

Погрешность и адекватность аналитического моделирования распределения температуры в тепловых микросистемах

А.Г. Козлов

Омский государственный университет, agk252@mail.ru

Аннотация — Представлен метод оценки погрешностей при аналитическом моделировании распределения температуры в тепловых микросистемах, обусловленных заменой реальных многослойных структур зон эквивалентными структурами с однородными параметрами и применением условий сопряжения для зон с разной толщиной. Метод заключается в аналитическом моделировании распределения температуры по толщине в реальной и эквивалентной структурах тепловой микросистемы. Каждая двумерная структура разделяется на ряд прямоугольных зон, для которых определяются распределения температуры методом собственных функций. Из сравнения полученных распределений температуры определяется средневзвешенная по модулю относительная погрешность моделирования. Получены зависимости погрешности распределения температуры от длины зон структуры при различных коэффициентах теплопроводности материалов зон. Проведено сравнение распределений температуры в реальной структуре тепловой микросистемы, полученных с помощью тепловизионной системы и в результате моделирования.

Ключевые слова — тепловая микросистема, распределение температуры, метод собственных функций, погрешность моделирования, адекватность моделирования.

I. ВВЕДЕНИЕ

При разработке, исследовании и эксплуатации тепловых микросистем (микросенсоры, микроактюаторы) для определения стационарного и нестационарного распределения температуры широко используются различные методы математического моделирования. На основании полученного распределения температуры определяются конструктивные и эксплуатационные параметры микросистем, проводится оптимизация их конструкции и режима работы. Среди методов моделирования особое место занимают аналитические методы, которые позволяют получать решение уравнения теплопроводности для распределения температуры в объекте, выраженное через независимые переменные и параметры объекта в виде формул, рядов и интегралов. При решении линейных задач теплопроводности используются следующие аналитические методы: метод собственных функций, метод функций источников (метод функций Грина),

метод тепловых потенциалов, методы интегральных преобразований в конечных и бесконечных пределах [1]. Аналитические методы моделирования распределения температуры имеют ряд преимуществ по сравнению с численными методами. Эти преимущества заключаются в следующем: меньшее время постановки задачи; меньший объем и время вычислений; более простой контроль точности вычислений; простая реализация методов, которая может быть осуществлена с помощью обычных математических программных сред (MathCAD, Maple, MATLAB, MATHEMATICA); более наглядное и информативное решение; возможность определения решения в одной точке без вычисления решений в других точках; с помощью аналитических решений гораздо легче определить влияние конструктивных и теплофизических параметров, начальных и граничных условий на характер решения [2]; более простая интеграция в САПР.

Использование аналитических методов для моделирования температуры в тепловых микросистемах имеет ряд особенностей, которые обусловлены структурой данных микросистем [3] и позволяют уменьшить размерность задачи и привести ее к простым геометрическим объектам. Эти особенности заключаются в следующем:

1) возможность замены многослойных структур тепловых микросистем эквивалентными структурами с однородными параметрами;

2) учет симметрии структур тепловых микросистем.

Данные особенности позволяют использовать одномерные и двумерные аналитические методы для моделирования распределения температуры в структурах тепловых микросистем. Однако они приводят к появлению погрешностей моделирования, оценка которых необходима для решения вопросов об адекватности моделирования и правомерности применения аналитических методов в конкретном случае.

Целью данной работы является рассмотрение вопросов о погрешности и адекватности моделирования, а также определение границ применимости аналитического метода,

представленного в [4]. Предлагаемый метод имеет следующий алгоритм:

1. Двумерная структура тепловой микросистемы разделяется на прямоугольные зоны в зависимости от состава слоев и условий тепловыделения. Каждая зона заменяется эквивалентной зоной с однородными параметрами (эквивалентной толщиной $d_e^{(j)}$ и эквивалентной теплопроводностью $\lambda_e^{(j)}$).

2. Для каждой зоны определяются условия теплообмена с окружающей средой посредством теплопередачи через газовую среду и радиационного теплообмена через нижнюю и верхнюю поверхности зоны и посредством теплопроводности через края зоны с соседними зонами и подложкой.

3. Для каждой зоны определяется стационарное уравнение теплопроводности, которое решается методом собственных функций. Для нахождения значений плотностей тепловых потоков они представляются как суммы соответствующих ортогональных функций с неизвестными весовыми коэффициентами. В окончательном виде выражение для распределения температуры содержит неизвестные весовые коэффициенты, которые характеризуют процесс теплообмена между соседними зонами.

4. Определяются значения неизвестных весовых коэффициентов. Для этого используются уравнения равенства температур из граничных условий сопряжения между соседними зонами.

II. ПОГРЕШНОСТЬ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Общая погрешность моделирования распределения температуры в конкретной модели тепловой микросистемы Δ_m может быть представлена следующим образом [5]:

$$\Delta_m = \Delta_{\phi,м} + \Delta_{и.д} + \Delta_p,$$

где $\Delta_{\phi,м}$ - погрешность физико-математической модели, которая обусловлена использованными при ее построении допущениями; $\Delta_{и.д}$ - погрешность, которая обусловлена неточным заданием исходных данных, являющихся параметрами модели; Δ_p - погрешность расчета, которая обусловлена особенностями численной реализации модели.

В предложенном методе моделирования использован ряд допущений, которые приводят к следующим составляющим погрешности $\Delta_{\phi,м}$:

1) погрешность, обусловленная заменой реальных многослойных структур зон эквивалентными структурами с однородными параметрами;

2) погрешность, обусловленная применением условий сопряжения для зон с разной толщиной.

A. Погрешность, обусловленная заменой реальной структуры зоны эквивалентной структурой с однородными параметрами

Для определения данной погрешности рассмотрим реальную структуру, показанную на рис. 1а. Она соответствует, например, консольному тепловому приемнику излучения [6]. Каждая область содержит слой термически изолированной структуры и нанесенный на него слой другого материала. В плоскости xz структура содержит 4 зоны. Отличие между зонами заключается в том, что физические свойства нанесенного на термически изолированную структуру слоя различны в каждой зоне. Будем полагать, что толщины нанесенных слоев одинаковы. Нанесенный в зоне 1 тонкопленочный слой является тепловыделяющим. Удельная мощность тепловыделения в слое равна q_0 . Эквивалентная структура, изображенная на рис. 1б, содержит две зоны, каждая из которых имеет однородные параметры вдоль всей толщины. Толщины зон одинаковы. Однородные параметры эквивалентной структуры определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} L_1 &= L_a; & L_2 &= L_t; \\ d_1 &= d_s + d_a; & d_2 &= d_s + d_t; \\ \lambda_1 &= \frac{\lambda_s d_s + \lambda_a d_a}{d_s + d_a}; & \lambda_2 &= \frac{\lambda_s d_s + \lambda_t d_t}{d_s + d_t}; \\ q_0^{(1)} &= \frac{q_0^{(3)} d_a}{d_s + d_a}, \end{aligned}$$

где λ_s , λ_a , λ_t - коэффициенты теплопроводности материала термически изолированной структуры, поглощающего слоя и слоя термоэлектрического преобразователя, соответственно. Определение геометрических параметров представлено на рис. 1.

Уравнения для распределения температуры в зонах реальной и эквивалентной структур имеют следующий вид (на примере зоны 1 реальной структуры) [4]:

$$\begin{aligned} T_1' &= \frac{-\delta_0^{(1,2)} - \delta_0^{(1,3)}}{L_a d_s \lambda_s} + \\ &+ \frac{2}{L_a d_s \lambda_s} \sum_{k=1}^s \frac{-(-1)^k \delta_0^{(1,2)} - \delta_k^{(1,3)}}{\left(\frac{k\pi}{L_a}\right)^2} \cos\left(\frac{k\pi x_1}{L_a}\right) + \\ &+ \frac{2}{L_a d_s \lambda_s} \sum_{m=1}^t \frac{-\delta_m^{(1,2)} - (-1)^m \delta_0^{(1,3)}}{\left(\frac{m\pi}{d_s}\right)^2} \cos\left(\frac{m\pi z_1}{d_s}\right) + \\ &+ \frac{4}{L_a d_s \lambda_s} \sum_{k=1}^s \sum_{m=1}^t \frac{-(-1)^k \delta_m^{(1,2)} - (-1)^m \delta_k^{(1,3)}}{\left(\frac{k\pi}{L_a}\right)^2 + \left(\frac{m\pi}{d_s}\right)^2} \times \\ &\times \cos\left(\frac{k\pi x_1}{L_a}\right) \cos\left(\frac{m\pi z_1}{d_s}\right), \end{aligned} \quad (1)$$

где x_j, z_j - координаты в зоне j ; $\delta_k^{(j,v)}, \delta_m^{(j,u)}$ - весовые коэффициенты, определяющие плотности тепловых потоков на границе между зонами.

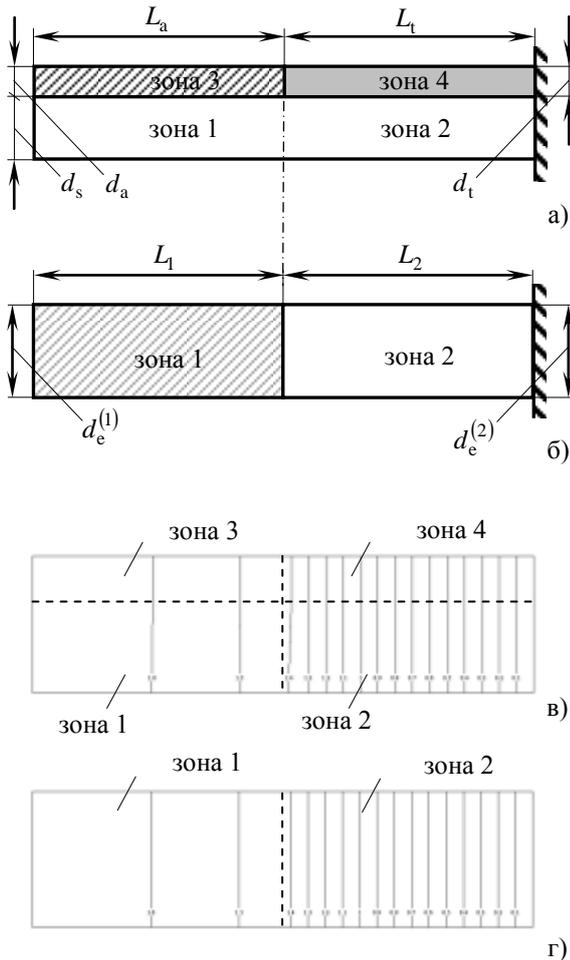


Рис. 1. Распределение температуры перегрева в реальной и эквивалентной структурах: (а) реальная структура; (б) эквивалентная структура; (в) реальная структура и (г) эквивалентная структура; $L_a = 15$ мкм; $L_t = 15$ мкм; $d_a = 0,5$ мкм; $d_t = 0,5$ мкм; $d_s = 1$ мкм

Весовые коэффициенты, входящие в уравнения для распределения температуры в зонах, определяются из решения обобщенной системы уравнений, полученной из граничных условий сопряжения между соседними зонами [4]. После определения температуры в реальной и эквивалентной структурах вычисляется относительная погрешность распределения температуры в каждой расчетной точке структуры. Эта погрешность определяется следующим образом

$$\Delta_{\text{фм}}^{(э)} = \frac{T_э - T_p}{T_p} \cdot 100\%, \quad (2)$$

где $\Delta_{\text{фм}}^{(э)}$ - относительная погрешность физико-математической модели, обусловленная заменой реальной структуры эквивалентной структурой с однородными параметрами; T_p - температура в реальной структуре; $T_э$ - температура в эквивалентной структуре. Для оценки относительной погрешности физико-математической модели, обусловленной заменой реальной структуры эквивалентной структурой с однородными параметрами, использовалась средневзвешенная по модулю относительная погрешность $\bar{\Delta}_{\text{фм}}^{(э)}$, которая определялась следующим образом

$$\bar{\Delta}_{\text{фм}}^{(э)} = \frac{\int_0^{L_c} \int_0^{d_c} |\Delta_{\text{фм}}^{(э)}| dx dz}{L_c d_c}, \quad (3)$$

где L_c - длина структуры; d_c - толщина структуры.

Для практической реализации указанного метода было проведено определение относительной погрешности физико-математической модели, обусловленной заменой реальной структуры эквивалентной структурой с однородными параметрами. Были выбраны следующие параметры структуры (рис. 1а): $q_0^{(3)} = 2$ Вт/м³; $d_a = 0,5$ мкм; $d_t = 0,5$ мкм; $d_s = 1$ мкм; материал термически изолированной структуры (зоны 1 и 2) - диоксид кремния, $\lambda_s = 1,2$ Вт/(м·К); материал зоны 3 - поликремний, $\lambda_t = 20$ Вт/(м·К). Остальные параметры структуры (λ_a, L_a и L_t) варьировались. Результаты определения распределения температуры в реальной и эквивалентной структурах представлены, соответственно, на рис. 1в и 1г. Как видно из представленных графиков, распределение температуры в эквивалентной структуре отличается от распределения в реальной структуре. Основное отличие наблюдается в зонах с термически изолированной структурой (зоны 1 и 2 реальной структуры). Зависимость погрешности моделирования температуры, обусловленной заменой реальной структуры консольного типа эквивалентной структурой, от длины зон в реальной структуре при различных значениях λ_a представлена на рис. 2. Значения λ_a соответствовали: $\lambda_a = 1,2$ Вт/(м·К) - диоксид кремния; $\lambda_a = 20$ Вт/(м·К) - поликремний; $\lambda_a = 72$ Вт/(м·К) - платина; $\lambda_a = 316$ Вт/(м·К) - золото. Как видно из представленных данных, средневзвешенная погрешность при $d_e^{(j)} \leq \frac{L_j}{3}$ не превышает 4,8 % для всех значений λ_a . Из этого можно сделать вывод, что применение данного метода для моделирования распределения температуры в тепловых микросенсорах с коэффициентом

теплопроводности слоев от 1,2 до 312 Вт/(м·К) оправдано в структурах со следующими геометрическими соотношениями $d_e^{(j)} \leq \frac{l_j}{3}, \frac{b_j}{3}$. При

этом средневзвешенная относительная погрешность физической модели, обусловленная заменой реальной структуры зон эквивалентной структурой с однородными параметрами, не будет превышать 4,8 %.

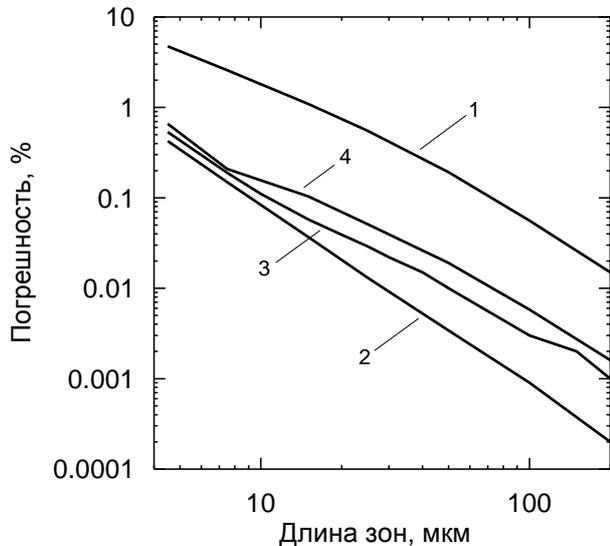


Рис. 2. Зависимость средневзвешенной по модулю относительной погрешности распределения температуры от длины зон структуры при различных коэффициентах теплопроводности материала зоны 3: 1 – $\lambda_a=1,2$ Вт/(м·К); 2 – $\lambda_a=20$ Вт/(м·К); 3 – $\lambda_a=72$ Вт/(м·К); 4 – $\lambda_a=316$ Вт/(м·К)

В. Погрешность, обусловленная применением условий сопряжения для зон с разной толщиной

Для определения данной погрешности рассмотрим двухслойную структуру, представленную на рис. 3а. В этой структуре в плоскости xz можно выделить две зоны (1 и 2) с различными параметрами. Будем полагать, что тепловой поток поступает в структуру через боковую поверхности зоны 2. При применении условий сопряжения для зон с разной толщиной полагается, что тепловой поток поступает через всю боковую поверхность структуры. С этой целью рассмотрим эквивалентную структуру для представленной двухслойной структуры. Данная эквивалентная структура показана на рис. 3б. В ней тепловой поток поступает через всю боковую поверхность, т.е. эквивалентная структура соответствует зоне в xy плоскости, которая имеет большую толщину, чем соседняя зона. Параметры эквивалентной структуры определялись следующим образом:

$$d_e^{(1)} = d_s + d_t;$$

$$\lambda_e^{(1)} = \frac{\lambda_s d_s + \lambda_t d_t}{d_s + d_t};$$

$$q_e = \frac{q_s d_s}{d_s + d_t}.$$

Уравнения для распределения температуры в зонах реальной структуры имеют вид, аналогичный уравнению (1). Уравнение для распределения температуры в эквивалентной структуре может быть представлено следующим образом

$$T_1' = \frac{2}{L d_e^{(1)} \lambda_e^{(1)}} \sum_{k=1}^s \frac{q_e d_e^{(1)}}{\left[\frac{(2k-1)\pi}{2L} \right]^2} \cos \left[\frac{(2k-1)\pi x_1}{2L} \right].$$

Относительная погрешность распределения температуры в структуре, обусловленная применением условий сопряжения для зон с разной толщиной, $\Delta_{\text{фм}}^{(yc)}$ и значения средневзвешенной по модулю относительной погрешности $\bar{\Delta}_{\text{фм}}^{(yc)}$ определяются с помощью выражений, аналогичных (2)-(3). Было проведено определение относительной погрешности физико-математической модели, обусловленной применением условий сопряжения для зон с разной толщиной, для конкретных параметров структуры, которые имели следующие значения (рис. 3а): $q_s = 2000000$ Вт/м²; остальные параметры зон 1 и 2 аналогичны параметрам зон 2 и 4 в структуре, представленной на рис. 1а.

Результаты определения распределения температуры в реальной и эквивалентной структурах представлены, соответственно, на рис. 3в и 3г. Как видно из представленных распределений температуры, распределение температуры в эквивалентной структуре отличается от распределения в реальной структуре. Основное отличие в распределении температуры наблюдается в зоне 1 в области, близкой к границе с входным тепловым потоком. Получены зависимости средневзвешенной относительной погрешности моделирования распределения температуры, обусловленной применением условий сопряжения для зон с разной толщиной, от длины зон в реальной структуре при различных значениях λ_t . Эти зависимости имеют вид, аналогичный зависимостям, представленным на рис. 2. Установлено, что в данном случае средневзвешенная относительная погрешность

при $d_e^{(1)} - d_s \leq \frac{L_j}{9}$ не превышает 2,2 % для значений

λ_t от 1,2 до 316 Вт/(м·К). Из этого можно сделать вывод, что данный метод моделирования распределения температуры в тепловых микросистемах применим в структурах со следующими геометрическими отношениями между эквивалентными толщинами зон: $d_e^{(j)} - d_e^{(s)} \leq \frac{l_j}{9}, \frac{b_j}{9}$.

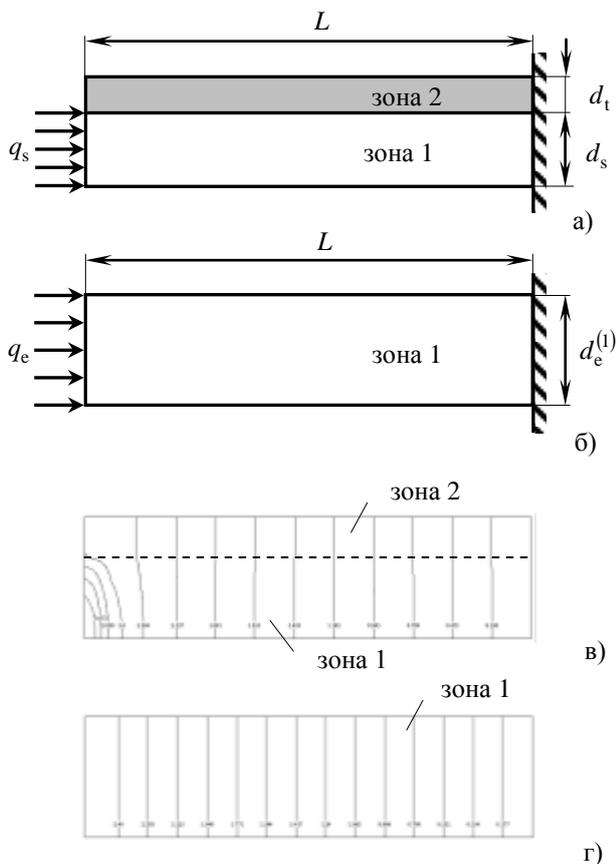


Рис. 3. Распределение температуры перегрева в реальной и эквивалентной структурах при изменении плотности теплового потока на границе: (а) реальная структура; (б) эквивалентная структура; распределение температуры в (в) реальной структуре и в (г) эквивалентной структуре; $L = 15$ мкм; $d_t = 0,5$ мкм; $d_s = 1$ мкм

III. АДЕКВАТНОСТЬ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Проверка адекватности предложенного метода проводилась путем сравнения рассчитанного распределения температуры с экспериментально полученным распределением температуры для конкретной тестовой структуры. Тестовая структура представляла собой прямоугольную плату, подвешенную в двух смежных углах с помощью узких прямоугольных консольных мостов. Размеры структуры:

- прямоугольная плата: длина – 18 мм; ширина - 18 мм; толщина – 200 мкм; материал: кварцевое стекло (коэффициент теплопроводности – 1,2 Вт/(м·К));

- прямоугольные консольные мосты: длина – 18 мм; ширина – 1,5 мм; толщина – 200 мкм; материал: медь (коэффициент теплопроводности – 406 Вт/(м·К)).

На поверхности прямоугольной платы нанесен слой из тантала с адгезионным подслоем из титана. Толщина слоя тантала 0,1 мкм. Электрические выводы формировались на двух противоположных сторонах платы и представляли собой напыленный слой меди длиной 18 мм, шириной 1,5 мм, толщиной 1 мкм. К этим слоям припаивались прямоугольные консольные мосты по всей длине слоев.

Измерение распределения температуры в структуре проводилось с помощью тепловизора “ТКВр-ИФП”. Экспериментально измеренное распределение температуры при мощности нагрева 232 мВт (напряжение на структуре – 4 В; ток – 58 мА) представлено на рис. 4а.

Моделирование распределения температуры проводилось предложенным методом. Использовалась усеченная структура, состоящая из трех зон (рис. 4б): 1, 2 и 3. Зона 1 состоит из 2 слоев: слой кварцевого стекла и слой тантала. Размеры зоны: длина 15 мм; ширина - 18 мм. Зона 2 состоит из 3 слоев: слой кварцевого стекла, слой тантала, слой меди. Размеры зоны: длина 1,5 мм; ширина - 18 мм. Зона 3 состоит только из слоя меди. Размеры зоны: длина 1,5 мм; ширина - 18 мм. Тепловыделяющей зоной является зона 1.

Решение обобщенной системы уравнений для усеченной структуры позволило определить значения весовых коэффициентов и распределение температуры в зонах структуры. Это распределение температуры показано на рис. 4б. Оно близко к экспериментально полученному распределению температуры в тестовой структуре. Адекватность распределения температуры, полученного путем моделирования с помощью предложенного метода, реальному распределению температуры оценивалось по относительной погрешности значения температуры в определенных точках структуры, $\Delta_T^{(ад)}$, равной

$$\Delta_T^{(ад)} = \frac{T_m - T_э}{T_э} \cdot 100\% ,$$

где T_m - значение температуры, полученное путем моделирования; $T_э$ - экспериментально определенное значение температуры. В качестве основной точки, где определялось значение $\Delta_T^{(ад)}$, была выбрана точка в центре зоны 1. В этой точке $T_э = 24,95$ °С, $T_m = 26,83$ °С и, соответственно, $\Delta_T^{(ад)} = 7,54$ %. Учитывая, что погрешность измерения температуры составляет 5%, наблюдается хорошее соответствие между полученными результатами и можно сделать заключение об адекватности модели реальному объекту.

IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для типичных толщин слоев в конструкции тепловой микросистемы ($d_a=0,5$ мкм; $d_t=0,5$ мкм; $d_s=1$ мкм) и всего диапазона значений коэффициентов теплопроводности используемых материалов (от 1,2 до 316 Вт/(м·К)) погрешность, обусловленная заменой реальной структуры зоны эквивалентной структурой с однородными параметрами, и погрешность, обусловленная применением условий сопряжения для зон с разной толщиной, имеют следующие особенности:

- 1) значения средневзвешенной по модулю относительной погрешности $\overline{\Delta}_{\Phi M}^{(a)}$ не превышают 4,8%;
- 2) значения средневзвешенной по модулю относительной погрешности $\overline{\Delta}_{\Phi M}^{(y,c)}$ не превышают 2,2%;
- 3) в зонах тепловых микросистем имеются локальные участки, где наблюдаются большие максимальные и минимальные погрешности, однако размеры этих участков гораздо меньше, чем размеры зон; в основном эти участки расположены в термически изолированной структуре;
- 4) погрешности распределения температуры в слоях с большей проводимостью гораздо меньше.

Во всех случаях в качестве критерия удобно использовать соотношения между геометрическими размерами зон. Эти параметры просто контролировать, в то время как теплофизические параметры (в частности, коэффициент теплопроводности) сложно точно измерить в тонкопленочных слоях. В отдельных случаях, когда требуется точно знать погрешность определения температуры, обусловленную допущениями при построении физико-математической модели, эта погрешность может быть определена по приведенным выше методикам.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Карташов Э.М. Аналитические методы в теории теплопроводности твердых тел. М.: Высшая школа, 2001. 550 с.
- [2] Вержбицкий В.М. Основы численных методов. М.: Высшая школа, 2002. 840 с.
- [3] Baltes H., Paul O., Brand O. Micromachined thermally based CMOS microsensors // Proceedings of the IEEE. 1998. V. 86. P. 1660-1678.
- [4] Kozlov A.G. Analytical modelling of steady-state temperature distribution in thermal microsensors using Fourier method. Part 1. Theory // Sensors and Actuators A. Physical. 2002. V. 101. P. 283-298.
- [5] Дульнев Г.Н., Парфенов В.Г., Сигалов А.В. Методы расчета теплового режима приборов. М.: Радио и связь, 1990. 312 с.
- [6] Kozlov A.G. Optimization of thin-film thermoelectric radiation sensor with separate disposition of absorbing layer and comb thermoelectric transducer // Sensors and Actuators A. Physical. 2000. V. 84. P. 259-269.

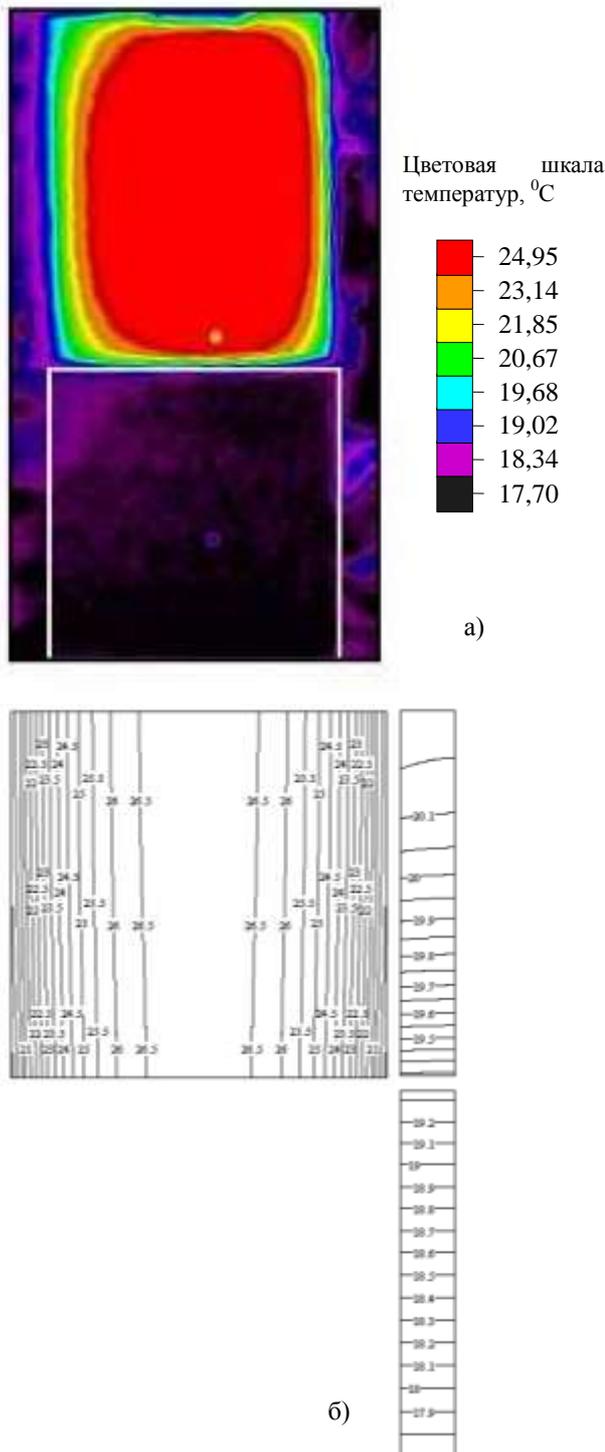


Рис. 4. Распределение температуры в структуре, представляющей собой плату, подвешенную в двух смежных углах с помощью консольных мостов: а) распределение температуры, полученное с помощью тепловизионной системы; б) распределение температуры, полученное в результате моделирования