

ANÁLISIS DINÁMICO DE SENSOR DE GAS SnO₂ MEDIANTE ELEMENTOS FINITOS: MODELO REDUCIDO Y SIMULACIÓN

A DYNAMIC ANALYSIS OF SnO₂ GAS SENSOR USING FINITE ELEMENTS: REDUCED MODEL AND SIMULATION

RICARDO PIRAJÁN CANTILLO¹

RECIBIDO: AGOSTO 2009

APROBADO: OCTUBRE 2009

RESUMEN

Los estudios sobre sensores de gas de película delgada tienen antecedentes de diseño en investigaciones realizadas, en el primer lustro del presente siglo, por el Centro de Microelectrónica de la Universidad de los Andes (Bogotá, Colombia), que han conducido a tesis de grado. El presente artículo recrea el análisis dinámico transiente con herramientas de elementos finitos y enriquece el fenómeno a través de la generación de un modelo de orden reducido que permite realizar pruebas del prototipo más rápidamente, desde un programa de simulación matemático como Matlab©. A los resultados obtenidos, se adiciona un nuevo desarrollo en la fabricación del sensor, para comprobar y ajustar el modelo funcional.

Palabras clave

Sensor de gas, dióxido de estaño, Ansys, mor4ansys, análisis transiente, modelo de orden reducido.

Abstract

Studies on gas-sensing thin-film design have a history of research in the first half of this century, the microelectronics center University of the Andes (Bogotá, - Colombia), has lead to this dissertation. This article, recreates the transient dynamic analysis tools and some finite elements enrich the phenomenon through the generation of a reduced order model that allows testing of

the prototype, more rapidly, from a mathematical simulation program such as Matlab ©. For the results, a new development in the manufacture of the sensor is added to check and adjust the functional model.

Key words

Gas sensor, tin dioxide, AnsysNSYS, mMO-R4ANSYSor4ansys, transient analysis, reduced order model.

1 Ingeniero electrónico, Universidad Distrital Francisco José de Caldas. Docente en las áreas de Instrumentación y Electrónica Digital, Facultad Tecnológica, Universidad Distrital. M.Sc. en Ingeniería Electrónica y Computadores, Universidad de los Andes. Phd(c) Universidad Nacional de Colombia. Correo: r-piraja@uniandes.edu.co, rpirajanc@udistrital.edu.co

1. INTRODUCCIÓN

En Colombia, así como en todo el mundo, hay una creciente preocupación por el medio ambiente. Esto ha motivado el desarrollo tecnológico mundial de herramientas para medición de variables ambientales, entre ellas, la contaminación producida por gases presentes en el entorno. Colombia ratificó la Convención de Cambio Climático, mediante la Ley 164 de 1995, y el Protocolo de Kyoto, mediante la Ley 629 de diciembre de 2000. En este sentido, el compromiso del sector energético colombiano busca generar políticas, desarrollo de herramientas y metodologías para la protección ambiental [1].

En la Universidad de los Andes, que no es ajena a estas nuevas tendencias, se viene desarrollando un sensor de gas de película sensible, mediante trabajos realizados por D. Reyes [2] y A. Méndez [3], A. Muñoz [4], Guerrero [5], quienes llevaron a cabo sendas investigaciones encaminadas a modelar el sensor. Se concentraron en mejorar características de consumo de potencia y la distribución de temperatura, a través de herramientas de elementos finitos, como Ansys y Coventoreware. También se validó el modelo de la respuesta de la película sensible por medio de ecuaciones diferenciales. El presente artículo describe la investigación que permitió desarrollar complementos a estos estudios, particularmente incorporando el análisis dinámico transiente de la estructura propuesta, y la generación de un modelo de orden reducido. Este modelo, obtenido con mor4ansys [6], permite realizar pruebas con esfuerzo computacional mínimo y con muy poco margen de error. Finalmente, con los resultados obtenidos por Muñoz [4] y los aquí presentados se puede simular la respuesta del sensor, tanto en el ambiente electrotérmico como en el físico-químico, en el software de simulación Matlab®.

2. ANÁLISIS DINÁMICO [8]

El sensor de gas tiene como principio de operación el cambio de conductividad de la película sensible, en la medida que la concentración del gas objetivo aumente o disminuya. La operación de estos sensores se realiza a temperaturas relativamente elevadas (aproximadamente entre 250 y 500 °C). Sin embargo, esta temperatura tiene que estar concentrada principalmente en la película sensible y no en toda la estructura y debe tener una distribución lo más uniforme posible. Es por ello que Reyes y Ávila [2] y Méndez y Ávila [3] encaminaron sus esfuerzos en este sentido y lograron comprobar que la estructura más adecuada para el calefactor de polisilicio es la que se presenta en la Figura 1. Aquí se pueden distinguir cuatro capas: la base de la estructura en la cual se utilizó silicio con una altura de 300 μm, una capa aislante térmica y eléctrica de oxinitruro de silicio ($SiO_{0.89}N_{0.73}$, con índice de refracción de 1,67 [2]), calefactor de polisilicio (Figura 1b), membrana aislante de Si y la película sensible de dióxido de silicio (SiO_2). Tanto el calefactor de polisilicio, como la película sensible se conectan con el exterior mediante electrodos de platino.

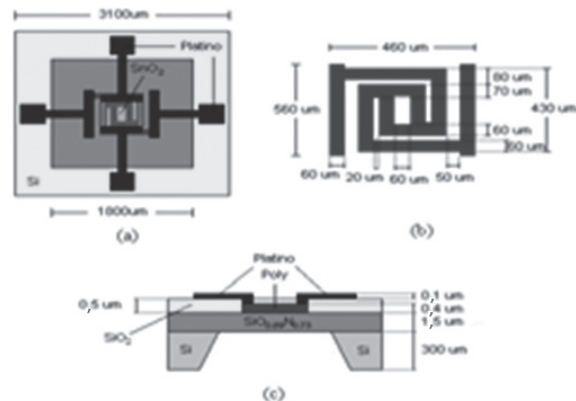


Figura 1. (a) Película sensible y electrodos de platino, (b) Resistencia calefactora de polisilicio, (c) Corte transversal de la estructura del sensor. Tomado de [2].

Tanto en [2] como en [3] se trabajó independientemente en la optimización del consumo de energía y la distribución de temperatura en la película sensora, en estado estable, es decir, se realizaron análisis estáticos. Uno de los objetivos de este trabajo era realizar un análisis dinámico transiente de las estructuras obtenidas en [2] y [3]. Este análisis tiene como objetivo conocer la evolución temporal de la distribución de temperatura en la película sensible. En las figuras 2 y 3 se muestra el modelo de elementos finitos utilizado. Con Ansys, la herramienta elegida [7], los pasos para realizar el análisis transiente son: 1. Crear la estructura del modelo. 2. Establecer condiciones iniciales de temperatura. 3. Configuración de opciones adicionales de solución. 4. Aplicación de cargas. 5. Almacenar la configuración de cargas del paso actual. 6. Repetir los pasos desde el tercero cuantas veces sea necesario.

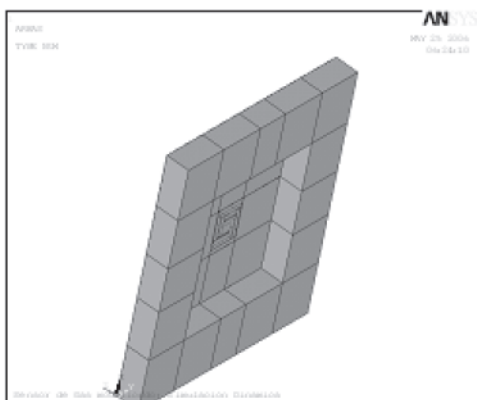


Figura 2. Vista inferior del modelo de elementos finitos utilizado en Ansys.

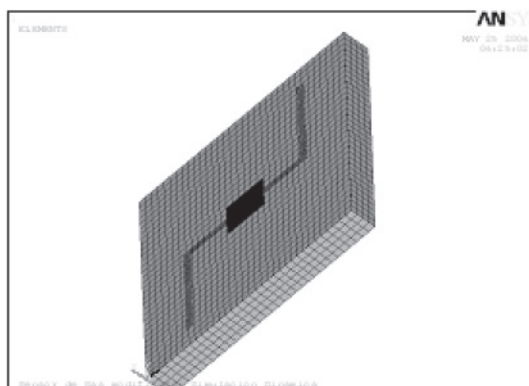


Figura 3. Vista superior del modelo de elementos finitos utilizado en Ansys.

Los comandos utilizados para realizar este análisis son:

- ANTYPE,TRANS: define el análisis de tipo transiente.
- TRNOPT,FULL: método completo
- KBC: aplicación de cargas por pasos (1) o rampa (0).
- TIME: tiempo que dura la aplicación de cargas.
- AUTOTS: pasos de tiempo automáticos.
- DELTIM: tamaño de paso de tiempo.
- OUTRES: opciones para archivo de resultados de datos.
- LSWRITE: almacena los pasos.
- LSSOLVE: inicia solución por múltiples pasos.

Segmento de programa en donde se realizó el análisis transiente:

RICARDO PIRAJÁN CANTILLO

- `deltime 0.1`
- `time,1`
- `da,541,volt,0`
- `da,518,volt,6.287 ! Voltaje en las terminales.`
- `allsel,all,all`
- `kbc,1`
- `deltime,0.1`
- `time,2`
- `da,541,volt,0`
- `da,518,volt,0 ! Voltaje en las terminales.`
- `allsel,all,all`
- `kbc,1`

Los resultados se muestran en las figuras 4 y 5.

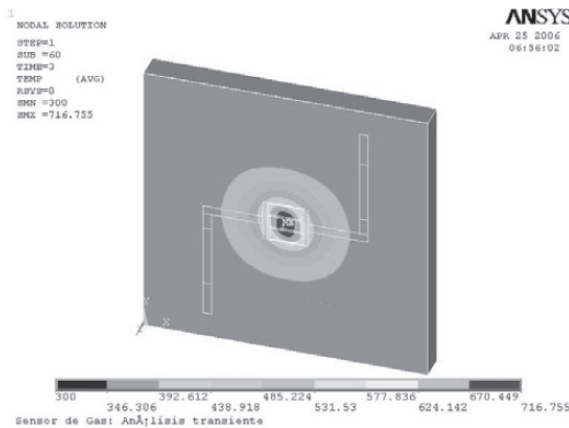


Figura 4. Comportamiento del sensor durante la aplicación de voltaje.

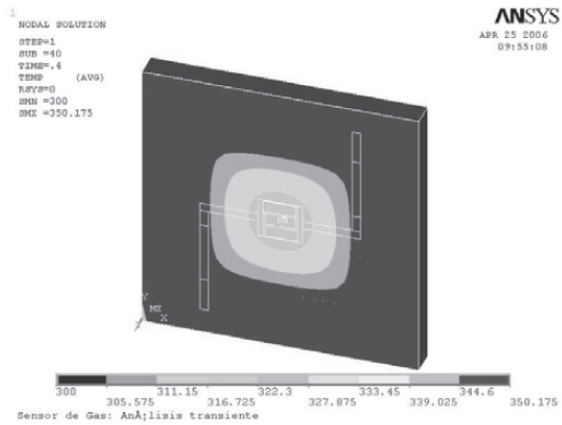


Figura 5. Comportamiento del sensor durante aplicación de voltaje 0.

En estas figuras puede observarse que el cuerpo total mantiene una temperatura aproximadamente constante (entre 350 y 360 °K, promedio), mientras que en el sector en donde se encuentra el sensor la temperatura varía ostensiblemente (325-690 °K, promedio).

Dentro de las mediciones realizadas, se obtuvieron respuestas en las que el cambio de temperatura del microcalefactor es extremadamente rápido. Con estas simulaciones se pudo estimar los tiempos de subida y de bajada de las respuestas transientes. El tiempo de subida fue $t_r = 20$ ms y el tiempo de bajada fue de $t_f = 25$ ms. Cabe anotar que mientras el sistema térmico responde en milisegundos (ms), el proceso químico involucrado entre la película sensora y el gas objetivo es de segundos, como lo muestran las mediciones realizadas por Muñoz en [4], para sensores de este tipo.

Si se varía el ancho del pulso, es posible controlar la temperatura del calefactor, de manera que, estimando la relación entre el ancho del pulso en alto (T_1) y el ancho del pulso en bajo (T_2) con respecto a un periodo fijo T , podría estimarse la respuesta del sistema. Esta señal puede aproximarse a una señal de voltaje directo,

cuyo valor corresponde al valor promedio de la señal. Entonces:

$$V_{prom} = V * \frac{T1}{T1 + T2} \quad (1)$$

En la ecuación 1, V es el valor de voltaje aplicado (Figura 6).

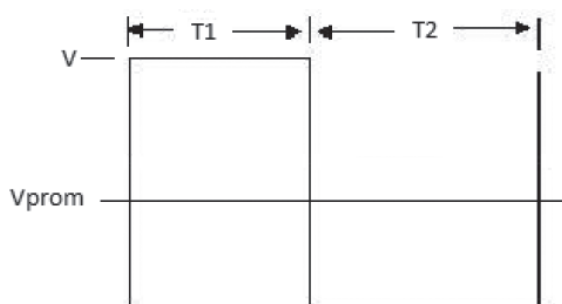


Figura 6. Periodo de señal aplicada con respecto a su promedio.

Finalmente, si se usa una señal periódica, la respuesta es similar a la obtenida, como si se enviara un pulso con valor promedio de la señal. Así lo muestran las respuestas obtenidas que se presentan en la Figura 7.

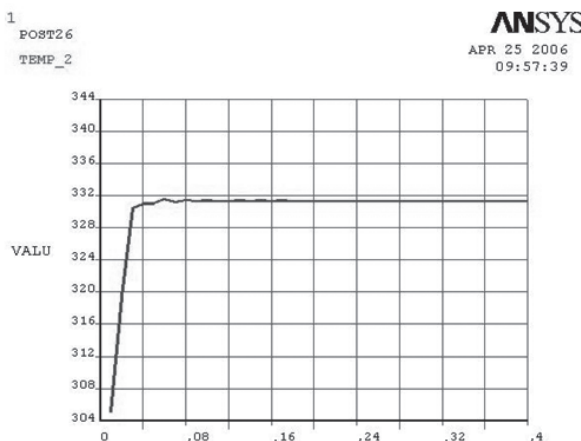


Figura 7. Respuesta a aplicación de señal cuadrada periódica mediante simulación con Ansys (modelo de elementos finitos).

La respuesta corresponde a un sistema de primer orden dada por:

$$H(s) = \frac{1}{\tau * s + 1} \quad (2)$$

τ es la constante del tiempo del sistema [8]. Si se aplica una señal escalón de amplitud A , se obtiene una respuesta dada por:

$$C(s) = \frac{1}{\tau * s + 1} * \frac{A}{s} \quad (3)$$

Y su respuesta temporal está dada por:

$$c(t) = A * \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau}} \right) \quad (4)$$

Para las simulaciones realizadas, se obtuvo $\tau = 0,01$ s, lo que confirma las observaciones anteriores.

3. MODELO DE ORDEN REDUCIDO

A medida que el modelo se va haciendo cada vez más complejo, realizar una simulación tarda cerca de diez minutos. Cuando el modelo incluye simulación multifísica [7], como es el caso del sensor de gas de película sensible, en donde se tienen dos elementos físicos (eléctrico y térmico), cualquier verificación o cambio que se quiera realizar durante del proceso de prototipaje lleva mucho tiempo y se torna dispendioso.

El proceso utilizado en este caso se lleva a cabo básicamente en tres fases [9]. Primero, se definen la geometría y el comportamiento físico co-

rrespondiente. En este caso se obtienen las ecuaciones diferenciales parciales que gobiernan el sistema. Posteriormente, mediante elementos finitos, se obtienen ecuaciones ordinarias diferenciales (ODE, por sus siglas en inglés [Ordinary Differential Equations]) de orden n . Este modelo puede simularse para el caso mediante Ansys. Por último, se reduce el orden de estas ecuaciones para obtener los órdenes más influyentes sobre el sistema.

3.1 MODELO FÍSICO, ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES

Teniendo en cuenta que, según el modelo planteado en la Figura 1, el calefactor se encuentra unido a la película sensible, y que en los trabajos de [2] y [3] se logró una distribución de temperatura uniforme, sólo se considera la transferencia de calor por conducción. La ecuación diferencial parcial que describe este fenómeno es:

$$\nabla \cdot (\kappa \nabla T) + Q - \rho c \frac{\partial T}{\partial t} = 0, \quad (5)$$

$$Q = \frac{j^2}{\sigma}$$

En la ecuación 5, κ es la conductividad térmica, c es la capacidad específica de calor, ρ es la densidad de masa, T es la distribución de temperatura, Q es la tasa de transferencia de calor (en la que se toma el calentamiento joule como mecanismo dominante de calentamiento), j es el vector de variación de densidad de corriente y σ es la conductividad eléctrica específica [9].

En esta ecuación se ha asumido que la generación de calor se distribuye uniformemente entre la película sensible y la resistencia de calefacción. Por tanto, la solución de la ecuación o las

matrices que se generen son independientes del punto de trabajo.

3.2 MODELO FÍSICO EN ECUACIONES ORDINARIAS DIFERENCIALES

La ecuación anterior para el análisis de elementos finitos basada en discretización espacial genera un sistema lineal de ODE de la forma:

$$C \frac{d}{dt} \vec{T} + K \vec{T} = \vec{Q} \quad (6) \quad [10]$$

Aquí, $K, C \in {}^{n \times n}$ son las matrices de conductividad de calor y de capacidad de calor (equivalente a la matriz de amortiguamiento). $\vec{T}(t), \vec{Q} \in R^n$ son la temperatura y el vector de generación de calor, respectivamente. La generación de calor depende de la potencia eléctrica $P(t)$. La ecuación 6 podría expresarse entonces como:

$$C \frac{d}{dt} \vec{T} + K \vec{T} = FP(t) \quad (7) \quad [9]$$

$$y = E^T \cdot \vec{T}$$

Estas matrices con las mismas dimensiones descritas anteriormente y $\vec{T}(t), E, F \in R^n$ representan los vectores de temperatura, salida y carga. Se asume que la potencia eléctrica se transforma completamente en calor y sería la entrada del sistema. En [2], [3] y en el segundo apartado de este trabajo se presentaron algunos de los resultados obtenidos mediante elementos finitos.

La obtención de un modelo de orden reducido consiste en transformar el sistema de ecuaciones 7 en un sistema similar:

$$C_r \dot{T}_r + K_r T_r = F_r P(t) \quad (8)$$

$$y_r = E_r^T \cdot T_r$$

Aquí hay una dimensión mucho más pequeña, $r \ll n$. Por tanto, se produce un error inherente a esta reducción ε . La expresión que permite establecer la relación está dada en la siguiente ecuación:

$$T = V \cdot T_r + \varepsilon, T_r \in^r, r \ll n \quad (9)$$

La matriz V está compuesta de r vectores n -dimensionales que conforman una base para el subespacio reducido [9].

3.3 PROCEDIMIENTO DE REALIZACIÓN DEL MODELO DE ORDEN REDUCIDO

El modelo de orden reducido se realizó utilizando el programa *mor4ansys* [6], ya que facilita la obtención automatizada de este tipo de modelos. El método utilizado por *mor4ansys* para obtener el modelo ROM (sigla en inglés de Reduced Order Model) es mediante la comparación de momentos de la función de transferencia, por medio de los subespacios de Krylov, a través de los procesos de Arnoldi [11]. Para ello se necesita extraer del modelo completo las matrices que muestren el comportamiento del sistema. Sin embargo, a medida que el sistema es más complejo o se requiere realizar análisis multifísicos, estas matrices son muy grandes y pueden llegar a ordenes de 500.000 [12]. Para la obtención de esta matriz se utilizó Ansys.

En Ansys se obtienen estas matrices y se guardan en dos archivos (con extensiones FULL y EMAT). Se pueden generar mediante los siguientes comandos [12]:

- /solu
- allsel
- antype,static
- eqslv,sparse
- nsubst,1
- wrfull,1
- ematwrite,yes
- solve
- fini

El comando *wrfull* detiene la solución del modelo después de tener ensambladas las matrices globales del sistema [7]. Una vez generadas las matrices, se utiliza *mor4ansys* para generar el modelo de orden reducido. Las ventajas de usar este programa son, primero, que el método utilizado es totalmente automatizado, sin embargo, el usuario puede definir el orden del modelo de orden reducido; segundo, el esfuerzo computacional para obtener el modelo es similar al que requiere realizar la simulación estática [10]; por último, se pueden tomar las matrices generadas por el programa y llevarlas a Matlab, ya que el programa entrega las matrices en formato Matrix Market².

El software fue creado en Imtex³ para realizar modelos de orden reducido en ingeniería y su distribución es gratuita. Trabaja en ambientes Windows y Linux (realizando la compilación previa). Un aporte adicional del proyecto es la realización de archivos por lotes para Windows, que permiten utilizar fácilmente el programa. Estos se realizaron con base en los scripts para Linux realizados por Rudnyi [12].

² Ver: <http://math.nist.gov/MatrixMarket/>

³ Institute for Microsystem Technology. Ver: <http://www.imtek.uni-freiburg.de>

4. RESULTADOS

Como resultado del proyecto se obtuvo el comportamiento transiente de los sensores propuestos por Reyes y Ávila [2] y Méndez y Ávila [3]. De allí se logró obtener una aproximación del sistema a una ecuación diferencial que podría describir el comportamiento del sistema.

Se exploró y se determinó el modelo de orden reducido que nos permite realizar simulaciones con mayor exactitud que esta primera aproximación.

Por último, se está enlazando esta respuesta con los resultados obtenidos por Muñoz [4] para completar el modelo completamente funcional. Sin embargo, debido a que Ansys no permite realizar simulación química, no fue posible contrastar estos resultados con una posible evaluación. Entonces, se hace necesario construir el modelo analizado y realizar la medición para hacer los ajustes en el modelo de Muñoz [4], ya que este se basó en un sensor fabricado en el Laboratorio Francés de Análisis y Arquitectura de Sistemas (LAAS).

Como puede observarse en la Figura 8, el modelo de orden reducido se aproxima al modelo obtenido mediante elementos finitos y con una disminución sustancial en el tiempo del cálculo.

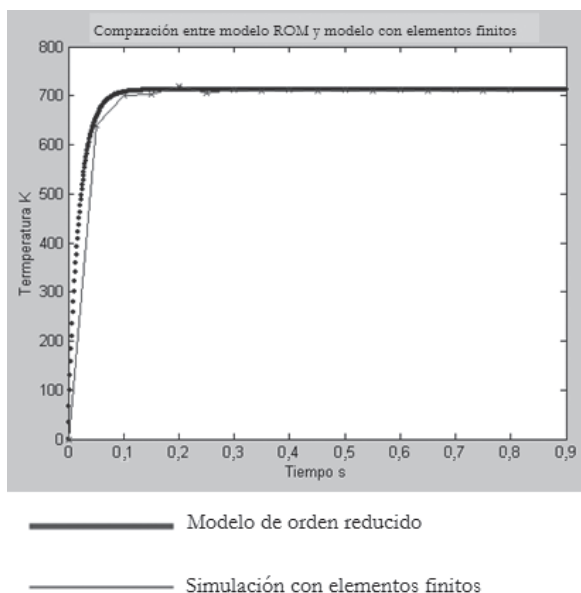


Figura 8. Comparación modelo de orden reducido con respecto a simulación con elementos finitos.

5. CONCLUSIONES

Se integraron diferentes trabajos realizados en la Universidad de los Andes y, adicionalmente, se complementaron los trabajos de Reyes y Ávila [2] y Méndez y Ávila [3] con modelos dinámicos y de orden reducido.

Se comprobó que finalmente los diseños realizados son superiores en calidad a los propuestos hasta el momento. Sin embargo, se generó la necesidad de realizar la fabricación del prototipo para realizar los ajustes correspondientes a los modelos finalmente planteados.

Se logró comprobar la ventaja de utilizar modelos de orden reducido en cuanto al esfuerzo computacional que se debe realizar para simular modelos complejos. Esto permite estudiar un prototipo en menor tiempo.

REFERENCIAS

- [1] O. Prias, C., “Programa Nacional de Investigaciones en Energía y Minería”, ponencia presentada en el Forum Latinoamericano Hidrogeno y Pilas de Combustible, Mar. 2005. Disponible en Colciencias, Programa Nacional de Investigaciones en Energía y Minería: www.colciencias.gov.co
- [2] D. Reyes y A. Ávila, “Modelaje multifísico de un sensor de gas”, artículo proyecto de tesis, Universidad de los Andes, Nov. 2005.
- [3] A. Méndez y A. Ávila, “Modelaje y simulación multifísica de un sensor de gas de SnO₂ en Coventorware™”, artículo proyecto de tesis, Universidad de los Andes, Nov. 2005.
- [4] A. Muñoz Jaramillo, *Formulación y validación del modelo funcional para un sensor de gas SnO₂*, tesis de grado, Universidad de los Andes, Jul. 2004.
- [5] H. Guerrero, P. Menini y F. Parret, “CO response of a nanostructured SnO₂ gas sensors doped with palladium and platinum”, *Sensors and Actuators B-Chemical*, Estados Unidos, vol. 103, fasc. 1, pp. 111-114, 2004.
- [6] E. B. Rudnyi y J. G. Korvink. “Model order reduction for large scale engineering models developed in Ansys. *Lecture Notes in Computer Science*, vol. 3732, pp. 349-356, 2006.
- [7] Ansys Inc., *Documentation for Ansys*, cap. 5: “Perfoming a full transient dinamyc analysis”. Ayuda del paquete de elementos finitos [manual del usuario].
- [8] O. Katsuhiko, *Ingeniería de control moderna*, 3ª ed. México: Pearson-Prentice Hall., 1995.
- [9] T. Bechtold et al. *Model order reduction of 3D electro-thermal model for a novel micromachined hotplate gas sensor*, IMTEK, University of Freiburg, 2003.
- [10] J. Hildenbrand, *Simulation and characterization of a micromachined gas sensor and preparation for model order reduction*, tesis Phd, Institute for Microsystem Technology, Albert Ludwig University Freiburg, Alemania, 2003.
- [11] C. Moosmann Christian, E. B. Rudnyi, A. Greiner Andreas y J. G. Korvink, “Model order reduction for linear convective thermal flow”, *Imtek*, Abr. 2004.
- [12] E. B. Rudnyi, “Computational lab ‘model reduction of a thermal model’. Disponible en (4-2009): <http://Evgenii.Rudnyi.Ru/>, <http://www.imtek.uni-freiburg.de/simulation/>
- [13] S. Astie, “Intération d’un capteur de Gaz à Oxyde Semi-conducteur sur Silicium”. Rapport LAAS 98537. Toulouse, 1998.