

行政院國家科學委員會專題研究計畫 期中進度報告

有限元素精簡模型 (FEWOR) 在微奈米機電元件之開發與應用

(1/2)

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC92-2213-E-002-083-

執行期間：92年08月01日至93年07月31日

執行單位：國立臺灣大學機械工程學系暨研究所

計畫主持人：楊耀州

計畫參與人員：顏柏青 簡志民

報告類型：精簡報告

處理方式：本計畫可公開查詢

中 華 民 國 93 年 5 月 31 日

有限元素精簡模型(FEWOR)
在微奈米機電元件之開發與應用(1/2)

計畫類別： 個別型計畫 整合型計畫

計畫編號：NSC 93-2213-E-002-038

執行期間： 92年 8月1日至 94年 7月 31日

計畫主持人：楊耀州

計畫參與人員：顏柏青 簡志民

成果報告類型(依經費核定清單規定繳交)： 精簡報告 完整報告

本成果報告包括以下應繳交之附件：

赴國外出差或研習心得報告一份

赴大陸地區出差或研習心得報告一份

出席國際學術會議心得報告及發表之論文各一份

國際合作研究計畫國外研究報告書一份

處理方式：除產學合作研究計畫、提升產業技術及人才培育研究計畫、列管計畫及下列情形者外，得立即公開查詢

涉及專利或其他智慧財產權， 一年 二年後可公開查詢

執行單位：國立台灣大學機械工程研究所

中 華 民 國 93 年 5 月 30 日

可供推廣之研發成果資料表

可申請專利

可技術移轉

日期：93年5月30日

<p>國科會補助計畫</p>	<p>計畫名稱：有限元素精簡模型(FEWOR) 在微奈米機電元件之開發與應用(1/2) 計畫主持人：楊耀州助理教授 計畫編號：NSC 93-2213-E-002-038 學門領域：控制</p>
<p>技術/創作名稱</p>	<p>MEMS FEWOR Platform</p>
<p>發明人/創作人</p>	<p>楊耀州，顏柏青</p>
<p>技術說明</p>	<p>本創作為全世界第一套適用於微奈米機電系統之EDA(Electronic Design Automation)模組 FEWOR (Finite Element With Orders Reduction, 有限元素降階精簡模型之整合模擬系統)。此開發出的系統非但能處理三維之幾何結構，其計算效率更將是傳統方法的一百至一千倍。針對線性系統，我們將建立完整的有限元素模型，並配合採用 Arnoldi-based 降階演算法[1][2]將原完整系統之龐大矩陣做降階。針對非線性系統，第一種為片段線性化法(piecewise linear method)[3]，將非線性的問題分為許多子線性模型之組合以近似原系統，並再分別對每個子線性系統作 Arnoldi 降階演算，最後組合所有的子降階系統並配合相對之權重函數，以得出原非線性系統的降階模型。另一類非線性系統分析法則為 Galerkin-based 降階演算法，最主要是利用 Karhunen-Loeve Decomposition[4][5]求出模型基底函數(basis function)，再由這些基底函數以求得原系統的降階精簡模型。</p>
<p>可利用之產業 及 可開發之產品</p>	<p>微機電產業，微機電設計分析之平台</p>
<p>技術特點</p>	<p>此開發出的系統非但能精確計算三維之微機電之幾何結構的反應，其計算效率更將是傳統方法的一百至一千倍。</p>
<p>推廣及運用的價值</p>	<p>可推廣至國內微機電產業的元件研發團隊，協助加速元件設計流程</p>

行政院國家科學委員會專題研究計劃期中成果報告

有限元素精簡模型(FEWOR)

在微奈米機電元件之開發與應用

計畫編號：NSC 93-2213-E-002-038

執行期限：92年8月1日至94年7月31日

主持人：楊耀州 臺大機械系助理教授

參與計畫人員：顏柏青 簡志民

一.摘要

中文摘要

本計劃之目標在於發展全世界第一套適用於微奈米機電系統之 EDA(Electronic Design Automation) 模組 FEWOR (Finite Element With OrdReduction, 有限元素降階精簡模型之整合模擬系統, 發音同"fewer") 預計此開發出的系統非但能處理三維之幾何結構, 其計算效率更將是傳統方法的一百至一千倍。計劃的研究重點, 將致力於三次元微奈米機電系統元件物理現象耦合之有限元素數值分析模型 (包括線性與非線性), 並研究降階精簡模型模組建立之演算法, 發展出精簡模型建立之整合計算軟體。

Abstract

This goal of this research is to develop the first finite-element reduced-order simulation platform for MNEMS systems, the FEWOR ((Finite Element With OrdReduction, pronounced as "fewer"), which is not only capable of solving 3D geometries, but also is expected to be about 100 to 1,000 times efficient than the methods that are widely used in the industries. The core technologies of this platform are the Galerkin-based algorithm and the Arnoldi-based algorithm, which are used to

generate low-order models from FEM approximations of multi-energy-domain MEMS systems.

二.計畫緣由與目的

微奈米機電產業近年來蓬勃發展, 各實驗室的原型 (prototype) 陸續開發成產品問世; 而奈米相關的研究更是當今研究的主流。相對於積體電路產業而言, 微奈米機電相關的 EDA 發展環境尚有極大的發展空間。舉例而言, 目前標準化的微奈米機電製程並不多且限制極大, 配合製程所發展出的元件模型庫及設計工具庫之功能並不成熟, 因此在系統整合 (包括微結構動力次系統、流體阻尼次系統、靜電 (磁) 力次系統、驅動次系統、感測次系統、電路控制系統等等) 的分析模擬多半無法進行, 且精確度不高。而更由於微奈米機電系統是一典型耦合(couple) 各不同領域的系統, 許多耦合的效應的精確物理 governing equations 尚未被導出或完全被瞭解, 更遑論精確的數值分析及最佳化設計。這些因素讓工程師在設計微奈米機電元件時無法如設計積體電路般享有方便環境及效率。

此外, 在許多狀況之下, 暫態的分析 (transient analysis) 的結果往往比靜態分析的結果更具價值。但對於機械結構動力或流體力學分面的暫態的分析, 卻需要極大的電腦計算資源 (計算時間及記憶容量等), 所以目

前即使部分套裝軟體提供此功能，極少的研究者應用於實際的例子中。如果更進一步要進行“暫態的”耦合物理效應之分析，以現在的電腦能力而言，在大部分的情形是相當不實際的。

本計劃發展的 EDA 模組 FEWOR，即是為了解決目前微奈米機電元件在系統分析模擬所遇到之瓶頸而所開發的。FEWOR 模擬演算法模組其重點在於不論是線性甚或是非線性的系統，皆能針對不同狀況建立精簡且精準的暫態物理耦合之模型，且不受運作模式的限制。此外，線性系統及非線性系統模型縮降的演算法(model order reduction, MOR)採用的方法也大有不同，簡介如下：

線性系統

針對線性系統，我們將建立完整的有限元素模型，並配合採用 Arnoldi-based 降階演算法[1][2]將原完整系統之龐大矩陣做降階，而由於此演算法的特性，即使新矩陣的級數遠比原始矩陣小，但新矩陣動態模擬的結果與原始矩陣的結果幾乎完全相同。

非線性系統

此處發展兩類型的降階演算模組。第一種為片段線性化法 (piecewise linear method)[3]，將非線性的問題分為許多子線性模型之組合以近似原系統，並再分別對每個子線性系統作 Arnoldi 降階演算，最後組合所有的子降階系統並配合相對之權重函數，以得出原非線性系統的降階模型。另一類非線性系統分析法則為 Galerkin-based 降階演算法，最主要是利用 Karhunen-Loeve Decomposition[4][5] 求出模型基底函數(basis function)，再由這些基底函數以求得原系統的降階精簡模型。

三.研究方法

a.有限元素法計算核心

本計劃將開發有限元素法之計算程式，將欲計算之區域網格化(meshing)後並配合各種邊界條件以建立三次元的數值模型 (numerical model)，並於發展的同時妥善建立資料 (物件) 結構，以期在日後發展其他領域之計算程式。目前本計劃將開發之有限元素法程式有三次元側向阻尼計算程式[6][7][8]及三次元熱傳導計算程式[9]，而其中的計算支配方程式皆以 diffusion equation 的型態出現，因此這裡推導其 3D 有限元素法的公式，首先支配方程式可簡化為下列的形式：

$$\nabla^2 u = a \frac{\partial u}{\partial t} \quad (1)$$

u 為系統變數(熱傳方程式中為溫度)， t 為時間， a 為可調整之係數

之後利用分部積分的技巧，並配合計算網格與邊界條件可將(1)式改為下列形式：

$$[M^e] \{\dot{u}\} + [K^e] \{u\} = \{Q^e\} \quad (2)$$

而 mass matrix 與 stiffness matrix 分別如下：

$$[M] = \int_{vol} a [N]^T [N] dvol \quad (3)$$

$$[K] = \int_{vol} [B]^T [C] [B] dvol \quad (4)$$

其中 natural coordinate 中的變數 x 、 y 、 z 與 global coordinate 中的變數 ξ 、 η 、 ζ 在如(3)(4)式中的積分可表示為下列的關係：

$$\begin{aligned} & \int_{vol} f(x, y, z) dx dy dz \\ &= \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 F(\xi, \eta, \zeta) |J| d\xi d\eta d\zeta \end{aligned} \quad (5)$$

再由(5)式可推導得：

$$[M^e] = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 a [N]^T [N] [J] d\xi d\eta d\zeta \quad (6)$$

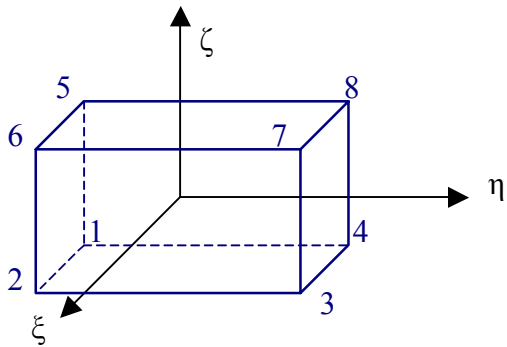
$$[K^e] = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 [B]^T [C] [B] [J] d\xi d\eta d\zeta \quad (7)$$

(6)(7)式中 $[C]$ 為材料性質矩陣， $[J]$ 則為 Jacobian 矩陣並與 $[B]$ 同列於下：

$$[J] = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial \zeta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{bmatrix} \quad (8)$$

$$[B] = [J]^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial \xi} & \frac{\partial N_2}{\partial \xi} & \dots & \frac{\partial N_n}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_1}{\partial \eta} & \frac{\partial N_2}{\partial \eta} & \dots & \frac{\partial N_n}{\partial \eta} \\ \frac{\partial N_1}{\partial \zeta} & \frac{\partial N_2}{\partial \zeta} & \dots & \frac{\partial N_n}{\partial \zeta} \end{bmatrix} \quad (9)$$

(9)式中的 N_n 為如圖一所示，使用 global coordinate 所定義出之計算公式， $N_1 \sim N_8$ 分別列於下：



圖一、global coordinate 變數定義示意圖

$$N_1 = 1/8(1-\xi)(1-\eta)(1-\zeta) \quad (10)$$

$$N_2 = 1/8(1+\xi)(1-\eta)(1-\zeta) \quad (11)$$

$$N_3 = 1/8(1+\xi)(1+\eta)(1-\zeta) \quad (12)$$

$$N_4 = 1/8(1-\xi)(1+\eta)(1-\zeta) \quad (13)$$

$$N_5 = 1/8(1-\xi)(1-\eta)(1+\zeta) \quad (14)$$

$$N_6 = 1/8(1+\xi)(1-\eta)(1+\zeta) \quad (15)$$

$$N_7 = 1/8(1+\xi)(1+\eta)(1+\zeta) \quad (16)$$

$$N_8 = 1/8(1-\xi)(1+\eta)(1+\zeta) \quad (17)$$

b. 線性 Arnoldi 降階演算法

如果要將原龐大系統用 Arnoldi 演算法“縮降”至一第 k 階的小系統，首先假設原線性系統可表為下列型式：

$$\dot{\bar{u}} = \mathbf{A} \cdot \bar{u} + \mathbf{B} \cdot v_{in} \quad (18)$$

$$\bar{y} = \mathbf{C}^T \cdot \bar{u} + \mathbf{D} \cdot v_{in}$$

(18)式其轉移函數若以泰勒級數展開可寫為：

$$T(s) = \mathbf{C}^T (\mathbf{I} + s\mathbf{A}^{-1} + s^2\mathbf{A}^{-2} + \dots) \bar{b} + \mathbf{D} \\ = \sum_{k=0}^{\infty} m_k s^k + \mathbf{D} \quad (19)$$

其中 $m_k = \mathbf{C}^T (\mathbf{A}^{-k}) \bar{b}$

此時可將(19)式展開成第 q 階的 Krylov subspace：

$$K_q(\mathbf{A}^{-1}, \bar{b}) = \text{span}\{\bar{b}, \mathbf{A}^{-1}\bar{b}, \dots, \mathbf{A}^{-(q-1)}\bar{b}\} \quad (20)$$

並可經由 Arnoldi 演算法穩定並循序漸進地求出前 q 項正交的向量 $\{v_i\} \in R^n$ ，如果陣列 \mathbf{V}_q 中每個縱列(column)的向量為 $\{v_i\}$ ，則原來動態系統可改寫為：

$$\dot{\bar{u}} = \mathbf{A}_q \cdot \bar{u} + \mathbf{B}_q \cdot v_{in} \quad (21)$$

$$\bar{y} = \mathbf{C}_q^T \cdot \bar{u} + \mathbf{D}_q \cdot v_{in}$$

其中

$$\mathbf{A}_q = \mathbf{V}_q^T \mathbf{A} \mathbf{V}_q \quad \mathbf{B}_q = \mathbf{V}_q^T \mathbf{B} \quad (22)$$

$$\mathbf{C}_q = \mathbf{V}_q^T \mathbf{C} \quad \mathbf{D}_q = \mathbf{D}$$

由於 q 值遠小於原系統的階數，此簡化的動態系統可直接經由一般系統分析軟體（或電路分析軟體 SPICE）來進一步快速的計算出微奈米機電複雜元件或整體系統的行為 [10][11]。

c. 非線性系統分析方法

在非線性系統中主要有兩類型的分析方法，其一為將非線性系統片段線性化 (piecewise linear)，主要是將非線性模型針對不同狀態分別作線性化的展開，再將各個片段線性的系統作 Arnoldi algorithm 降階計算，最後將這些片段的降階系統組合，用來

近似原非線性系統的解。此方法可以有效的模擬出系統真實的解，但是在建構出片段線性的系統時，需要先輸入一訓練輸入(training input)，再根據原系統所模擬的結果找出片段線性的模型，此方法所得出之精簡模型與原訓練輸入有很大的相關性，即外在環境的參數可能會對系統輸出有較大的影響。

另一類型用來分析非線性系統的方式為 Karhunen-Loeve Decomposition，此方法是利用有限元素法模擬數次原系統，紀錄原系統的暫態解(snapshot)，再將此結果使用 Karhunen-Loeve Decomposition 求出基底函數(basis function)，並利用這些基底函數找出精簡模型。

介紹 Karhunen-Loeve Decomposition 之前，先定義數個符號及函數， N 個任意的函數，我們稱之為 snapshots，符號為 $\{v_n\}$ ， $n=1,2,\dots,N$ ，要探討的重點是如何從這些 $\{v_n\}$ ，找出最具代表性的的函數 $\phi(x)$ ，幾個數學的符號如下：

$$v_n(x, y) : \quad \text{函數空間中的函數}$$

$$\{v_n\} : \quad \text{所有 snapshots 之組合}$$

$$(f, g) = \int_{\Omega} f(x)g(x)d\Omega : \quad \text{函數空間中的內積}$$

$$\langle v_n \rangle \equiv \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N v_n(x) : \quad \text{所有平均 snapshots 組合}$$

我們的目標為最大化

$$\lambda = \frac{\langle (\phi, v_n)^2 \rangle}{(\phi, \phi)} \quad (23)$$

利用內積的定義：

$$\begin{aligned} & \langle (\phi, v_n)^2 \rangle \\ &= \left\langle \int_{\Omega} \phi(x)v_n(x)dx \int_{\Omega} \phi(x')v_n(x')dx' \right\rangle \\ &= \int_{\Omega} \left\{ \int_{\Omega} \langle v_n(x)v_n(x') \rangle \phi(x)dx \right\} \phi(x')dx' \end{aligned} \quad (24)$$

接著定義函數 $k(x, x')$ 如下：

$$\begin{aligned} k(x, x') &= \langle v_n(x)v_n(x') \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N v_n(x)v_n^T(x) \end{aligned} \quad (25)$$

以及線性運算子 R ：

$$R\phi \equiv \int_{\Omega} k(x, x')\phi(x')dx' \quad (26)$$

因此可將(24)表示為

$$\langle (\phi, v_n)^2 \rangle = \int_{\Omega} \{R\phi\} \langle \phi \rangle dx = (R\phi, \phi) \quad (27)$$

因此最大化的問題(23)，可以轉變為特徵值(eigenvalue)的問題：

$$R\phi = \lambda\phi \quad (28)$$

將最大化(23)的 λ ，變為求出(28)中最大的特徵值，利用 Schmidt-Hilbert technique，將 $\phi(x)$ 假設如下：

$$\phi(x) = \sum_k \alpha_k v_k(x) \quad (29)$$

將(29)帶入(28)可得：

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N v_n(x)v_n^T(x') \sum_k \alpha_k v_k(x')dx' \\ &= \lambda \sum_n \alpha_n v_n(x) \end{aligned} \quad (30)$$

再將上式化簡：

$$C_{nk} \alpha_k = \lambda \alpha_n \quad (31)$$

$$C_{nk} \equiv \frac{1}{N} \int_{\Omega} v_n^T(x')v_k(x')dx' \quad (32)$$

由於 C_{nk} 是對稱 (symmetric) 且正定 (positive definite) 的矩陣，由特徵值問題所求出的特徵向量(eigenvector)，可代入(29)中找出 ϕ_k ，特徵值依大小排列 $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_n$ ，分別對應了 $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N$ ， ϕ_1 對應了最大的特徵值，也代表了 $\{v_n\}$ 中最主要的結構， ϕ_2 對應第二大的特徵值，也代表了 $\{v_n\}$ 次主要的結構，依此類推，因此可以將非線性系統作幾次完整的計算，紀錄不同時間的結果(snapshot)，利用 Karhunen-Loeve Decomposition 轉換為較精簡的模型，以便我們可以快速且精確的計算出系統的解。

四.研究結果

此部分我們將針對所發展的三次元熱傳有限元素法模組與三次元側向阻尼模組，其在微奈米機電耦合物理元件上的應用，作實際的模擬與分析；之後並配合所發展之降階演算法模組對其做系統降階，並比較降階之後系統與原有系統表現，最後再配合以實驗數據證明所發展之三次元有限元素 solver 之

正確性。

Thermal actuator (熱致動器)

三次元暫態熱傳分析其支配方程式如下所示[9]：

$$\nabla^2 T + \frac{1}{k} g(\bar{r}, t) = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (33)$$

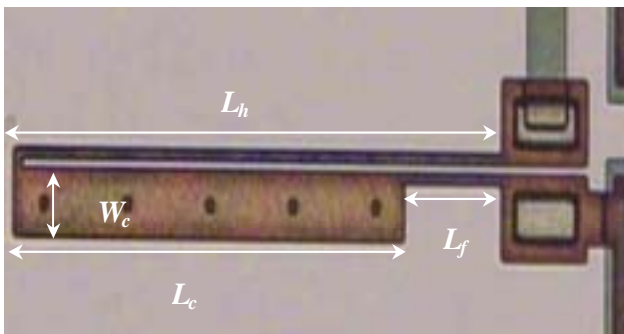
此處 T 溫度分佈， $g(\bar{r}, t)$ 為在 \bar{r} 上每單位體積的熱產生量， $\alpha = \frac{k}{\rho c}$ (其中 ρ 為密度， c 為比熱而 k 為熱傳導係數)

邊界條件與初始條件如下：

$$k_i \frac{\partial T}{\partial n_i} + h_i T = f_i(\bar{r}, t) \quad \text{Boundary } S_i, t > 0 \quad (34)$$

$$T(\bar{r}, t) = F(\bar{r}) \quad \text{Region } R, t = 0 \quad (35)$$

$F(\bar{r})$ 為初始溫度， $f_i(\bar{r}, t)$ 為邊界 S_i 上的熱流量， k_i 為在邊界 S_i 上的熱傳導係數， h_i 則為在邊界 S_i 上的熱對流係數



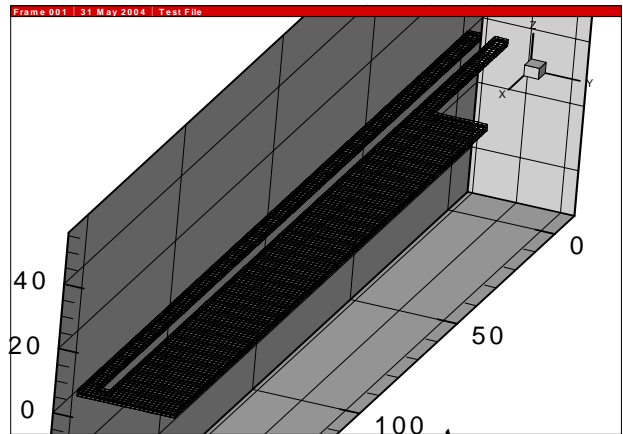
圖二、thermal actuator CCD 照片與尺寸示意

表一、thermal actuator 尺寸列表

Geometrical dimensions	Length(μm)
Length of hot arm (L_h)	200
Width of hot arm (W_h)	3
Length of cold arm (L_c)	160
Width of cold arm (W_c)	16
Gap (g)	3
Length of flexure (L_f)	40
Width of flexure (W_f)	3
Thickness (t)	2

首先利用表一所列之尺寸對 thermal actuator 進行網格化(如圖三所示)，之後再配合所發展之 3D 熱傳有限元素法 solver 可順利解出整個 thermal actuator 元件上各點的溫度分佈與輸入電壓之間的關係。我們比較了所發展的 3D

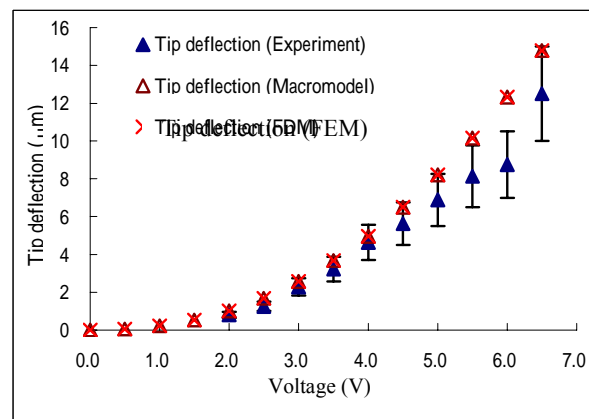
solver 與不同階數降階系統和 Coventorware 軟體計算出來的平均溫度之暫態結果，發現其誤差與計算時間之關係如表二所示，其中在階數為 5 左右的 MOR 模型其計算效率與誤差有較好之平衡，其 speed-up factor 達到 6 個 order，可大大加快單一物理耦合元件計算的效率，使得系統化的模擬不再遙不可及。圖四則比較 FEM、第 5 階 MOR 模型與實驗量測其輸入電壓與 thermal actuator 最頂端因熱變形(Tip deflection)之間的關係。



圖三、thermal actuator 有限元素法網格(由 Tecplot 所繪)

表二、各降階模型計算效率與誤差之比較

	Simulation time (sec)	Speed-up factor	Error (%)
MOR order = 2	<0.01	>2x10 ⁶	0.51
MOR order = 5	0.01	2x10 ⁶	0.50
MOR order=10	0.44	4x10 ⁴	0.50
FDM	18743.000		N/A



圖四、FEM、第 5 階 MOR 模型與實驗量測其輸入電壓與 tip deflection 之間的關係

五.參考文獻

1. A. Odabasioglu, M. Celik, and L. T. Pileggi, "PRIMA: passive reduced-order interconnect macro-modeling algorithm," in *Proc. IEEE Transaction on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, Vol. 17, No. 8, Aug. 1998, pp. 645-654.
2. Y.-J. Yang, M. Kamon, V. L. Rabinovich, C. Ghaddar, M. Deshpande, K. Greiner and J. R. Gilbert, "Modeling gas damping and spring phenomena In mems with frequency dependent macromodels," in Proc. IEEE 14th International Conference on Micro Electro-mechanical Systems Workshop (MEMS 2001), Interlaken, Switzerland, January 2001, pp. 365-368.
3. M. Rewienski, J. White, "A Trajectory Piecewise-Linear Approach to Model Order Reduction and Fast Simulation of Nonlinear Circuit and Micromachined Devices," in the proceedings of the International Conference on Computer-Aided Design, pp.252-257, 2001.
4. H. M. Park, M. W. Lee, "An Efficient Method of Solving the Navier-Stokes Equations for Flow Control," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 41, 1133-1151, 1998.
5. E. S. Hung and S. D. Senturia, "Generation Efficient Dynamical Models for Microelectromechanical Systems from a Few Finite-Element Simulation Runs," *Journal of Microelectromechanical Systems*, Vol. 8, No. 3, 1999.
6. J. A. Fay, *Introduction to Fluid Mechanics*, MIT Press, Cambridge, 1994.
7. R. Fox and A. T. McDonald, "Introduction to Fluid Mechanics," John Wiley & Sons, Inc., New York, 1985.
8. F. K. Moore, *Theory of Laminar Flow*, Princeton University Press, Princeton, 1964.
9. A. F. Mills, *Heat Transfer*, Richard D. IRWIN, INC., 1992.
10. Po-Ching Yen and Y.-J. Yang, "Time-domain reduced-order models of lateral viscous damping effects for 3d geometries," in *Proc. of MSM*, 2002, San Juan, Puerto Rico, USA, Apr. 2002, pp. 190-193.
11. T. Bechtold, E.B Rudnyi and J.G Korvink, Automatic Generation of Compact Electro-thermal models for semiconductor devices, *IEICE Transactions on Electronics*, 2003, v. E86C, N 3, pp. 459-465.