

УДК 53.082

Анатичук Л.І., *акад. НАН України*^{1,2}
Черкез Р.Г. *канд. фіз-мат. наук, в.о. професор*^{1,2}
Щербатий Д.В.²

¹Інститут термоелектрики НАН і МОН України,
вул. Науки, 1, Чернівці, 58029, Україна,
e-mail: anatych@gmail.com;

²Чернівецький національний університет
імені Юрія Федьковича, вул. Коцюбинського 2,
Чернівці, 58012, Україна

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОНИКНОГО ГЕНЕРАТОРНОГО ТЕРМОЕЛЕМЕНТА

В роботі представлені результати комп'ютерних досліджень 3D моделі проникного генераторного термоелемента. Приведено фізичну модель та конструкцію проникного термоелемента, представлено її математичний опис. Створено метод розрахунку термоелемента на основі пакета прикладних комп'ютерних програм Comsol Multiphysics. Розраховано залежності енергетичних характеристик термоелемента з матеріалів на основі Bi-Te-Se-Sb від висоти вітки термоелемента.

Ключові слова: проникний термоелемент, комп'ютерне моделювання, генерація електричної енергії, енергетичні характеристики.

Вступ

Найбільш широке застосування термоелектричних перетворювачів енергії засновано на використанні термопарного елемента [1, 2]. Ефективність перетворення енергії якого визначається параметром добротності використаних матеріалів Z . Тому, пошук матеріалів з максимальним значенням параметра добротності стає основною задачею термоелектричного матеріалознавства. Однак, незважаючи на інтенсивні дослідження, в цьому напрямку, суттєвого зростання добротності за останні 20-30 років не спостерігається [3, 4]. Максимальні значення безрозмірного параметру добротності термоелектричних матеріалів промислового використання залишаються на рівні $1 \div 1.2$. Отже, для покращення ефективності необхідно використання нових, нетрадиційних підходів які полягають у використанні інших нетрадиційних варіантів фізичних моделей термоелементів, що є основною складовою термоелектричного перетворювача енергії.

Одним із них є використання термоелементів із розвиненою внутрішньою поверхнею

теплообміну – проникних термоелементів. В таких термоелементах теплообмін з джерелом та стоком тепла відбувається не тільки на спаях, а й в об'ємі вітки. Вже перші теоретичні [5] та експериментальні [6] дослідження для охолодження потоків газів показали на їх перспективність. Вони вказують на можливість покращення ефективності перетворення енергії в 1.3 ÷ 1.4 рази.

Однак, такі дослідження були проведені для моделі яка складна для практичної реалізації. Тому, необхідно створення та дослідження більш реальної 3D моделі проникного термоелемента, що є метою даної роботи.

Фізична модель та її математичний опис

Фізичну модель проникного термоелемента, у якого теплообмін з теплоносієм відбувається не тільки через комутаційні пластини, а й з бічними поверхнями вітки, наведено на рис. 1. Вона включає вітки n – та p – типу провідності (2, 10) охоплені адіабатичною ізоляцією 1 та 8, які разом утворюють канали 5, 6, 9. Через канал 6 подається теплоносієм 7 з температурою T_h який перетікає через канали 3, 5 та 5, 9. Вітки виконані з однорідного матеріалу на основі $Bi-Te$ з максимальним значенням добротності Z в інтервалі температур 20 ÷ 320 °С. Температурну залежність параметрів матеріалу слід врахувати. Комутаційні пластини c виконані з міді, комутаційний опір – 10^{-6} Ом см². Температура T_0 нижніх комутаційних пластин термостатовано. Вітки n – та p – типу провідності з'єднані між собою тонким прошарком 14, теплопровідністю, електропровідністю та товщиною яких нехтуємо. Матеріал віток є однорідним і ізотропним з відомими температурними залежностями: електропровідності $\sigma(T)$, коефіцієнта термоЕРС $\alpha(T)$, теплопровідності $\kappa(T)$. В термоелектричному середовищі враховані об'ємні ефекти Трмсона, Джоуля-Ленса та приконтактного ефекту Пельтьє. Температура теплоносія на вході в термоелемент приймалась рівній температурі гарячих спаїв. Розмір термоелементу в напрямі, перпендикулярному до площини рисунка – d , величина $d = a$. Площина $d = 0$ і $d = a$ є адіабатичними ізоляціями, що формують канали 5, 6, 9, Тертя між теплоносієм та адіабатичними ізоляціями 1, 8 відсутнє.

На бічній поверхні віток 2 комутаційних пластин 4 які знаходяться в тепловому контакті з теплоносієм 4, теплообмін описується законом Ньютона-Ріхмана:

$$q_0 = \alpha_T(t - T), \quad (1)$$

де α_T – коефіцієнт теплообміну, T – температура вітки термоелемента, t – температура теплоносія.

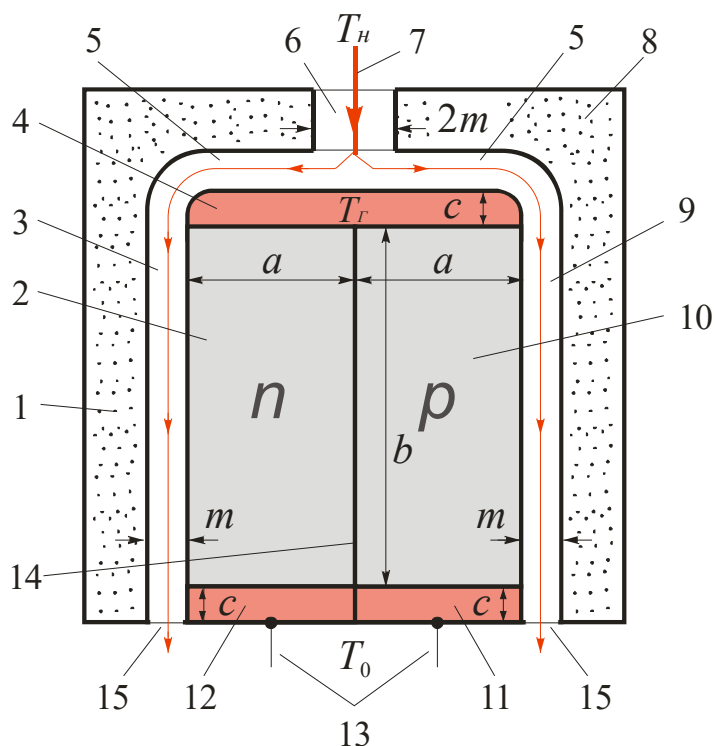


Рис. 1. Фізична модель проникного термоелемента: 1 - адіабатична ізоляція, 2 - витки *n*-типу, 3 - канали, 4 - комутаційна пластина, 5 - канал, 6 - канал, 7 - теплоносії, 8 - адіабатична ізоляція, 9 - канал, 10 - витка *p*-типу, 11, 12 - комутаційні пластини, 13 - електричні контакти, 14 - прошарок між відками *n*- і *p*-типу, 15 - виходи каналів.

Система рівнянь, що описує розподіл температури і потенціалу в термоелектричному середовищі описується фундаментальними законами збереження енергії та носіїв струму [7]:

$$\vec{\nabla} \vec{W} = 0 \quad (2)$$

$$\vec{\nabla} \vec{i} = 0 \quad (3)$$

де $\vec{W} = \vec{q} + U\vec{i}$ - густина потоку енергії.

Використавши узагальнені закони Фур'є та Ома для термоелектричного середовища:

$$\vec{q} = -\kappa \vec{\nabla} T + \alpha \vec{i} T \quad (4)$$

$$\vec{i} = -\sigma (\vec{\nabla} U + \alpha \vec{\nabla} T) \quad (5)$$

де U – потенціал, κ – коефіцієнт теплопровідності, α – коефіцієнт термоЕРС, σ – електропровідність.

Можна отримати систему диференціальних рівнянь для знаходження розподілів температур та потенціалів:

$$\left. \begin{aligned} \bar{\nabla} \kappa \bar{\nabla} T + \frac{i^2}{\sigma} - T \bar{i} \bar{\nabla} \alpha &= 0; \\ \bar{\nabla} (-\sigma(\bar{\nabla} U + \alpha \bar{\nabla} T)) &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

Для опису руху теплоносія в каналі використовується система рівнянь Нев'є-Стокса та рівняння неперервності, а для розподілу температури в теплоносії – рівняння теплопровідності.

Рівнянь Нев'є-Стокса та рівняння неперервності можна записати у вигляді [8]:

$$\left. \begin{aligned} \rho \frac{d\bar{g}}{dt} &= \rho \bar{F} - \bar{\nabla} P + \mu \bar{\nabla}^2 \bar{g} + \frac{1}{3} \mu \bar{\nabla} (\text{div} \bar{g}), \\ \text{div} \rho \bar{g} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

Ліва частина (7) являє собою силу інерції рідини. Перший доданок у правій частині (7) – масову силу, другий – дію поверхневих сил тиску (нормальних напружень), а останні два доданки – дію дотичних складових поверхневих сил (сил внутрішнього тертя).

Теплообмін в рідині описується рівнянням теплопровідності [9]:

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + (\bar{g} \bar{\nabla}) T \right) = -(\bar{\nabla} \bar{q}) + \sum_{i,j} \tau_{ij} S_{ij} - \frac{T}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\bar{g} \bar{\nabla}) P \right) + Q \quad (8)$$

де ρ – густина, C_p – теплоємність, T – температура, \bar{g} – вектор швидкості рідини, \bar{q} – густина потоку тепла, P – тиск, τ_{ij} – тензор в'язкого напруження, де η – в'язкість, I – одиничний тензор, \bar{S}_{ij} – тензор швидкості деформації.

Оскільки дана задача розглядається для стаціонарного випадку, то ліва частина першого рівняння системи (7) рівна нулю. Впливом масових сил також нехтуємо, тоді перший доданок у лівій частині цього ж рівняння теж рівний нулю. Рівняння (8) теж необхідно записати для стаціонарного випадку, а нагрівом рідини за рахунок внутрішнього тертя, стисненням рідини, а також нагрівом рідини за рахунок внутрішніх джерел тепла нехтуємо. Тоді система рівнянь Нев'є-Стокса, неперервності та теплопровідності для даної задачі запишеться у виді:

$$\left. \begin{aligned} -\vec{\nabla}P + \mu\vec{\nabla}^2\vec{g} + \frac{1}{3}\mu\vec{\nabla}(\operatorname{div}\vec{g}) &= 0, \\ \operatorname{div}\rho\vec{g} &= 0, \\ \rho C_p(\vec{g}\vec{\nabla})T + \vec{\nabla}\vec{q} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

Граничні умови, що описують спряжену задачу використовуються в даній задачі мають наступний вигляд:

– для термоелектричного середовища:

$$\text{температура} - \begin{cases} T|_0 = 300K \\ T|_{z_h} = \alpha_T(T_h - T) \end{cases}, \quad (10)$$

$$\text{потенціал} - \begin{cases} U|_0 = 0 \\ U|_{x_3} = U_0 \end{cases}, \quad (11)$$

– для теплоносія:

$$\text{швидкість} - \begin{cases} g|_0 = g_0 \\ g|_{z_h} = P_0 = 0 \\ g|_{S_0} = 0 \end{cases}, \quad (12)$$

$$\text{температура на вході} - t|_{z_h} = T_h \quad (13)$$

де g_0 – початкова швидкість теплоносія, U_0 – фіксоване значення потенціалу, S_0 – бічна поверхня термоелемента.

Реалізація поставленої задачі в пакеті прикладних комп'ютерних програм Comsol Multiphysics

Для розрахунку поставленої задачі було обрано пакет прикладних комп'ютерних програм Comsol Multiphysics, а саме – рівняння в часткових похідних (*PDE modes*). Де одним із способів представлення рівняння є коефіцієнтна форма:

$$e_a \frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2} + d_a \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{\nabla}(-c\vec{\nabla}\vec{u} - \alpha\vec{u} + \gamma) + \beta\vec{\nabla}u + a\vec{u} = f \quad (14)$$

Дане рівняння використано для термоелектричного середовища і приведено до вигляду $\vec{\nabla}(-c\vec{\nabla}\vec{u})=0$. Для цього e_a , d_a , α , γ , β , a зануляються, а величину c записують у вигляді матриці:

$$c = \begin{pmatrix} \kappa + \alpha^2 \sigma T + \sigma U \alpha & \alpha T \sigma + \sigma U \\ \alpha \sigma & \sigma \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Причому вектор \vec{u} має такий вигляд матриці:

$$\vec{u} = \begin{pmatrix} T \\ U \end{pmatrix}. \quad (16)$$

Для опис руху та теплообміну рідини використовується модуль Comsol Multiphysics – Non-Isothermal Flow [11]. Модуль включає систему рівнянь Нав'є-Стокса, рівняння неперервності та рівняння теплопередачі рідини, змінному в часі чи стаціонарному режимі. Розрахунок приведеної моделі, в стаціонарному режимі, проводився за співвідношеннями:

$$\left. \begin{aligned} \rho(\vec{\nabla}\vec{\nabla})\vec{u}_2 &= \vec{\nabla} \left[-PI + \mu(\vec{\nabla}\vec{\nabla} + (\vec{\nabla}\vec{\nabla})^T) - \frac{2}{3}\mu(\vec{\nabla}\vec{\nabla})I \right], \\ \vec{\nabla}(\rho\vec{\nabla}) &= 0, \\ \rho C_p \vec{\nabla}T + \vec{\nabla}(\kappa\vec{\nabla}T) &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

Значення електричного струму розраховувалось через інтеграл по площі поперечного перерізу S_V :

$$I = \iint_{S_V} I_n dS_V, \quad (19)$$

де $I_n = n_x I_x + n_y I_y + n_z I_z$ - вектор густини електричного струму. Значення I_x I_y I_z визначались співвідношеннями:

$$I_x = -\sigma \frac{\partial U}{\partial x} - \sigma \alpha \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (20)$$

$$I_y = -\sigma \frac{\partial U}{\partial y} - \sigma \alpha \frac{\partial T}{\partial y}, \quad (21)$$

$$I_z = -\sigma \frac{\partial U}{\partial z} - \sigma \alpha \frac{\partial T}{\partial z}. \quad (22)$$

Витрата теплоносія визначалась інтегруванням швидкості v по площі перерізу каналу S_{V1} :

$$G = \iint_{S_{V1}} v dS_{V1} \quad (23)$$

Електрична потужність термоелемента $W = I \cdot U$, тепловий потік, що надходить до термоелемента $Q_h = GC_p \Delta t$.

Основним параметром, що характеризує ефективність роботи термоелемента в режимі генерації електричної енергії є коефіцієнт корисної дії, який визначається співвідношенням:

$$\eta = \frac{W}{Q_h} \quad (24)$$

Результати комп'ютерних досліджень характеристик повітряного проникного термоелемента в матеріалів на основі *Bi-Te-Se-Sb*

Розрахунок проводився для матеріалів на основі *Bi-Te-Se-Sb*. Функціональні залежності параметрів матеріалу - коефіцієнта термоЕРС α , теплопровідності k та електропровідності σ від температури [3].

Моделювання проникного термоелемента здійснювалось в програмі Comsol Multiphysics для наступної базової конструкції (рис.1): висота $b = 10$ мм, довжина 10 мм, ширина $a = 10$ мм. Розміри нижньої комутації – висота $c = 1$ мм, довжина 10 мм, ширина $a = 10$ мм; верхньої – висота $d = 1$ мм, довжина $c = 10$ мм, ширина 10 мм. Матеріал комутації – мідь. Ці прорізи в комутації разом з вітками утворюють систему каналів для прокачки теплоносія. Конструкція враховує наявність перехідного шару припою товщиною 0.3 мм. На рис. 2 представлено розбиття такої конструкції на скінченні елементи.

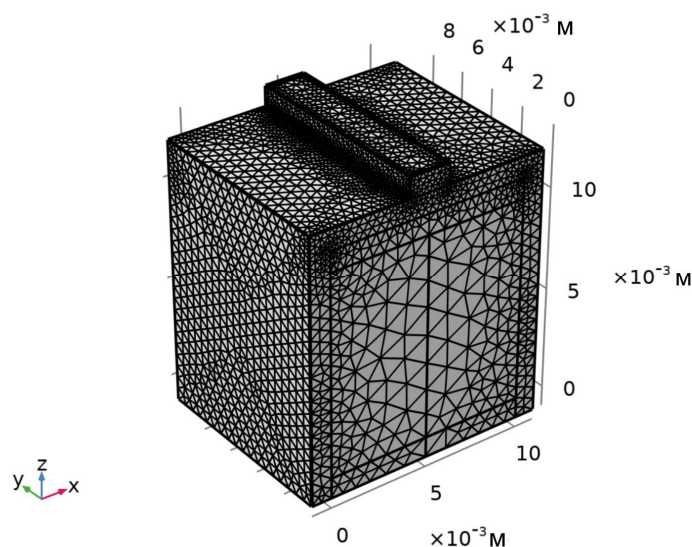
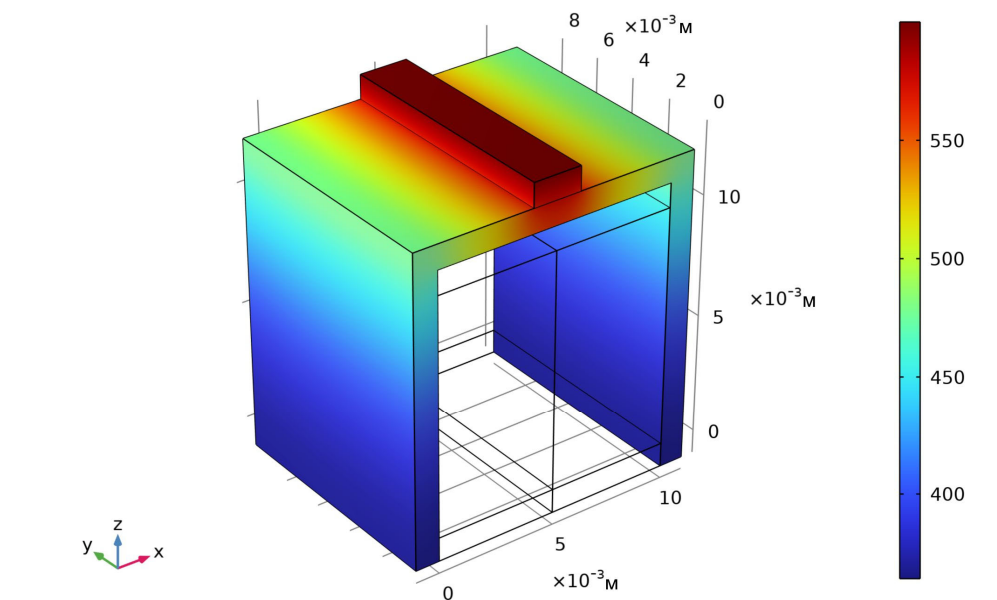
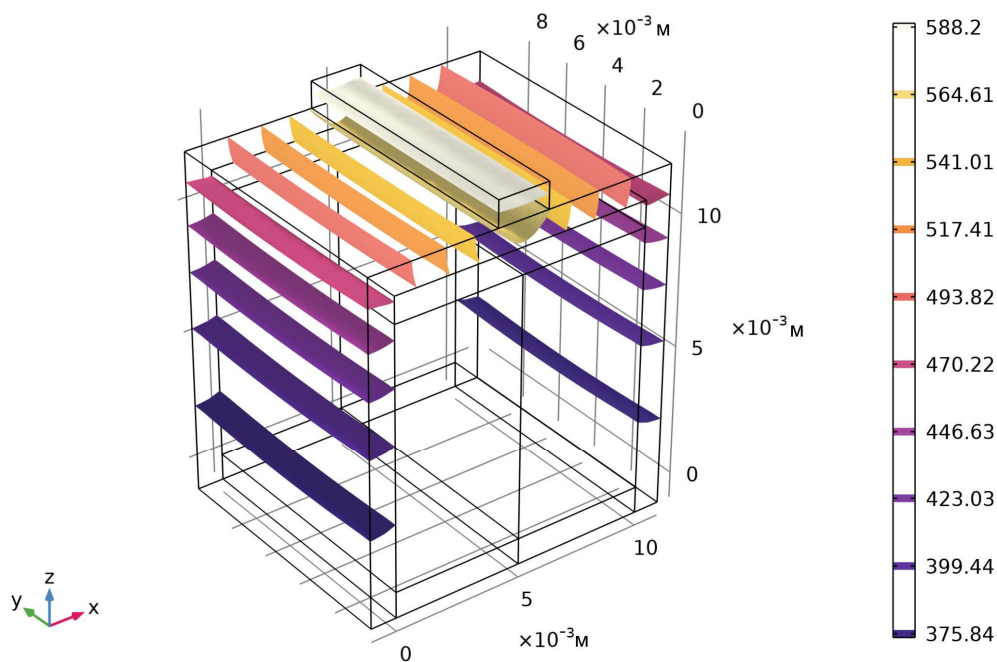


Рис. 2. Геометрична сітка.

При температурі газу на вході 600К отримано розподіли температур в теплоносії рис.3 та матеріалі термоелемента рис. 4.

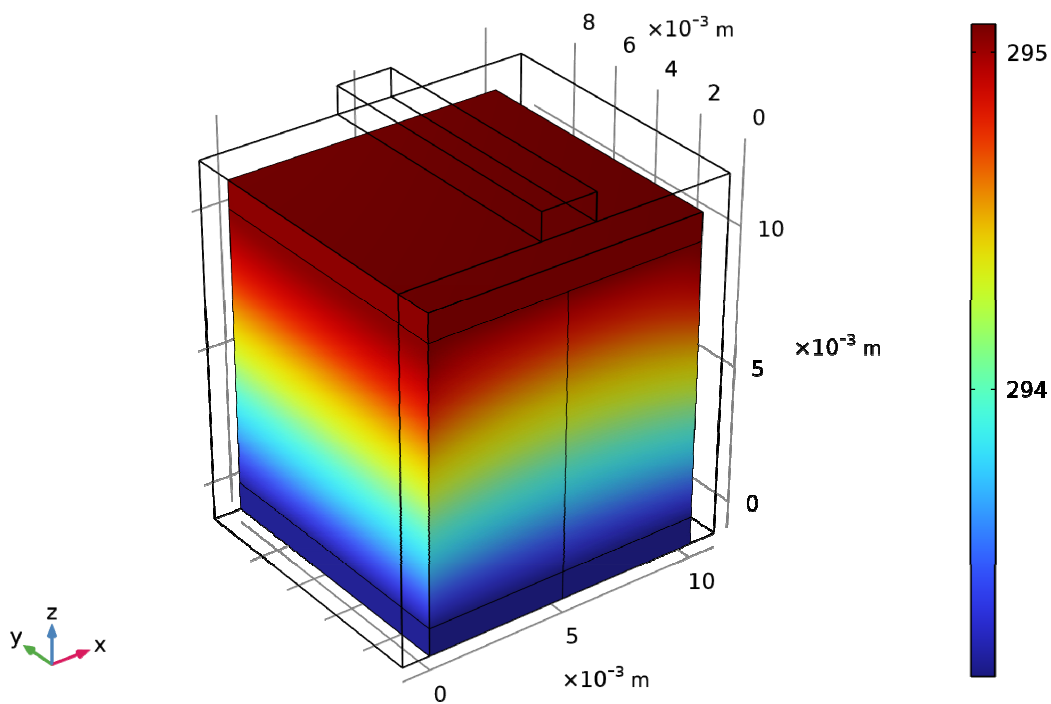


а) розподіл температур

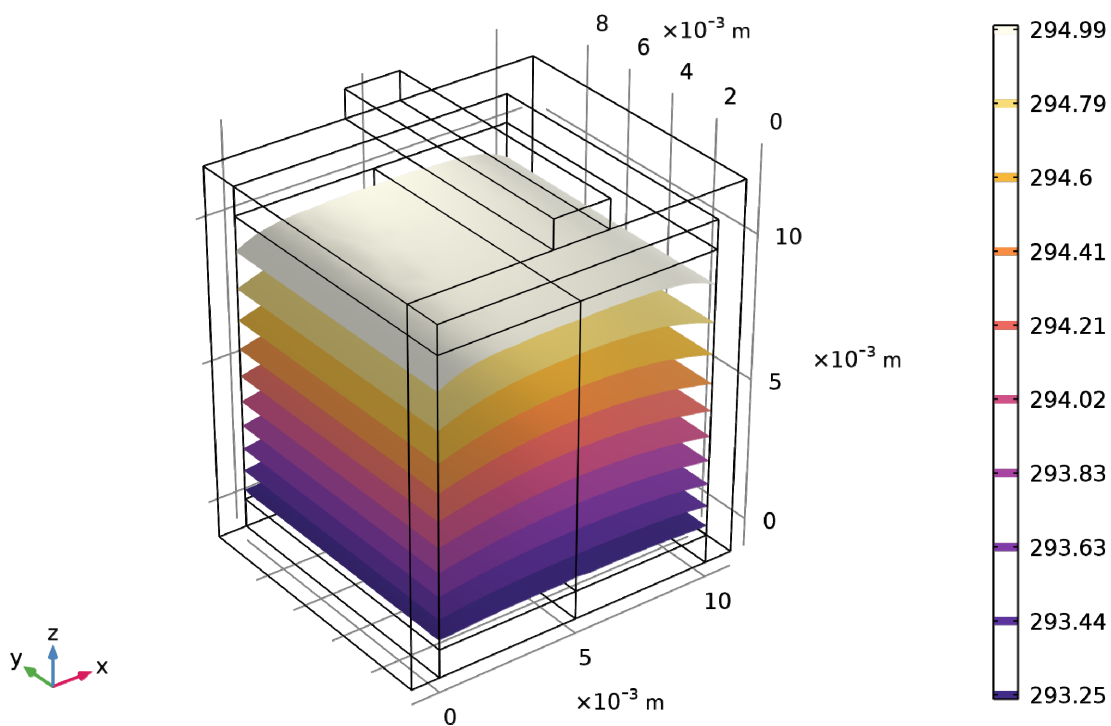


б) ізотермічні поверхні

Рис. 3. Розподіли температур та ізотермічні поверхні в теплоносії



а) розподіл температур



б) ізотермічні поверхні

Рис.4. Розподіли температур та ізотермічні поверхні
в матеріалі термоелемента.

Висота віток термоелемента задавалась рівною 1 мм, 5 мм, 10 мм, 15 мм, 20 мм. Коефіцієнт теплообміну між водою і термоелементом - α_t , в законі Ньютона-Ріхмана, складав величину 1000 Вт/(м²·К).

Для вказаних параметрів визначались середньоінтегральні характеристики термоелемента: температури повітря на виході з термоелемента - $t_{вих}$; електрорушійна сила термоелемента - ЕРС; значення електричного струму I , A ; витрати повітря - G ; електрична потужність W ; коефіцієнт корисної дії η . Залежності цих параметрів від висоти вітки l , для випадку коли температура повітря на вході в термоелемент складала 600К представлено в таблиці.

Таблиця

l , мм	$t_{вих}$, К	ЕРС, В	I , А	G , м ³ /с	W , 10 ⁻⁸ , Вт	η , (%)
1	473.60	0.00003	0.0004782	0.00047	1.43	1.57
5	414.13	0.00017	0.0001539	0.00680	2.62	1.84
10	365.01	0.00038	0.0001355	0.00599	5.13	2.87
15	355.62	0.00062	0.0000822	0.00582	5.09	1.56
20	299.98	0.00243	0.0000215	0.00480	5.22	0.83

Отже, існують такі раціональні висоти віток термоелемента при яких ККД має максимальні значення. Для виявлення екстремальних можливостей проникного термоелемента необхідним є проведення багатопараметричної оптимізації його конструкційних та теплофізичних параметрів.

Висновки

1. Розроблено 3D модель проникного термоелемента для охолодження потоків рідин та газів в пакеті прикладних комп'ютерних програм Comsol Multiphysics.
2. Визначено розподіли температур в матеріалі віток термоелемента та теплоносії, потенціалів в термоелементі, швидкостей повітря та енергетичні характеристики проникного термоелемента з матеріалів на основі *Bi-Te-Se-Sb*.

3. Необхідно проведення багатопараметричної оптимізації конструкційних та теплофізичних параметрів проникного термоелемента, що дасть можливість визначити максимальні характеристики.

Література

1. Анатычук Л. И Термоэлементы и термоэлектрические устройства / Справочник – Киев: Наукова думка, 1979. – 762 с.
2. Анатычук Л.И. Термоэлектричество, Т.1. Физика термоэлектричества. Черновцы. – 2008. – 388с.
3. Snyder G.J., Toberer E.S. Complex thermoelectric materials // Nature materials. – 2008. – Vol. 7. – P. 105 – 114.
4. Анатычук Л.И. Современное состояние и некоторые перспективы термоэлектричества // Термоэлектричество. – 2007. – №2. – С. 7 – 20.
5. Anatyshuk L. I., Vikhor L. N., Cherkez R. G. Optimal control of semiconductor material inhomogeneity for permeable cooling thermocouples // Thermoelectricity. – 2000. – №3. – P. 45 – 55.
6. Анатичук Л.І., Черкез Р.Г., Дем'янюк Д.Д., Бухараєва Н.Р. Дослідження енергетичних характеристик проникного площинного термоелемента // Термоелектрика. – 2012. – № 2. – С. 88 – 92.
7. Анатычук Л. И., Семенюк В. А. Оптимальное управление свойствами термоэлектрических материалов и приборов. – Чв: Прут, 1992. – 264 с.
8. Каденко І.М., Харитонов О.М., Єрмоленко Р.В. Основи тепло гідравліки ядерних енергетичних установок. – К.: ВПЦ «Київський університет», 2010. – 320 с.
9. Охрименко Д.И. Применение пакета COMSOL Multiphysics 3.4 для решения задач гидродинамики и теплообмена в химической технологи: Курс. роб. – Д., 2009. – 64с.
10. Бирюлин Г.В. Теплофизические расчеты в конечно-элементном пакете COMSOL / FEMLAB: Методическое пособие. – С.-П.: СПб ГУ ИТМО, 2006. – 78 с.
11. <http://www.comsol.com>.

Надійшли до редакції: 17.09.2021

Анатычук Л.И., *акад. НАН Украины*^{1,2}
Черкез Р.Г. *канд. физ-мат. наук, и.о. професор*^{1,2}
Щербатий Д.В.²

¹Інститут термоелектричества НАН и МОН Украины, ул. Науки, 1,
Черновцы, 58029, Украина, *e-mail: anatysh@gmail.com*

²Черновицкий национальный университет им. Юрия Федыковича,
ул. Коцюбинского, 2, Черновцы, 58012, Украина

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОНИЦАЕМОГО ГЕНЕРАТОРНОГО ТЕРМОЭЛЕМЕНТА

В работе представлены результаты компьютерных исследований 3D модели проницаемого генераторного термоэлемента. Описаны физическая модель и конструкция проницаемого термоэлемента, представлено ее математическое описание. Создан метод расчета термоэлемента на основе пакета прикладных компьютерных программ Comsol Multiphysics. Рассчитаны зависимости энергетических характеристик термоэлемента из материалов на основе Bi-Te-Se-Sb от высоты ветки термоэлемента.

Ключевые слова: проницаемый термоэлемент, компьютерное моделирование, генерация электроэнергии, энергетические характеристики.

Anatychuk L.I. *acad. National Academy
of Sciences of Ukraine*^{1,2}

Cherkez R.G. *doc. phys.– mat. sciences,
Acting professor*^{1,2}

Shcherbatyi D.V.²

¹Institute of Thermoelectricity of the NAS and MES of Ukraine,
1 Nauky str., Chernivtsi, 58029, Ukraine,
e-mail: anatych@gmail.com;

²Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University,
2 Kotsiubynsky str., 58000, Chernivtsi, Ukraine

COMPUTER SIMULATION OF A PERMEABLE GENERATOR THERMOELEMENT

The paper presents the results of computer studies of a 3D model of a permeable generator thermoelement. A physical model and design of a permeable thermoelement are given, and its mathematical description is presented. A method for calculating a thermoelement based on the Comsol Multiphysics software package has been developed. The dependences of the energy characteristics of a thermoelement made of Bi-Te-Se-Sb based materials on the height of the thermoelement leg are calculated.

Key words: permeable thermoelement, computer simulation, electric energy generation, energy characteristics.

References

1. Anatychuk L.I. (1979). *Termoelementy i termoelektricheskiie ustroistva: Spravochnik. [Thermo*

- elements and thermoelectric devices: Handbook*]. Kyiv: Naukova dumka [in Russian].
2. Anatychuk L.I. (2008). *Termoelektrichestvo. T.1. Fizika termoelektrichestva [Thermoelectricity. Vol.1. Physics of Thermoelectricity]*. Chernivtsi [in Russian].
 3. Snyder G.J., Toberer E.S. (2008). Complex thermoelectric materials. *Nature Materials*, 7, 105-114.
 4. Anatychuk L.I. (2007). Current status and some prospects of thermoelectricity. *J. Thermoelectricity*, 2, 7 – 20.
 5. Anatychuk L. I., Vikhor L. N., Cherkez R. G. (2000). Optimal control of semiconductor material inhomogeneity for permeable cooling thermocouples. *J. Thermoelectricity*, 3, 45 – 55.
 6. Anatychuk L.I., Cherkez R. G., Demianyuk D.D., Bukharayeva N.R. (2012). Research on the energy characteristics of a permeable planar thermoelement. *J. Thermoelectricity*, 2, 88 – 92.
 7. Anatychuk L.I., Semeniuk V.A. (1992). *Optimalnoie upravleniie svoistvami termoelektricheskikh materialov i priborov [Optimal control of the properties of thermoelectric materials and devices]*. Chernivtsi: Prut [in Russian].
 8. Kadenko I.M., Kharytonov O.M., Yermolenko R.V. (2010). *Osnovy teplohydrauliky yadernykh enerhetychnykh ustanovok [Basics of thermal hydraulics of nuclear power plants]*. Kyiv: Publishing and Polygraphic Centre “Kyiv University” [in Ukrainian].
 9. Okhrymenko D.I. (2009). *Primeneniie paketa COMSOL Multiphysics 3.4 dlia resheniia zadach gidrodinamiki i teploobmena v khimicheskoi tekhnologii: Kursovaia rabota [Using COMSOL Multiphysics 3.4 to solve fluid dynamics and heat transfer problems in chemical engineering: Coursework]* [in Russian].
 10. Biriulin G.V. (2006). *Teplofizicheskiie raschioty v konechno-elementnom pakete COMSOL. FEMLAB: Metodicheskoe posobiie [Thermophysical calculations in the COMSOL finite element package. FEMLAB: Methodical Guide]*. St-Petersburg: ITMO University [in Russian].
 11. <http://www.comsol.com>.

Submitted: 17.09.2021