journal of Environmental Management. 1999, 56 (1999).

Davazoglou D., Optical Properties of SnO<sub>2</sub> Thin Films Grown by Atmospheric pressure Chemical Vapour Deposition Oxidizing SnCl<sub>4</sub>, Thin Solid Films, 302(1-2), 204-213 (1997).

Deng J., Introduction to grey system, Journal of Grey System 1 (1) 1–24 (1989).

Deng, J., Control problem of grey systems. Systems and Control Letters (1982).

Duan Wen-Tao, Yuan-Biao Zhang and He Nie, Journals Evaluation and the Application Based on Entropy-TOPSIS, China, Engineering Management Research, Vol. 4 (2015).

Goicoechea A., Hansen R. Don, Duckstein L., Multiobjective decision analysis with engineering and business applications, John Wiley and Sons, Michigan (1982)

Gray, Robert M. Entropy and Information Theory. New York, USA: Springer-Verlag (2009).

Hirschfelder J.O., C.F. Curties and R.B. Bird, Molecular Theory of Gases and Liquids, John Wiley and Sons, New York (1954).

Hwang C. L. and Yoon K., Multiple Attribute Decision Making — Methods and Applications, A State-of-the-Art Survey, Springer - Verlag, New York (1981).

Incropera F.P. and D.P. Dewitt, Fundamentals of Heat and Mass Transfer, 4th Eds., Wiley and Sons (1996).

Itle G.C., Salinger A.G., Pawloski R.P., Shadid J.N., Biegler L.T., A tailored optimization strategy for PDE-based design: Application to a CVD reactor, Comp. and Chem. Eng. 28, 291 (2004).

Jarausch H. , Hackens W., Solving large nonlinear equations by an adaptive condensation process Numer. Math., 50 (1987).

Jenkinson J.P. and R. Pollard, Thermal Diffusion Effects in Chemical Vapor Deposition Reactors, J. Electrochem. Soc., 131(12), 2911-2917 (1984).

Jolliffe I.T., Principal Component Analysis (Springer Series in Statistics) 2nd Edition (2002).

Kacker N. Raghu, Eric S. Lagergren, and James J. Filliben, Taguchi's Orthogonal Arrays Are Classical Designs of Experiments, Gaithersburg, Volume 96, Number 5, September-October (1991).

Kee R.J., F.M. Rupley and J.A. Miller, The CHEMKIN thermodynamic database. Sandia National Laboratories Technical Report, SAND87-8215 (1987).

Kleijn, C. R., Computational modeling of transport phenomena and detailed chemistry in chemical vapor deposition—a benchmark solution, Thin Solid Films 365, 294 (2000).

Kodas T.T. and M.J. Hampden-Smith, The Chemistry of Metal CVD, VCH, Weinheim, New York (1994).

Naumann .Fles., Data fusion and data quality" Institut fur informatik, Humboldt –Universitat ZU Berlin (1998)

Neufeld P.D., A.R. Janze, and R.A. Aziz, Empirical Equations to Calculate 16 of the Transport Collision Integrals  $\Omega(1,s)$  for the Lennard-Jones (12-6) Potential, J. Chem. Phys., 57, 1100-1102 (1972).

Patankar S.V., Numerical Heat Transfer AND Fluid Flow, Hemisphere Publishing Corporation, McGraw-Hill (1980).

Reid R.B., J.M. Prausnitz and B.E. Poling, the Properties of Gases and Liquids, 4th Ed., McGraw-Hill (1988).

Roy R. K., A Primer on the Taguchi Method, Society of Manufacturing Engineers (2010).

Santangelo S., G. Messina, A. Malara, N. Lisi, T. Dikonimos, A. Capasso, L. Ortolani, V. Morandi, G. Faggio Taguchi optimized synthesis of graphene films by copper catalyzed ethanol decomposition, Bologna, Italy, 2013, Diamond and Related Materials 41 73–78 (2014).

Santen van H., Kleijn, C. R. and van den Akker H., On multiple stability of mixed-convection flows in a chemical vapor deposition reactor, International Journal of Heat and Mass Transfer (2001).

Schoonman ter He J., Surface Kinetics in Copper CVD, Chemical Vapor Deposition, 7, 199 (2001).

Scott Fogler H., Elements of Chemical Reaction Engineering, Prentice Hall International Editions, USA (1992).

Sifeng, Liu and Forrest, Jeffrey. ,The Current Developing Status on Grey System Theory. The Journal of Grey System (2007).

Sifeng, Liu και Yi, Lin., Grey Systems, theory and applications, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2010).

Simon A. Herbert, Models of Man: Social and Rational, John Wiley and Sons, New York, (1957).

Su, Te-Li, et al., Grey Relational Analysis of an Automatic Identifying System for Clothing Texture. Fibres and textiles in Eastern Europe (2010).

Taguchi G., E. A. Elsayed and T. Hsiang, Quality Engineering in Production Systems, McGraw-Hill Book Company (1989).

Taguchi G., S. Chowdhury, Y. Wu, Taguchi's Quality Engineering Handbook, John Wiley and Sons, New Jersey (1997).

Triantaphyllou, E. and Lin, C., Development and Evaluation of Five Fuzzy Multiattribute Decision-Making Methods, International Journal of Approximate Reasoning, 1996;14:281-310 (1996).

Tsai, Chih-Hung, Chang, Ching-Liang και Chen, Lieh., Applying Grey Relational Analysis to the Vendor Evaluation Model. International Journal of The Computer, The Internet and Management, Vol 11, (2003).

Turner J. Rick, Thayer F. Julian, Introduction to Analysis of Variance: Design, Analysis and Interpretation 1st Edition (2001).

Xenidou et al, Reaction and Transport Interplay in Al MOCVD Investigated Through Experiments and Computational Fluid Dynamic Analysis, Journal of The Electrochemical Society, 157(12), D633-D641 (2010).

Γεροντίδης Ι., Εργαστήριο στατιστική των επιχειρήσεων, Σημειώσεις, Καβάλα (2009).

Κουκουβίνος Χ. , Γραμμικά μοντέλα και σχεδιασμοί, Παν. Εκδόσεις Ε.Μ.Π., Αθήνα (2008).

Μπουτσιούκης Ε. Ανδρέας, Στρατηγικές πολυκριτηριακής ανάλυσης στη διαχείριση τεχνικών έργων, Μεταπτυχιακή εργασία, Α.Π.Θ., Θεσσαλονίκη (2011).

Ντάφλα Ε., Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα στον παραμετρικό σχεδιασμό, Διπλωματική εργασία, Ε.Μ.Π., Αθήνα (2012).

Ξενίδου Θ. Χ., Σχεδιασμός Αντιδραστήρων Χημικής Απόθεσης από Ατμό. Εφαρμογή στην απόθεση βολφραμίου και στην απόθεση οξειδίου του κασσιτέρου, Διδακτορική Διατριβή, ΕΜΠ, Αθήνα (2003).

Ρούσης Μ., Θεωρητική Μελέτη πολυκριτηριακών μεθόδων λήψης απόφασεων, Διπλωματική εργασία, Α.Π.Θ., Θεσσαλονίκη (2009).

Σπανός Κ. Σταμάτης, Αναλυτική μελέτη πολυκριτηριακών μεθόδων λήψης αποφάσεων, Διπλωματική εργασία, Ε.Μ.Π., Αθήνα (2004).

Τακτικού Β., Ανάλυση Κύριων Συνιστωσών και Εφαρμογές σε Πραγματικά Σεισμολογικά Δεδομένα, Διπλωματική εργασία, Ε.Μ.Π., Αθήνα (2012).

Τσαούλη Α., Διερεύνηση της ατμοσφαιρικής ρύπανσης στη Θεσσαλονίκη, Πτυχιακή εργασία, Τ.Ε.Ι Καβάλας (2010).

Τσιότρας Γ., Βελτίωση Ποιότητας, Εκδόσεις Ε. Μπένου, Αθήνα (2002).

Χωραφά Σ. Γεωργία, Τεχνικές Taguchi για εκτός σειράς στατιστικό έλεγχο διεργασίας, Διπλωματική εργασία, Πανεπιστήμιο Πειραιά, Πειραιάς (2013).