

УДК 53.082

Лисько В.В. канд. фіз.-мат. наук<sup>1,2</sup>



Лисько В.В.

<sup>1</sup>Інститут термоелектрики НАН і МОН України,  
вул. Науки, 1, Чернівці, 58029, Україна, e-mail: anatysh@gmail.com;

<sup>2</sup>Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича,  
вул. Коцюбинського 2, Чернівці, 58012, Україна

### НАБЛИЖЕННЯ В'ЯЗКОЇ РІДИНИ ПРИ МОДЕЛЮВАННІ ПРОЦЕСУ ЕКСТРУЗІЇ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНОГО МАТЕРІАЛУ НА ОСНОВІ $Bi_2Te_3$

*У процесі екструзії заготовки матеріалу деформуються в практично ідеально пластичних умовах. Такий процес може бути змодельований з використанням теорії гідродинаміки, де матеріал розглядається як рідина з дуже високою в'язкістю, яка залежить від швидкості та температури. Внутрішнє тертя шарів матеріалу, які рухаються, є також джерелом тепла, тому необхідно використовувати також рівняння переносу тепла в сукупності з гідродинамічною частиною задачі. Такий підхід є особливо ефективним для моделювання процесу екструзії термоелектричних матеріалів, коли наявні більші деформації. У даній роботі наведено результати об'єктно-орієнтованого комп'ютерного моделювання процесу гарячої екструзії термоелектричного матеріалу на основі  $Bi_2Te_3$ . Розглянуто випадки одержання циліндричних зразків круглого перерізу для різних конфігурацій матриці у процесах одноступінчастої та багаступінчастої екструзії. Отримані розподіли температури й швидкості течії матеріалу в матриці, а також розподіл напруг у матриці за рахунок зовнішнього тиску й теплових навантажень лягли в основу оптимізації устаткування для одержання екструдованого термоелектричного матеріалу. Бібл. 5, рис. 8, табл. 1.*

**Ключові слова:** екструзія, термоелектричний матеріал, моделювання

#### Вступ

Метод гарячої екструзії знаходить широке застосування у виробництві термоелектричних матеріалів [1 – 3]. Суть його полягає в продавлюванні через отвір у розігрітій прес-формі термоелектричного матеріалу. Основна перевага цього методу пов'язана з поліпшенням міцнісних характеристик матеріалу. При цьому їх термоелектричні властивості можуть залишатися на рівні властивостей матеріалів, отриманих кристалізацією з розплаву.

Оскільки гаряча екструзія зазвичай провадиться за досить високих температур, структура екструдованого матеріалу формується у процесі пластичної деформації, в результаті чого створюється текстура матеріалу. Умови екструзії – форма фільтри, температура й швидкість деформації, величина деформації, структура вихідної заготовки – впливають на кінцеву структуру й властивості екструдованого матеріалу. Одним з ефективних способів вивчення впливу цих умов на формування структури й текстури екструдованого матеріалу є математичне моделювання процесу екструзії в комбінації з експериментальними результатами структурних досліджень [4].

Метою даної роботи є створення комп'ютерної моделі процесу гарячої екструзії термоелектричного матеріалу на основі  $Bi_2Te_3$  для дослідження розподілів температури й швидкості течії матеріалу в матриці, а також розподілу напруг у матриці за рахунок зовнішнього тиску й теплових навантажень, які можуть бути основою оптимізації устаткування для одержання екструдованого термоелектричного матеріалу.

### Фізична, математична й комп'ютерна моделі екструзії

Для побудови комп'ютерної моделі процесу гарячої екструзії використано пакет прикладних програм об'єктно-орієнтованого моделювання Comsol Multiphysics [5]. У процесах екструзії початкові заготовки матеріалу деформуються в гарячому твердому стані в практично ідеальних пластичних умовах. Такі процеси можна змоделювати, використовуючи теорію гідродинаміки, де матеріал розглядається як рідина з дуже високою в'язкістю, яка залежить від швидкості й температури. Внутрішнє тертя рухомих сферичних частинок матеріалу служить джерелом тепла, тому у комплексі з гідродинамічними рівняннями використовуються також рівняння переносу тепла. Такий підхід особливо ефективний для моделювання процесу екструзії термоелектричних матеріалів, коли присутні більші деформації. Крім того, розроблена комп'ютерна модель дозволяє визначати розподіл напруг у матриці, зумовлений зовнішнім тиском та тепловими навантаженнями.

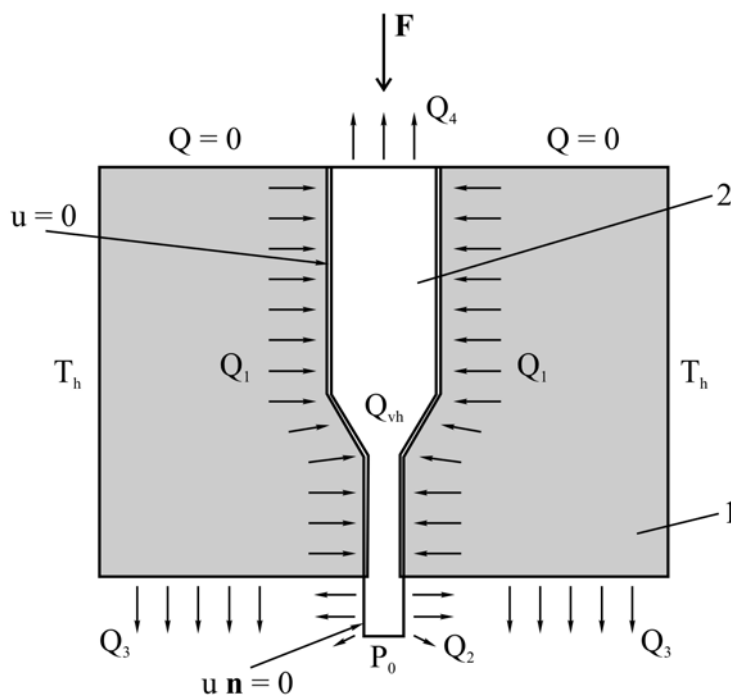


Рис. 1. Фізична модель процесу екструзії

Фізичну модель процесу екструзії наведено на рис. 1. У моделі розглядається стаціонарний випадок проходження через матрицю 1 циліндричної заготовки матеріалу 2, отриманої холодним пресуванням.

Для знаходження розподілів швидкостей і температур, необхідно розв'язати наступну систему рівнянь [5]:

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) = \nabla \left[ -p\mathbf{I} + \eta(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{2}{3}\eta(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I} \right] + \mathbf{F};$$

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0;$$

(1)

$$\rho C_p \mathbf{u} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (\kappa \nabla T) + Q_{vh};$$

$$Q_{vh} = \eta(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I} : \nabla \mathbf{u}.$$

з відповідними граничними умовами:

- термостатована бічна поверхня матриці:  $T = T_h$ ,
- конвективний теплообмін бічної поверхні зразка після виходу з матриці:

$$-\mathbf{n} \cdot (-\kappa \nabla T) = h_2(T - T_0),$$

- відвід тепла по елементах конструкції, не показаних на рис. 1, з нижньої частини матриці й верхньої частини заготовки термоелектричного матеріалу:

$$-\mathbf{n} \cdot (-\kappa \nabla T) = h_3(T - T_0), \quad -\mathbf{n} \cdot (-\kappa \nabla T) = h_4(T - T_0),$$

- теплова ізоляція верхньої частини матриці:

$$-\mathbf{n} \cdot (-\kappa \nabla T) = 0,$$

- вхідний тиск на заготовку:  $p = p_1$ ,
- атмосферний тиск на виході зразка з матриці:  $p = p_0 = 1 \text{ атм.}$ ,
- рівність нулю швидкості рідини на границі дотику з матрицею:  $\mathbf{u} = 0$ ,
- рівність нулю перпендикулярної до бічної сторони зразка складової швидкості рідини після її виходу з матриці:  $\mathbf{u} \mathbf{n} = 0$ ,

де:  $\mathbf{u}$  – поле швидкості,  $\rho$  – щільність,  $p$  – тиск,  $\eta$  – коефіцієнт динамічної в'язкості,  $\kappa$  – теплопровідність,  $\mathbf{F}$  – векторне поле масових сил,  $Q_{vh}$  – інтенсивність надходження тепла внаслідок внутрішнього тертя,  $\mathbf{I}$  – одинична матриця,  $h_2 - h_4$  – коефіцієнти теплообміну,  $T_0$  – температура навколишнього середовища.

Враховані також нагрівання за рахунок внутрішнього тертя та контактний тепловий опір на границі дотику матеріалу й матриці. Властивості термоелектричного матеріалу й матеріалу матриці, використані при моделюванні, наведено в таблиці.

*Таблиця*

*Властивості матеріалів*

1	Термоелектричний матеріал	Теплопровідність, Вт/(м* К)	4
		Щільність, кг/ м <sup>3</sup>	7600
		Теплоємність, Дж/(кг* К)	150
2	Сталь (матриця)	Теплопровідність, Вт/(м* К)	24.3
		Щільність, кг/ м <sup>3</sup>	7850
		Теплоємність, Дж/(кг* К)	500

Властивості термоелектричного матеріалу, який розглядається при моделюванні як рідина з високою в'язкістю, визначено експериментально, і їх кореляцію співставлено з літературними даними. Для даної моделі необхідно було визначити еквівалентну в'язкість досліджуваної рідини. Еквівалентні напруги фон Мізеса можуть бути знайдені із загального девіаторного тензору напруг [5] як

$$\sigma_{eqv} = \sqrt{\frac{3}{2} \tau : \tau}$$

або, використовуючи  $\tau = 2\eta \dot{\varepsilon}$ , де  $\dot{\varepsilon}$  – швидкість деформації,  $\eta$  – в'язкість, як

$$\sigma_{eqv} = \sqrt{6\eta^2 \varepsilon : \varepsilon} . \quad (3.2)$$

Представивши еквівалентну швидкість деформації як

$$\phi_{eqv} = \sqrt{\frac{3}{2} \varepsilon : \varepsilon}$$

вираз (3.2) можна подати у вигляді

$$\sigma_{eqv} = 3\eta\phi_{eqv} .$$

Тензор швидкості деформації визначається в такий спосіб

$$\dot{\varepsilon} = \frac{\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T}{2} = \frac{1}{2} \dot{\gamma} .$$

Швидкість зрушення:

$$\dot{\gamma} = |\dot{\gamma}| = \sqrt{\frac{1}{2} \dot{\gamma} : \dot{\gamma}} .$$

Відповідно,

$$\phi_{eqv} = \frac{1}{\sqrt{3}} \dot{\gamma} .$$

Правило потоку

$$\sigma_{eqv} = \kappa_f$$

враховує, що пластична течія виникає коли еквівалентна напруга,  $\sigma_{eqv}$ , досягає напруги плинину  $\kappa_f$ . В'язкість визначається як

$$\eta = \frac{\kappa_f}{3\phi_{eqv}} .$$

Величина загальної напруги потоку дається виразом для узагальненої функції Зенера-Голломона

$$\eta = \frac{a \sinh \left( \left( \frac{Z}{A} \right)^{1/n} \right)}{\sqrt{3} \alpha \dot{\gamma}}$$

де:  $A = 2.39 \cdot 10^8 \text{ c}^{-1}$ ,  $n = 2.976$ ,  $\alpha = 0.052 \text{ 1/МПа}$ ,  $Z = 1/\sqrt{3} \dot{\gamma} e^{(Q/RT)}$ ,  $Q = 153 \text{ кДж/моль}$ ,  $R = 8.314 \text{ Дж/К}\cdot\text{моль}$  [5].

На рис. 2. наведено сітку методу кінцевих елементів, який використовується в Comsol Multiphysics.

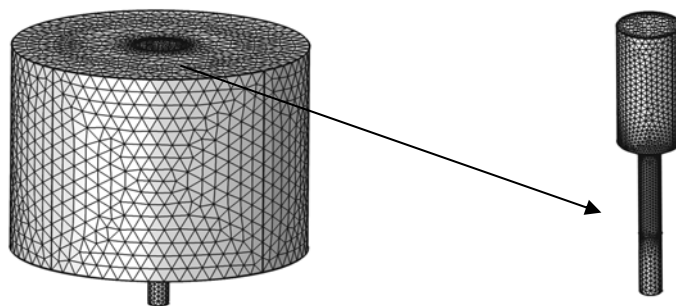


Рис. 2. Сітка методу кінцевих елементів.

### Результати комп'ютерного моделювання

Поля швидкостей і розподілу температури в матриці й термоелектричному матеріалі, отримані комп'ютерним моделюванням для різних конфігурацій матриці (кутів  $\gamma$ ) наведені на рис. 3-6. Кольором позначена швидкість у мм/хв. і температура в градусах Цельсія.

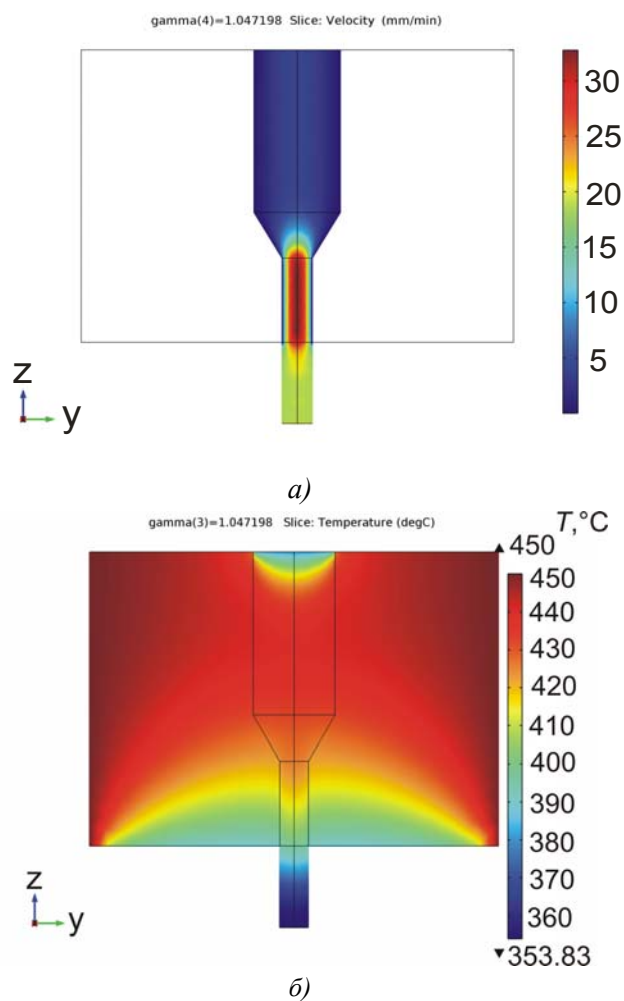
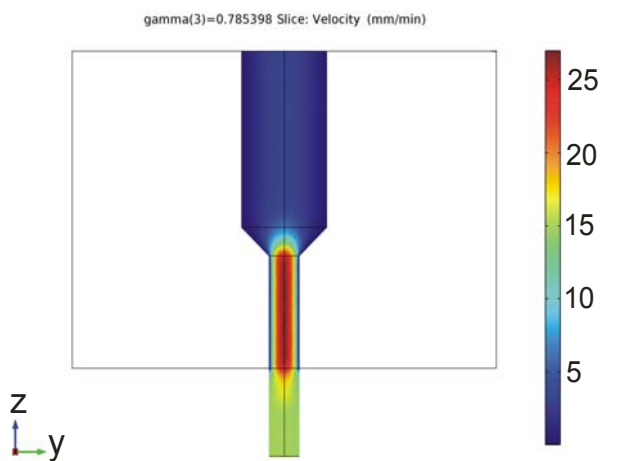
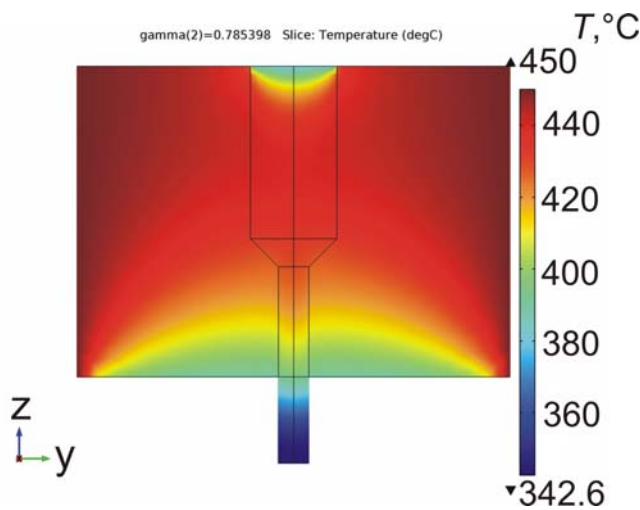


Рис. 3. Поле швидкості (а) термоелектричного матеріалу усередині матриці й розподіл температури (б) у матеріалі й матриці ( $\gamma = 30^\circ$ )

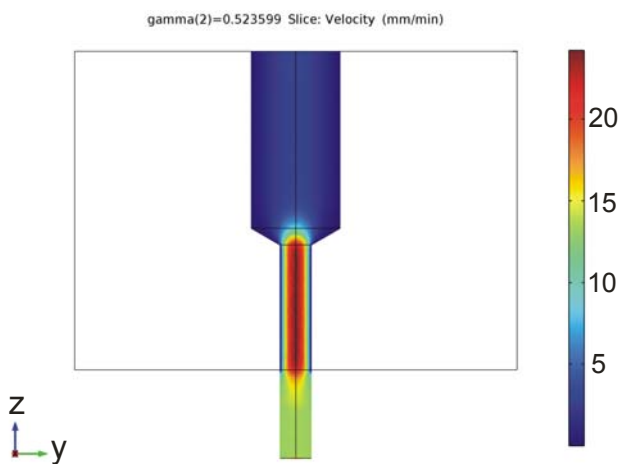


a)

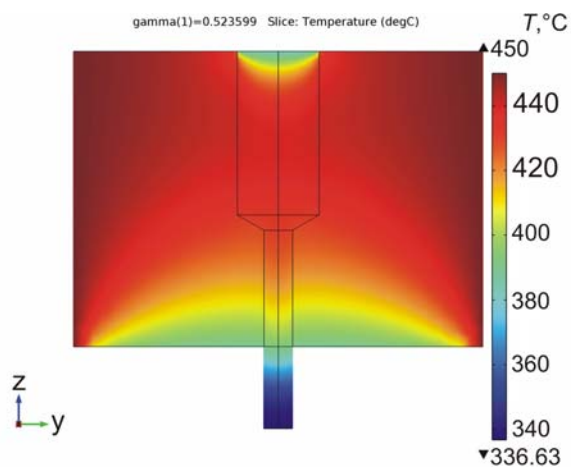


б)

Рис. 4. Поле швидкості (а) термоелектричного матеріалу усередині матриці й розподіл температури (б) у матеріалі й матриці ( $\gamma = 45^\circ$ )

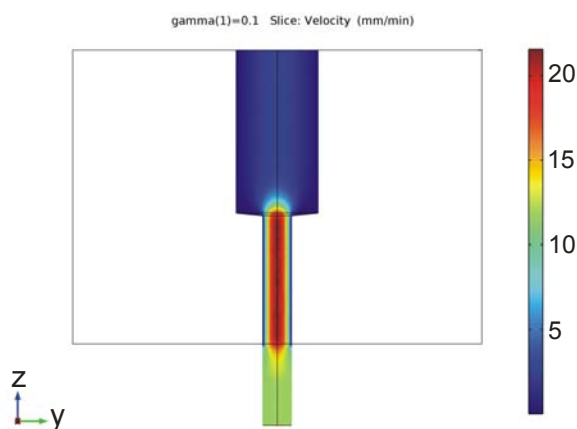


a)

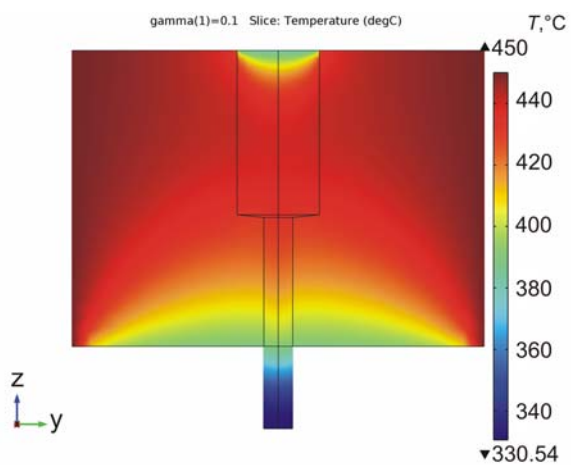


б)

Рис. 5. Поле швидкості (а) термоелектричного матеріалу усередині матриці й розподіл температури (б) у матеріалі й матриці ( $\gamma = 60^\circ$ )



а)



а)

Рис. 6. Поле швидкості (а) термоелектричного матеріалу усередині матриці й розподіл температури (б) у матеріалі й матриці ( $\gamma = 90^\circ$ )

Конфігурацію матриці для випадку триступінчастої екструзії зображено на рис. 7.

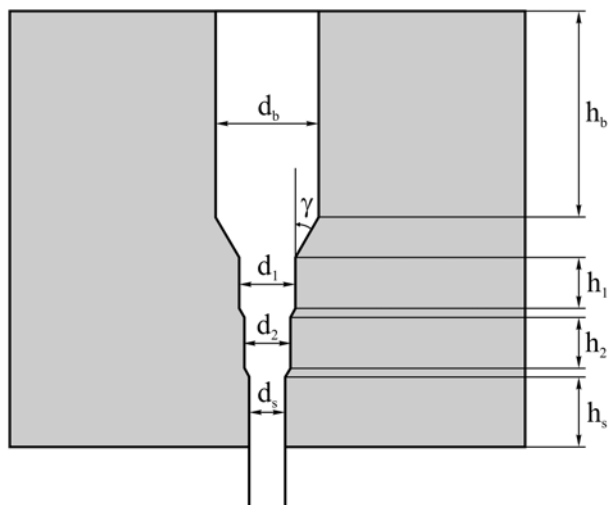


Рис. 7. Матриця для триступінчастої екструзії термоелектричного матеріалу

Поле швидкості й розподіл температури для такого випадку наведені на рис. 8.

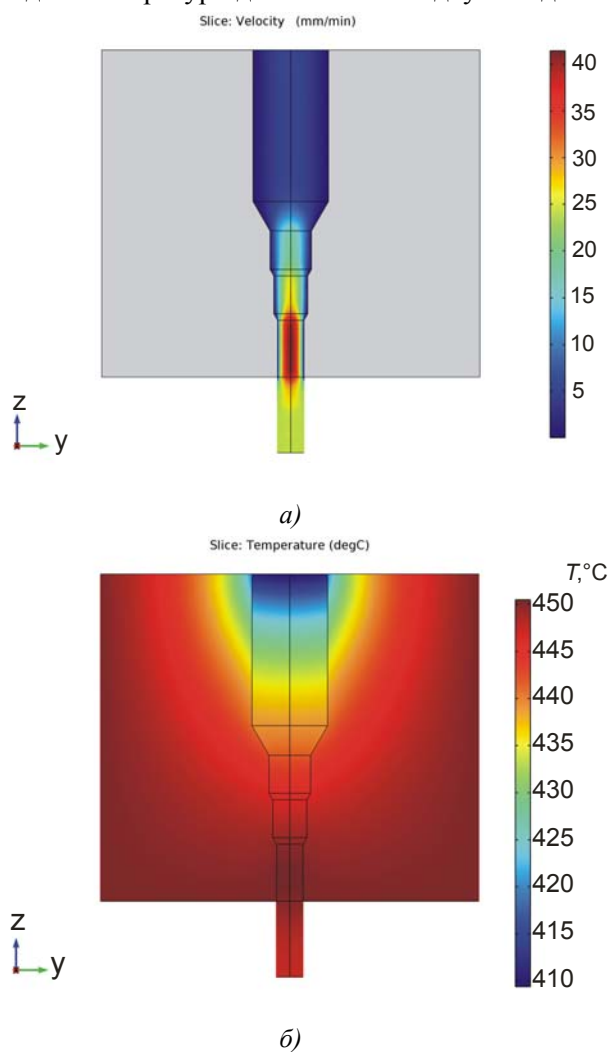


Рис. 8. Поле швидкості (а) термоелектричного матеріалу усередині матриці й розподіл температури (б) у матеріалі й матриці для випадку триступінчастої екструзії



Розроблена комп'ютерна модель може бути основою для оптимізації конструкції устаткування для екструзії термоелектричного матеріалу на основі  $Bi_2Te_3$  з метою підвищення ефективності його роботи, а також поліпшення добротності одержуваного матеріалу.

### Висновки

1. Створено комп'ютерну модель процесу гарячої екструзії термоелектричного матеріалу на основі  $Bi_2Te_3$ , яка може бути використана для дослідження розподілів температури й швидкості плинку матеріалу в матриці, а також розподілу напруг у матриці за рахунок зовнішнього тиску й теплових навантажень.
2. Отримані розподіли температури й поля швидкостей залежно від конфігурації матриці для випадку одноступінчастої екструзії термоелектричного матеріалу на основі  $Bi_2Te_3$ .
3. Вивчено поведінка термоелектричного матеріалу при проходженні його через матрицю для випадку багатоступінчастої екструзії термоелектричного матеріалу на основі  $Bi_2Te_3$ .

### Література

1. Булат Л. П. Термоэлектрическое охлаждение/ Л. П. Булат – СПб. : СПбГУНиПТ, 2002. – 147 с.
2. Сабо Е. П. Технология халькогенидных термоэлементов. Физические основы / Е. П. Сабо // Термоэлектричество. – 2006. – № 1. – С. 45 — 66.
3. Патент RU 2475333 С1. Способ экструзии термоэлектрического материала на основе халькогенидов висмута и сурьмы. А.И. Сорокин, Ю.Н. Пархоменко, В.Б. Освенский, М.Г. Лаврентьев, В.В. Каратаев, И.А. Драбкин. – Заявка от 19.09.2011.
4. Лаврентьев М.Г. Теоретическое и экспериментальное исследование формирования структуры термоэлектрического материала на основе твердых растворов  $(Bi, Sb)_2 Te_3$ , полученного методом горячей экструзии / М.Г. Лаврентьев, В.Б. Освенский, М.В. Меженный, А.И. Простомолотов, В.Т. Бублик, Н.Ю. Табачкова // XIII Межгосударственный Семинар “Термоэлектрики и их применения”. – Санкт-Петербург, Россия, 2012.
5. Fluid-Structure Interaction in Aluminum Extrusion // Structural Mechanics Module Model Library. – COMSOL AB, 2008. – p. 301-316.

Надійшла до редакції 25.02.2019

**Лысько В.В.**, канд. физ.-мат. наук<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт термоэлектричества НАН и МОН Украины,  
ул. Науки, 1, Черновцы, 58029, Украина, e-mail: anatysh@gmail.com;

<sup>2</sup>Черновицкий национальный университет им. Ю.Федьковича,  
ул. Коцюбинского, 2, Черновцы, 58012, Украина

**ПРИБЛИЖЕНИЕ ВЯЗКОЙ ЖИДКОСТИ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ  
ПРОЦЕССА ЭКСТРУЗИИ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО  
МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ  $Bi_2Te_3$**

*В процессе экструзии заготовки материала деформируются в практически идеальных пластических условиях. Такой процесс может быть смоделирован с использованием теории гидродинамики, где материал рассматривается как жидкость с очень высокой вязкостью, зависящей от скорости и температуры. Внутреннее трение движущихся слоев материала служит в качестве источника тепла, поэтому необходимо использовать также уравнения переноса тепла в совокупности с гидродинамической стороной задачи. Такой подход является особенно эффективным для моделирования процесса экструзии термоэлектрических материалов, когда присутствуют большие деформации. В настоящей работе приведены результаты объектно-ориентированного компьютерного моделирования процесса горячей экструзии термоэлектрического материала на основе  $Bi_2Te_3$ . Рассмотрены случаи получения цилиндрических образцов круглого сечения для различных конфигураций матрицы при одноступенчатой и многоступенчатой экструзиях. Получены распределения температуры и скорости течения материала в матрице, а также распределения напряжений в матрице за счет внешнего давления и тепловых нагрузок, которые легли в основу оптимизации оборудования для получения экструдированного термоэлектрического материала. Библиография, рис. 8, табл. 1.*

**Ключевые слова:** экструзия, термоэлектрический материал, моделирование.

V.V. Lysko, *cand. phys.-math. sciences*<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Institute of Thermoelectricity of the NAS and MES of Ukraine,  
1, Nauky str, Chernivtsi, 58029, Ukraine, *e-mail: anatyck@gmail.com*;

<sup>2</sup>Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University,  
2, Kotsiubynsky str., Chernivtsi, 58012, Ukraine

## VISCOUS FLUID APPROXIMATION WHEN SIMULATING $Bi_2Te_3$ BASED THERMOELECTRIC MATERIAL EXTRUSION PROCESS

*In the process of extrusion, billets of material are deformed under virtually perfect plastic conditions. Such a process can be simulated using the hydrodynamic theory, where a material is regarded as a fluid of very high viscosity which is a function of velocity and temperature. The internal friction of the moving layers of the material serves as a heat source, so it is also necessary to use the heat transfer equation in conjunction with the hydrodynamic aspect of the problem. This approach is especially effective for simulating the extrusion process of thermoelectric materials when large deformations are present. This paper presents the results of an object-oriented computer simulation of the process of hot extrusion of  $Bi_2Te_3$  based thermoelectric material. Cases of producing cylindrical samples of circular cross section for various matrix configurations for single-stage and multi-stage extrusion are considered. The distributions of temperature and flow velocity of material in the matrix are obtained, as well as stress distribution in the matrix due to external pressure and thermal loads, which formed the basis for optimization of equipment for producing extruded thermoelectric material. Bibliography, Fig. 8, Tabl. 1.*

**Key words:** extrusion, thermoelectric material, modeling.

## References

1. Bulat L. P. (2002). *Thermoelectric cooling*. St.-Petersburg: St.-Petersburg State Academy of Cool and Food Technologies.
2. Sabo E. P. (2006). Technology of chalcogenide thermoelements. Physical fundamentals. *J. Thermoelectricity*, 1, 45-66.
3. *Patent of RF 2475333 C1* (2011). Sorokin A.I., Parkhomenko Yu.N., Osvenskyi V.B., Lavrentiev M.G., Karataiev V.V., Drabkin I.A. Extrusion process of thermoelectric material based on bismuth and antimony chalcogenides [in Russian]. .
4. Lavrentiev M.G., Osvenskyi V.B., Mezhenyi M.V., Prostomolotov A.I., Bublik V.T., Tabachkova N.Yu. (2012). Teoreticheskoie i eksperimentalnoie issledovaniie formirovaniia struktury termoelektricheskogo materiala na osnove tverdykh rastvorov  $(Bi, Sb)_2Te_3$  poluchennogo metodom goriachei ekstruzii [Theoretical and experimental research on the formation of structure of thermoelectric material based on  $(Bi, Sb)_2Te_3$  solid solutions obtained by hot extrusion method. XIII Interstate Workshop "Thermoelectrics and Their Applications" (St.Petersburg, Russia, 2012).
5. Fluid-structure interaction in aluminum extrusion (2008). *Structural Mechanics Module Model Library*. COMSOL AB, p. 301-316.

Submitted 25.02.2019