

УДК 621.362

Вихор Л.М., доктор фіз.-мат. наук

Інститут термоелектрики Національної Академії наук та
Міністерства освіти України, вул. Науки 1, Чернівці, 58029, Україна
e-mail: vikhorl@ukr.net



Вихор Л.М.

**МОДЕЛЮВАННЯ ХАРАКТЕРИСТИК
ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНОГО ПЕРЕТВОРЮВАЧА**

(Лекція на Літній Термоелектричній школі,
30 червня, 2024, Краків, Польща)

За приблизними підрахунками річне світове виробництво термоелектричних перетворювачів (модулів) для потреб термоелектричної генерації та охолодження досягає понад 50 мільйонів штук. Термоелектричні перетворювачі механічно стійкі, високонадійні з терміном служби до 20 років. Головним недоліком є їх низька енергоефективність. Особливо це стосується мініатюрних модулів з довжиною термоелементів від 500 мкм до 200 мкм. Їх низька енергоефективність обумовлена дією електричних і теплових опорів контактів, комутацій та ізоляційних пластин. Одним із шляхів підвищення ефективності термоелектричних генераторів і охолоджувачів є оптимізація матеріалів та конструкції термоелектричних модулів для необхідних умов експлуатації. Для цього доцільно використовувати методи теорії оптимального керування. Вони придатні для оптимізації одно- і багатокаскадних перетворювачів, виготовлених з однорідних або неоднорідних, так званих функціонально градієнтних термоелектричних матеріалів (ФГТМ). Методи оптимального керування дозволяють враховувати температурні залежності термоелектричних параметрів матеріалів, додаткові об'ємні термоелектричні ефекти, які виникають в ФГТМ, та вплив небажаних електричних і теплових опорів у модулях. У цій лекції висвітлюються основні поняття теорії оптимального керування та пояснюється, як вони використовуються для проектування оптимальної конструкції модулів та моделювання їх характеристик. Розглянуто приклади розрахунку характеристик перетворювачів та проаналізовано вплив небажаних електричних і теплових опорів на максимальну енергетичну ефективність охолоджуючих і генераторних перетворювачів з матеріалів на основі Bi_2Te_3 . Показано, що ефективність модулів, особливо мініатюрних, можна значно підвищити, якщо ці небажані опори зменшити до раціональних значень. Переважаючим фактором є зниження електричного контактного опору. Визначено раціональні значення, до яких доцільно зменшити цей опір. Саме на такі раціональні значення контактного опору необхідно орієнтуватися в розробці технології модулів.

Ключові слова: термоелектричний перетворювач, енергоефективність термоелектричного модуля, методи теорії оптимального керування, холодильний коефіцієнт, електричний контактний опір, термічний опір комутаційних та ізоляційних пластин.

Вступ

Загально відомо, що термоелектричні (ТЕ) перетворювачі (зазвичай ми їх називаємо модулями) мають багато важливих застосувань. Термоелектричні пристрої широко використовуються для охолодження, контролю теплових умов і стабілізації температури

електронних елементів та систем, таких як різноманітні датчики, лазерні діоди, світлодіоди, комп'ютерні мікросхеми тощо [1].

ТЕ генератори використовуються там, де є джерело тепла. У деяких випадках вони навіть можуть замінити батареї, наприклад, для живлення бездротових датчиків для моніторингу робочого стану промислових процесів або трубопроводів [2]. ТЕ перетворювачі використовуються в ядерних малогабаритних джерелах енергії для космічних або біомедичних застосувань [3]. ТЕ міні-генератори, які використовують тепло людського тіла, є перспективними джерелами енергії для електронних пристроїв, придатних для носіння [4].

На рис. 1 а показано діаграму зростання обсягу ринку термоелектричних модулів. Річний темп зростання ринку (CAGR) становить близько 9%. Використовуючи цю діаграму та припускаючи, що середня ціна стандартного ТЕ модуля становить близько 15 доларів, можна легко оцінити річне виробництво модулів у світі [5]. Результати такої грубої оцінки показані на рис. 1 б. Видно, що натеper виробництво досягає понад 50 мільйонів штук на рік.

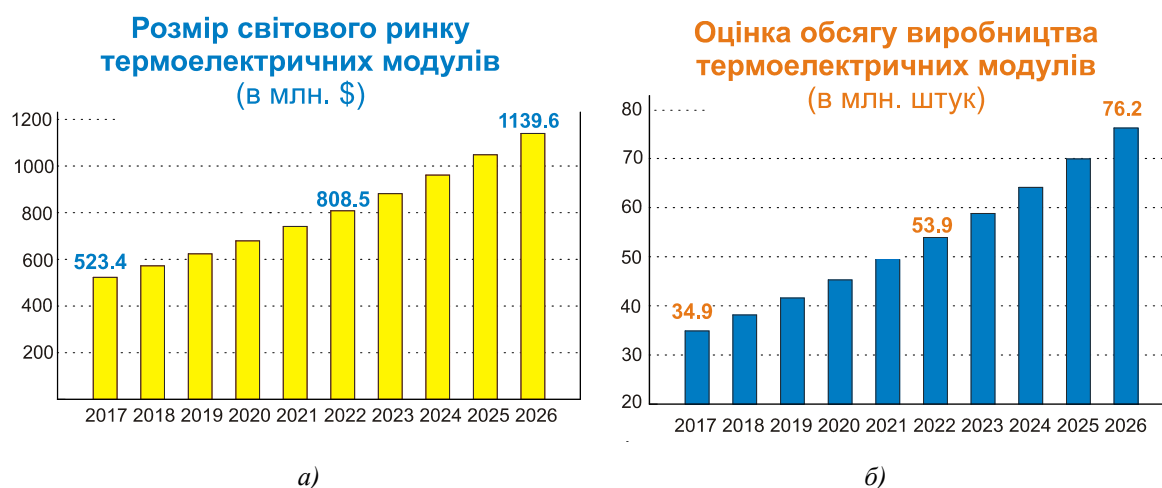


Рис. 1. Розмір світового ринку (а) та оцінка обсягу виробництва (б) термоелектричних модулів

Термоелектричні перетворювачі механічно стійкі, високонадійні з терміном служби до 20 років. Головним недоліком є їх низька енергоефективність.

Ідеальна модель для оптимізації модуля

Одним із шляхів підвищення енергоефективності термоелектричних генераторів і охолоджувачів є оптимізація матеріалів та конструкції термоелектричних модулів для необхідних умов експлуатації. У 50-х роках минулого століття А. Іоффе з колегами отримав основні оптимальні співвідношення для ідеальної термопари з однорідних матеріалів із незалежними від температури властивостями [6]. Ці співвідношення все ще використовуються сьогодні як найпростіший метод проектування модулів і розрахунку їх характеристик.

Спрощений метод моделювання модулів охолодження

Розглянемо ці співвідношення для модуля охолодження. На рис. 2 показана термопара для модулів у режимі охолодження.

Модуль містить ряд термопар, виготовлених з напівпровідникових віток n - і p -типу провідності, які прийнято називати термоелементами. Якщо пропускати електричний струм I з полярністю, зазначеною на рис. 2, і підтримувати поверхню модуля, на якій тепло виділяється, за температури T_h , близької до температури навколишнього середовища, то теплопоглинальна поверхня охолоджується до певної температури T_c . Модуль працюватиме в режимі охолодження.

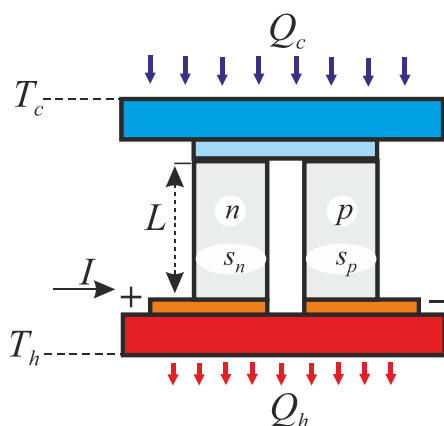


Рис. 2. Схема ідеальної термопари для модулів в режимі охолодження.

Рівняння енергетичного балансу для термопари, які використовуються для оптимізації, мають вигляд

$$\begin{aligned} Q_c &= \alpha T_c I - \frac{1}{2} I^2 R - K \Delta T \\ Q_h &= \alpha T_h I + \frac{1}{2} I^2 R - K \Delta T \end{aligned} \quad (1)$$

де $\alpha = \alpha_p + |\alpha_n|$, $R = L(\rho_p / s_p + \rho_n / s_n)$, $K = (\kappa_p s_p + \kappa_n s_n) / L$.

Енергоефективність модуля оцінюється холодильним коефіцієнтом (COP):

$$\text{COP} = \frac{Q_c}{W} = \frac{Q_c}{Q_h - Q_c}, \quad (2)$$

де Q_c – холодопродуктивність, W – споживана електрична потужність, Q_h – кількість тепла, що надходить у навколишнє середовище.

Проектування модуля, як правило, виконується для режиму максимального COP для заданого перепаду температур.

Рівняння балансу (1) використовуються для багатопараметричної оптимізації та визначення максимального значення COP за умови заданих T_c , T_h . В результаті отримано наступні вирази для розрахунку оптимальних значень параметрів, таких як відношення площ поперечного перерізу віток термопари

$$\left(\frac{s_n}{s_p} \right)_{\text{opt}} = \sqrt{\kappa_n \rho_p} / \sqrt{\kappa_p \rho_n} \quad (3)$$

і значення струму

$$(I)_{\text{opt } \varepsilon} = \frac{\alpha \Delta T}{R(M - 1)}, \quad (4)$$

де $M = \sqrt{1 + Z_{TE} \bar{T}}$, $\bar{T} = \frac{T_c + T_h}{2}$, $Z_{TE} = \frac{\alpha^2}{(\sqrt{\rho_p \kappa_p} + \sqrt{\rho_n \kappa_n})^2}$ – це добротність термопари. Якщо

параметри матеріалу віток однакові, це буде добротність матеріалу $Z_{TE} = Z = \frac{\alpha^2}{\rho \kappa}$. Максимальний

COP розраховується за формулою:

$$\text{COP}_{\max} = \frac{T_c}{\Delta T} \frac{M - T_h/T_c}{M + 1}. \quad (5)$$

У випадку каскадного модуля до оптимальних параметрів, що забезпечують максимальне значення COP, додаються оптимальні значення міжкаскадних температур T_i . Вони визначаються наближеними співвідношеннями:

$$T_i = T_c \left(\frac{T_h}{T_c} \right)^{\frac{i}{N}}, \quad i = 1, 2, \dots, N - 1, \quad (6)$$

де N – це кількість каскадів. Потім формули для однокаскадного модуля використовуються для моделювання конструкції кожного каскаду.

Описаний метод використовується для проектування модуля охолодження з максимальним COP за заданих температур T_c і T_h . Для заданого значення робочого струму I оптимальні співвідношення L/s_n , L/s_p розраховуються за формулами (3) і (4), а кількість термопар, що забезпечує необхідну холодопродуктивність Q_m модуля, визначається наступним чином $n = Q_m/Q_c$. Для каскадного модуля співвідношення $n_i/n_{i+1} = Q_{ci+1}/Q_{hi}$ використовуються для визначення кількості термопар у кожному каскаді. За формулами (1)–(5) розраховуються такі характеристики модуля, як COP_{\max} , та залежності холодопродуктивності, споживаної потужності та напруги від перепаду температури та струму.

Спрощений метод моделювання генераторних модулів

На рис. 3 показана термопара для генераторного модуля. Якщо теплопоглинальний спай нагріти тепловим потоком Q_h (рис. 3) до температури T_h , а протилежний спай підтримувати за рахунок відведення тепла Q_c за температури T_c , то внаслідок ефекту Зеебека в колі виникає термоЕРС. Якщо коло замкнуте, то протікає електричний струм і на зовнішньому навантаженні R_L генерується електрична потужність. Модуль працює як генератор.

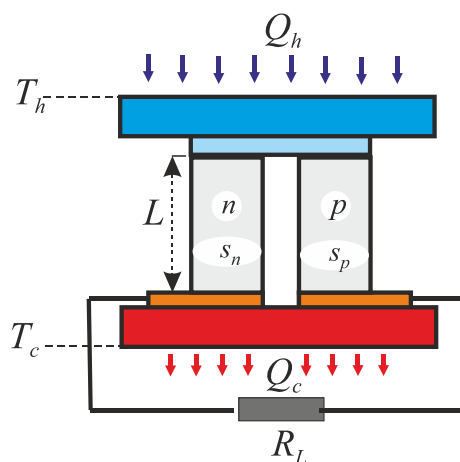


Рис. 3. Схема ідеальної термопари для модуля в режимі генерації

Рівняння балансу енергії для термопари, які використовуються для оптимізації, мають вигляд

$$\begin{aligned} Q_h &= \alpha T_h I - \frac{1}{2} I^2 R + K \Delta T \\ Q_c &= \alpha T_c I + \frac{1}{2} I^2 R + K \Delta T \end{aligned} \quad (7)$$

ККД визначається як

$$\eta = \frac{W}{Q_h}, \quad (8)$$

де потужність, яка генерується, визначається за формулою

$$W = Q_h - Q_c = \alpha I \Delta T - \frac{1}{2} I^2 R. \quad (9)$$

Оптимізація дає вираз (3) для оптимального співвідношення площ поперечних перерізів віток, який є таким же, як і для охолоджуючої термопари, і формулу для оптимального струму в колі у вигляді:

$$I_{\text{opt } \eta} = \frac{\alpha \Delta T}{R(M+1)}. \quad (10)$$

Максимальний ККД, напруга і потужність в цьому режимі розраховуються наступним чином

$$\eta_{\text{max}} = \frac{\Delta T}{T_h} \frac{M-1}{M+T_c/T_h}, \quad V_{\eta} = \alpha \Delta T - IR = \frac{\alpha \Delta T M}{M+1}, \quad W_{\eta} = \frac{\alpha^2 \Delta T M}{R(M+1)^2}. \quad (11)$$

Слід зазначити, що напруга і потужність близькі до своїх максимальних значень, які виникають за умови рівності опорів зовнішнього навантаження і термопари: $R_L = R$. В цьому випадку $M = 1$, і використовуються формули

$$V_{\text{max}} = \alpha \Delta T / 2, \quad W_{\text{max}} = \alpha^2 \Delta T / 4R, \quad I_{\text{opt } W} = \alpha \Delta T / 2R \quad (12)$$

Вхідними даними для проектування генераторного модуля є температури T_h, T_c , необхідна електрична потужність W_L і напруга V_L на зовнішньому навантаженні. Тому сила струму I в замкнутому колі також задана і дорівнює $I = W_L / V_L$. Оптимальні площі поперечного перерізу віток n - і p -типу розраховуються за формулами для струму $I_{\text{opt } \eta}$ або $I_{\text{opt } W}$, а кількість термопар, яка забезпечує необхідну потужність W_L , визначається як $n = W_L / W$.

Отже згідно з формулами Іоффе (5) і (11) для моделі ідеального модуля максимальний холодильний коефіцієнт і ККД визначаються безрозмірною добротністю ZT термоелектричних матеріалів для віток модуля. Ідеальна модель ТЕ перетворювача не враховує такі основні фізичні фактори:

- залежність параметрів ТЕ матеріалів від температури,
- вплив ефекту Томсона,
- вплив електричних і теплових втрат в структурі модуля, а саме
 - ✓ вплив контактного опору,
 - ✓ електричний і тепловий опір комутації,
 - ✓ тепловий опір ізоляційних пластин,
 - ✓ тепловий опір тепловідводу на холодній і гарячій поверхнях модуля,
- можливість використовувати неоднорідні матеріали для віток.

Ці фактори можуть істотно впливати на характеристики ТЕ перетворювача. Від них залежить оптимальна структура модуля. У [7] показано, як наближено враховується вплив деяких факторів, якщо використовуються формули для ідеальної моделі модуля. Наприклад, щоб

врахувати температурні залежності параметрів ТЕ матеріалу, можна використовувати їх середні значення

$$\bar{\alpha} = \frac{1}{T_h - T_c} \int_{T_c}^{T_h} \alpha(T) dT, \quad \bar{\rho} = \frac{1}{T_h - T_c} \int_{T_c}^{T_h} \rho(T) dT, \quad \bar{\kappa} = \frac{1}{T_h - T_c} \int_{T_c}^{T_h} \kappa(T) dT \quad (13)$$

Електричний опір контактів на межі віток і комутаційних шарів враховується наступним чином

$$\rho = \rho_{\text{mat}} + \frac{2r_c}{L}, \quad (14)$$

де r_c – контактний опір. В даному випадку енергоефективність перетворювача залежить від довжини вітки, як показано на рис. 4.

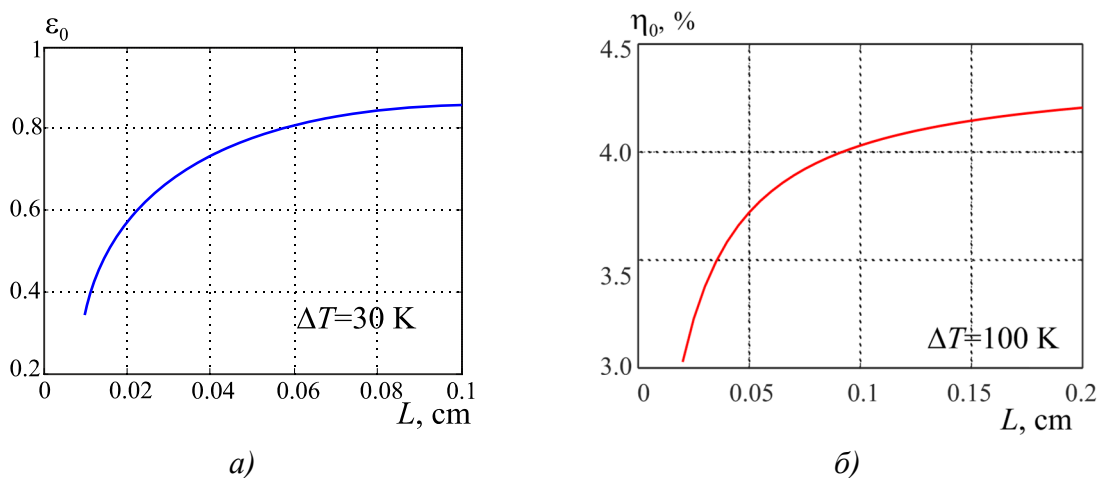


Рис. 4. Залежності максимального холодильного коефіцієнта ε_0 (а) і максимального ККД η_0 (б) від довжини термоелемента L для контактної опоры $r_c = 5 \times 10^{-6} \Omega \text{cm}^2$

Тепло Джоуля, яке виділяється в контактах, знижує ефективність. Контактний опір є однією з основних причин, чому добротність матеріалів не повністю реалізується в термоелектричних охолоджувачах і генераторах.

Методи теорії оптимального керування для оптимізації модуля

Щоб врахувати всі згадані вище фактори, використовується більш реалістична модель ТЕ перетворювача і застосовуються методи теорії оптимального керування для оптимізації та моделювання конструкції модуля і розрахунку його характеристик [8].

Схема ТЕ модуля для охолодження або генерування енергії показана на рис. 5.

Як правило, вітки з'єднуються в послідовне електричне коло за допомогою металевої комутації і встановлюються між двома ізоляційними пластинами паралельно по відношенню до теплового потоку. У загальному випадку для охолоджувачів або генераторів можна використовувати багатокаскадні модулі.

Ця принципова схема використовується для встановлення відповідних математичних співвідношень, які описують фізичну модель модуля. Для спрощення тепловий потік вважається одновимірним. Це припущення є доцільним, оскільки комутація та ізоляційні пластини зазвичай тонкі та виготовлені з матеріалів з хорошою теплопровідністю. Тому тепловим потоком уздовж

поверхонь модуля, який виникає внаслідок локальних градієнтів температури, нехтують, оскільки він суттєво менший, порівняно з тепловим потоком через термоелементи. Втрати тепла від бокових поверхонь термоелементів та ізоляційних пластин також нехтують. Крім того, як показано, наприклад, у [9], результати розрахунку параметрів модуля з використанням 3D підходу мало відрізняються від результатів, отриманих на основі одновимірної апроксимації.

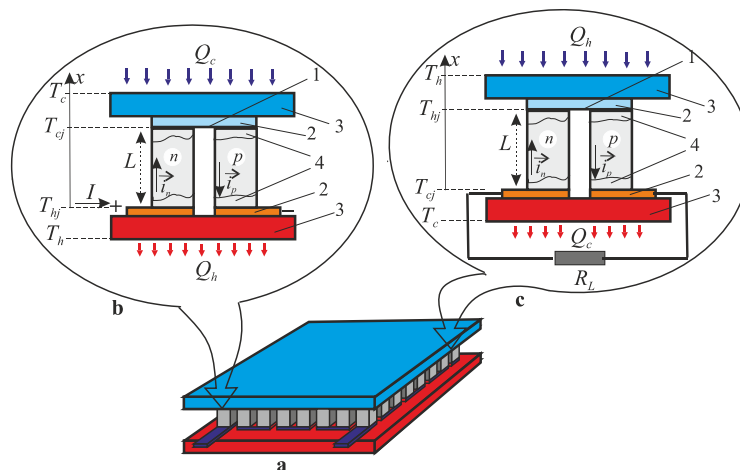


Рис. 5. Схема ТЕ модуля (а) для охолодження (b) або генерації електроенергії (с). 1 – теплопоглинальний спай терморпари, 2 – металева комутація, 3 – ізоляційна пластинка, 4 – контактна зона

Для застосування методів теорії оптимального керування необхідно записати систему диференціальних рівнянь першого порядку для розподілу температури та теплового потоку в ТЕ вітках. Для цього використовується одновимірне рівняння другого порядку, яке описує енергетичний баланс в термоелектричній вітці в стаціонарному стані і має вигляд

$$\frac{d}{dx} \kappa \frac{dT}{dx} + \frac{i^2}{\sigma} - T \frac{d\alpha}{dT} i \frac{dT}{dx} - \frac{d\alpha}{dx} iT = 0 \quad (15)$$

де $i \equiv |i| = I/s$ – густина струму. У цьому рівнянні властивості термоелектричного матеріалу залежать від температури та координати. Третій член рівняння (15) описує ефект Томсона, останній член є об’ємним ефектом Пельтьє. Для розрахунку розподілу температури $T(x)$ і теплового потоку $q(x)$ у n - і p -типу вітках терморпари використовується нова змінна $\bar{q} = -\kappa \frac{dT}{dx} + \alpha iT$ і два диференціальні рівняння другого порядку (15) для n - і p -віток N -каскадного модуля записуються у вигляді системи рівнянь першого порядку наступним чином

$$\left. \begin{aligned} \frac{dT}{dx} &= -\frac{\alpha i_k}{\kappa} T - \frac{\bar{q}}{\kappa} \\ \frac{d\bar{q}}{dx} &= \frac{\alpha^2 i_k^2}{\kappa} T + \frac{\alpha i_k}{\kappa} \bar{q} + \frac{i_k^2}{\sigma} \end{aligned} \right\} \begin{aligned} &x_{k-1} \leq x \leq x_k \\ &k = 1, \dots, N \end{aligned} \quad (16)$$

де використовуються рівності $\alpha_n = |\alpha_n|$ і $\bar{\alpha} i = -|\alpha i|$, які справедливі як для n -, так і для p -гілок, оскільки зміна типу провідності в терморпарі відбувається одночасно зі зміною напрямку вектора густини струму. Характеристики матеріалу залежать від функцій неоднорідності $C_{k,n,p}(x)$ і температури, тобто

$\alpha_{k n,p} = \alpha_{k n,p}(C_{k n,p}(x), T)$, $\sigma_{k n,p} = \sigma_{k n,p}(C_{k n,p}(x), T)$, $\kappa_{k n,p} = \kappa_{k n,p}(C_{k n,p}(x), T)$. Функції $C_{k n,p}(x)$ характеризують розподіл концентрації носіїв заряду в напівпровіднику вздовж висоти термоелемента, або розподіл концентрації домішок чи зміну складу основних компонентів термоелектричного матеріалу.

Для застосування методів оптимального керування систему (16) зручно переписати, використовуючи питому величину густини теплового потоку $q = Q/I \equiv \bar{q}/i$, безрозмірну координату $x = x/L$, $0 \leq x \leq L$ та питому величину густини струму $j_k = i_k L$. Система (16) набуде вигляду

$$\left. \begin{aligned} \frac{dT}{dx} &= -\frac{\alpha j_k}{\kappa} T - \frac{j_k}{\kappa} q, \\ \frac{dq}{dx} &= \frac{\alpha^2 j_k}{\kappa} T + \frac{\alpha j_k}{\kappa} q + \frac{j_k}{\sigma} \end{aligned} \right\} k = 1, \dots, N \quad (17)$$

Ця система підходить як для режиму охолодження, так і для генерації.

Задача оптимального керування для модуля охолодження

Основними вхідними даними для проєктування модуля є температура охолодження T_c кількість каскадів N , температура основи охолоджувача T_h і холодопродуктивність Q_c . Слід задати залежності властивостей матеріалу від температури та фактору неоднорідності. Також повинні бути вказані такі параметри: питома значення контактної опору r_c , електричний та тепловий опори комутаційних та ізоляційних пластин, а також їх товщина, тепловий опір тепловідводів на гарячій і холодній поверхнях модуля. Зазвичай вказуються довжина термоелемента L і струм живлення I .

Основна вимога – максимальний COP $\varepsilon = Q_c / W$, де $W = Q_h - Q_c$ споживана потужність. Q_c і Q_h – поглинена і виділена теплові потужності.

Ця задача еквівалентна задачі знаходження мінімуму функціоналу

$$J = \ln \frac{Q_h}{Q_c} = \ln \prod_{k=1}^N \frac{Q_{1k}}{Q_{0k}} = \ln \prod_{k=1}^N \frac{q_{1k}}{q_{0k}} = \sum_{k=1}^N (\ln q_{1k} - \ln q_{0k}) \quad (18)$$

для запису якого використані умови теплового балансу між каскадами та на гарячій і холодній поверхнях модуля у вигляді

$$\begin{aligned} Q_{1k+1} &= Q_{0k}, \quad k = 1, \dots, N-1, \\ Q_{11} &= -Q_h, \quad Q_{0N} = -Q_c, \end{aligned} \quad (19)$$

і питомі теплові потоки на спаях термопар у вигляді

$$q_{1k} = \frac{Q_{1k}}{n_k I}, \quad q_{0k} = \frac{Q_{0k}}{n_k I} \quad (20)$$

Ці питомі теплові потоки визначають розв'язуванням системи (17) з крайовими умовами

$$\begin{aligned} T_{nk}(0) &= T_{pk}(0) \equiv T_k(0), \quad T_{nk}(1) = T_{pk}(1) \equiv T_k(1), \quad k = 1, \dots, N \\ T_1(0) &= T_h + \delta T_0, \quad T_N(1) = T_c - \delta T_N, \quad T_k(0) = T_{k-1}(1) + \delta T_{k-1}, \quad k = 2, \dots, N \end{aligned} \quad (21)$$

і застосуванням виразів

$$q_{0k} = \sum_{n,p} \left[q_k(1) + j_k \frac{r_c}{L} \right]_{n,p} + q_{con}, \quad q_{1k} = \sum_{n,p} \left[q_k(0) - j_k \frac{r_c}{L} \right]_{n,p} - q_{con}, \quad (22)$$

де $q_{con} = \frac{2r_{con}I}{l_{con}} \left(K_{con} - \frac{2}{3} \right)$. Формули (22) враховують виділення тепла Джоуля, спричиненого опорами контактів r_c і комутації r_{con} . У (21) δT є різницею температур, спричиненою термічним опором комутації, ізоляційних пластин і тепловідводів на гарячій і холодній сторонах. В одновимірному наближенні δT розраховується наступним чином

$$\delta T_0 = Q_h (R_{ins} + R_{con} + R_{hs}) = - \frac{q_{11}}{(L/(j_1)_n + L/(j_1)_p)} R_{th},$$

$$\delta T_N = Q_c (R_{ins} + R_{con} + R_{cs}) = - \frac{q_{0N}}{(L/(j_N)_n + L/(j_N)_p)} R_{tc}, \quad (23)$$

$$\delta T_k = Q_{0k} (R_{ins} + R_{con}) = - \frac{q_{0k}}{(L/(j_k)_n + L/(j_k)_p)} R_{tk}, k = 1, \dots, N-1,$$

де $R_{th} = \frac{l_{con}}{\kappa_{con} K_{con}} + \frac{l_{ins}}{\kappa_{ins} K_{ins}} + \frac{1}{h_h K_{hs}}$, $R_{tc} = \frac{l_{con}}{\kappa_{con} K_{con}} + \frac{l_{ins}}{\kappa_{ins} K_{ins}} + \frac{1}{h_c K_{cs}}$, $R_{tk} = \frac{l_{con}}{\kappa_{con} K_{con}} + \frac{l_{ins}}{\kappa_{ins} K_{ins}}$, κ ,

l , h , K – це теплопровідність, висота, коефіцієнти теплопередачі та коефіцієнти заповнення комутації, ізоляційної пластини та основи тепловідводів відповідно.

Задача оптимального керування для генераторного модуля

У цьому випадку вхідними даними для оптимізації є температури теплопоглинальної поверхні T_h і тепловиділяючої поверхні T_c . Як правило, проектування конструкції генераторного модуля виконується для заданих значень електричної потужності W і вихідної напруги V . Значення струму також відоме і дорівнює $I = W / V$.

ККД генераторного модуля визначається співвідношенням $\eta = \frac{W}{Q_h} \equiv \frac{Q_h - Q_c}{Q_h}$. Замість

максимуму ККД знаходимо мінімум функціоналу

$$J = \sum_{k=1}^N (\ln q_{0k} - \ln q_{1k}). \quad (24)$$

Питомі теплові потоки визначаються шляхом розв'язування системи (17) з крайовими умовами

$$T_{nk}(0) = T_{pk}(0) \equiv T_k(0), \quad T_{nk}(1) = T_{pk}(1) \equiv T_k(1), \quad k = 1, \dots, N$$

$$T_1(0) = T_c + \delta T_0, \quad T_N(1) = T_h - \delta T_N, \quad T_k(0) = T_{k-1}(1) + \delta T_{k-1}, \quad k = 2, \dots, N. \quad (25)$$

Вирази для питомих густин теплового потоку мають вигляд

$$q_{1k} = \sum_{n,p} \left[q_k(1) + j_k \frac{r_c}{L} \right]_{n,p} + q_{con}, \quad q_{0k} = \sum_{n,p} \left[q_k(0) - j_k \frac{r_c}{L} \right]_{n,p} - q_{con}. \quad (26)$$

δT розраховується наступним чином

$$\delta T_0 = Q_h (R_{ins} + R_{con} + R_{hs}) = - \frac{q_{11}}{(L/(j_1)_n + L/(j_1)_p)} R_{th},$$

$$\delta T_N = Q_c (R_{ins} + R_{con} + R_{cs}) = - \frac{q_{0N}}{(L/(j_N)_n + L/(j_N)_p)} R_{tc}, \quad (27)$$

$$\delta T_k = Q_{0k} (R_{ins} + R_{con}) = - \frac{q_{0k}}{(L/(j_k)_n + L/(j_k)_p)} R_{tk}, k = 1, \dots, N-1.$$

Розв'язок оптимізаційної задачі

ККД і СОР залежать від функцій неоднорідності матеріалів $C_{k,n,p}(x)$ і параметрів густини струму $(j_k)_{n,p}$ у термоелементах. Задача полягає в тому, щоб знайти такі оптимальні функції і такі оптимальні параметри, які задовольняють умові максимального ККД або максимального холодильного коефіцієнта. У випадку каскадного модуля міжкаскадні температури також повинні бути оптимальними.

Відповідно до теорії оптимального керування для кожної неперервної частини функцій T і q записується функція Гамільтона

$$H_k = (\Psi_1 f_{1k} + \Psi_2 f_{2k}), \quad k = 1, \dots, N. \quad (28)$$

де (f_{1k}, f_{2k}) – праві частини рівнянь (17). $\Psi = (\Psi_1, \Psi_2)$ – допоміжна вектор-функція, яка будується за правилом

$$\frac{\partial \Psi_1}{\partial x} = - \frac{\partial H}{\partial T}, \quad \frac{\partial \Psi_2}{\partial x} = - \frac{\partial H}{\partial q} \quad (29)$$

і в нашому випадку задовольняє систему рівнянь

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\Psi_1}{dx} &= \frac{\alpha j_k}{\kappa} R_{1k} \Psi_1 - \frac{\alpha^2 j_k}{\kappa} R_{2k} \Psi_2, \\ \frac{d\Psi_2}{dx} &= \frac{j_k}{\kappa} \Psi_1 - \frac{\alpha j_k}{\kappa} \Psi_2, \end{aligned} \right\} \quad k = 1, \dots, N. \quad (30)$$

де $\left. \begin{aligned} R_{1k} &= 1 + \frac{d \ln \alpha}{dT} T - \frac{d \ln \kappa}{dT} \left(T + \frac{q}{\alpha} \right) \\ R_{2k} &= R_{1k} - \frac{1}{Z} \frac{d \ln \sigma}{dT} + \frac{d \ln \kappa}{dT} \left(T + \frac{q}{\alpha} \right) \end{aligned} \right\}, \quad Z = \frac{\alpha^2 \sigma}{\kappa}$. Крайові умови для цієї системи наступні:

для режиму охолодження

$$\Psi_{2(k)_{n,p}}(0) = \frac{1}{q_{1k}}, \quad \Psi_{2(k)_{n,p}}(1) = \frac{1}{q_{0k}} \quad (31)$$

для режиму генерації

$$\Psi_{2(k)_{n,p}}(0) = \frac{1}{q_{0k}}, \quad \Psi_{2(k)_{n,p}}(1) = \frac{1}{q_{1k}} \quad (32)$$

Умови оптимальності

Згідно з теорією оптимального керування, для мінімуму функціоналу J повинні виконуватися такі умови:

1. Оптимальні функції $C_{k,n,p}(x)$, які характеризують неоднорідність термоелектричних матеріалів n - та p -типу провідності, повинні задовольняти принцип максимуму Понтрягіна, а саме умову максимуму функції Гамільтона

$$H_{k,n,p}(\Psi(x), T(x), q(x), C(x), j) = \max_{C \in G_C} H_{k,n,p}(\Psi(x), T(x), q(x), C, j). \quad (33)$$

2. Значення оптимальної густини струму в каскадах знаходять із співвідношень

$$-\frac{\partial J}{\partial (j_k)_{n,p}} + \int_0^1 \frac{\partial H_{k,n,p}(\psi, T, q, C, (j_k)_{n,p})}{\partial (j_k)_{n,p}} dx = 0 \quad (34)$$

3. Міжкаскадні температури T_k повинні задовольняти систему рівнянь

$$\sum_{n,p} \Psi_{1(k+1)_{n,p}}(0) = \sum_{n,p} \Psi_{1(k)_{n,p}}(1), \quad k = 1, \dots, N-1 \quad (35)$$

Розрахунок конструкції модуля

Оптимальні параметри конструкції модуля розраховують за такими формулами:

- модуль охолодження:

Площа поперечного перерізу термоелементів і кількість термопар в каскадах визначають наступним чином. $(s_k)_{n,p} = IL / (j_k)_{n,p}$, $n_N = -Q_0 / q_{0N} I$, $n_k = n_{k+1} q_{1k+1} / q_{0k}$, $k = 1, \dots, N-1$.

Холодильний коефіцієнт розраховують за виразом $\varepsilon_{\max} = \frac{1}{\exp(J_{\min}) - 1}$.

Електрична потужність, необхідна для кожного каскаду і модуля в цілому, знаходиться зі співвідношень $W_k = -n_k I (q_{1k} - q_{0k})$, $W = \frac{Q_0}{\varepsilon}$.

- генераторний модуль:

Максимальний ККД модуля розраховують за формулою $\eta_{\max} = 1 - \exp(J_{\min})$.

Формула для площі перерізу вітки така ж, як і для модуля охолодження.

Оптимальна кількість термопар n_k у каскадах визначається з умов їх теплової узгодженості наступним чином: $n_N = -Q_h / q_{1N} I$, $n_k = n_{k+1} q_{0k+1} / q_{1k}$, $k = 1, \dots, N-1$, де тепла потужність, необхідна для генерації заданої електричної потужності W визначається співвідношенням $Q_h = \frac{W}{\eta}$.

Ітераційний алгоритм

Задача розв'язується чисельним методом. Використовується наступний ітераційний алгоритм.

1. Спочатку задаються деякі початкові наближення функцій неоднорідності матеріалу $C_{k,n,p}^{(0)}(x)$, густини струму $(j_k)_{n,p}^{(0)}$ і початковий розподіл міжкаскадних температур $T_k^{(0)}$.

2. Розв'язується основна крайова задача з системою (17). Знаходяться початкові розподіли $T_{k,n,p}^{(0)}(x)$, $q_{k,n,p}^{(0)}(x)$ для всіх каскадів і розраховується значення функціоналу $J^{(0)}$.

3. Отримані дані використовуються для інтегрування системи допоміжних рівнянь (30). Отримуємо функції $\Psi_{1(k)_{n,p}}(x)$, $\Psi_{2(k)_{n,p}}(x)$.

4. Знаходяться нові наближення для функцій неоднорідності $C_{k,n,p}^{(1)}(x)$ з принципу максимуму Понтрягіна (33).

5. Методом ітерацій Ньютонна розв'язуються нелінійні системи для густини струму (34) і міжкаскадних температур (35) і визначаються нові значення густини струму $(j_k)_{n,p}^{(1)}$ та міжкаскадних температур $T_k^{(1)}$.

Пункти 2 – 5 повторюються з новими функціями та параметрами, а ітерації тривають до тих пір, поки різниця значень функціоналу J не стане меншою за задану похибку.

В результаті ми отримуємо всі оптимальні функції та оптимальні параметри, що відповідають мінімуму функціоналу J_{min} .

Застосування методів оптимального керування для дослідження характеристик модуля

Зазвичай в Інституті термоелектрики (Україна) проєктуються та досліджуються модулі з матеріалів на основі Bi_2Te_3 . ТЕ характеристики таких матеріалів для охолодження та генерації показані на рис. 6.

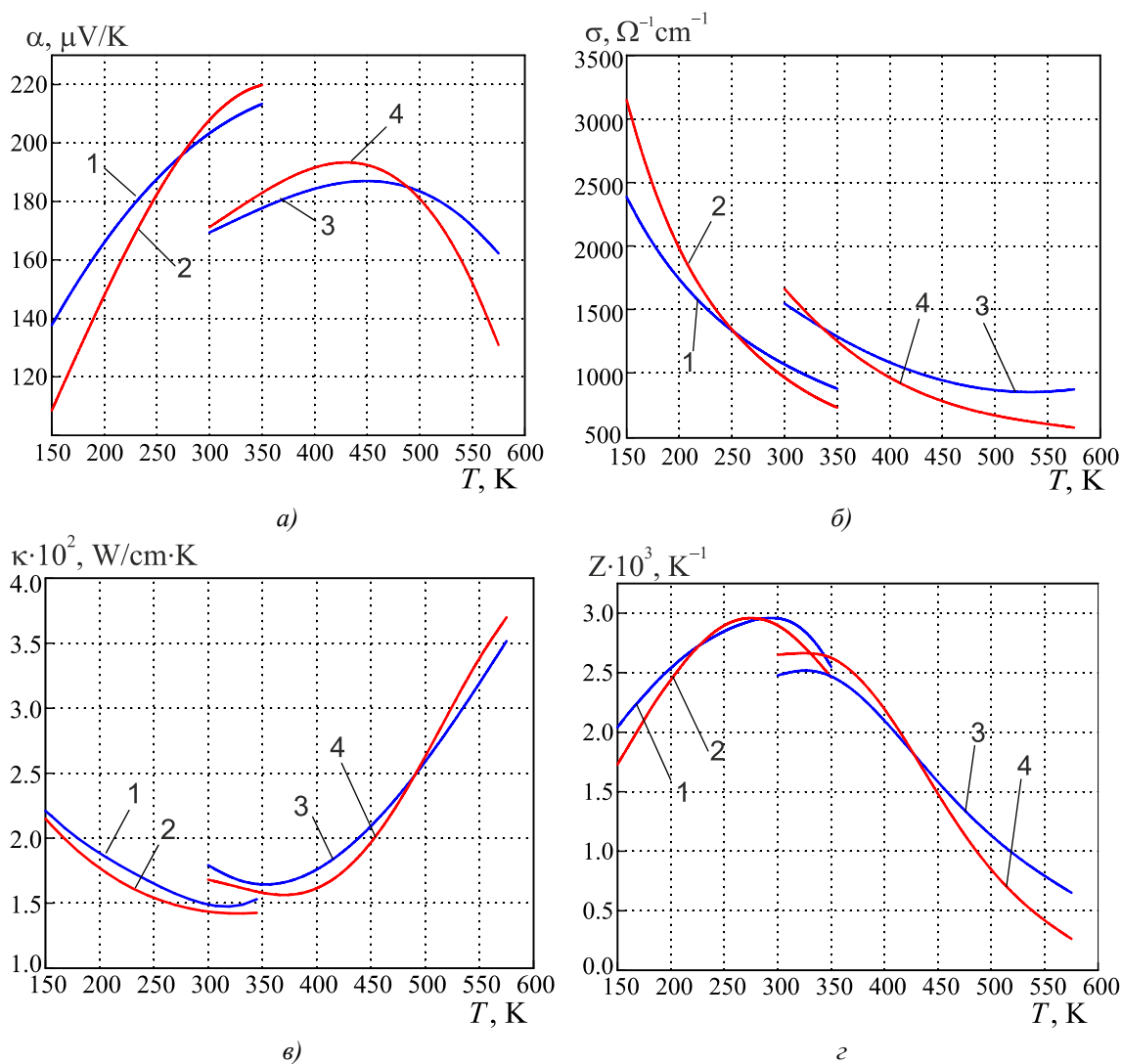


Рис. 6. Характеристики матеріалів на основі Bi_2Te_3 для модулів охолодження та генерації.
 Матеріали для модулів охолодження: 1 – $Bi_2Te_{2.7}Se_{0.3}$ n-типу; 2 – $Bi_{0.5}Sb_{1.5}Te_3$ p-типу та сплави,
 що використовуються для генераторних модулів: 3 – $(Bi_2Te_3)_{0.90}(Sb_2Te_3)_{0.05}(Sb_2Se_3)_{0.05}$ n-типу;
 4 – $(Bi_2Te_3)_{0.25}(Sb_2Te_3)_{0.72}(Sb_2Se_3)_{0.03}$ p-типу

Наші останні дослідження були зосереджені на мініатюризації модулів [5]. Мініатюризація термоелектричних перетворювачів є одним із сучасних напрямків, спрямованих на зменшення використання високовартісних компонентів ТЕ матеріалу, зокрема телуру, здешевлення модулів

і розширення сфери їх застосування. Основним недоліком мініатюрних термоелектричних перетворювачів, що працюють в режимах охолодження або генерації, є їх низька енергоефективність, яка зумовлена дією електричних і теплових опорів контактів, комутацій та ізоляційних пластин.

Було проаналізовано вплив небажаних електричних і теплових опорів на максимальну ефективність охолоджуючих і генераторних перетворювачів з матеріалів на основі Bi_2Te_3 . На рис. 7 наведені залежності максимального COP ε_{max} від довжини термоелемента, розраховані для перепаду температур на модулях 50 К.

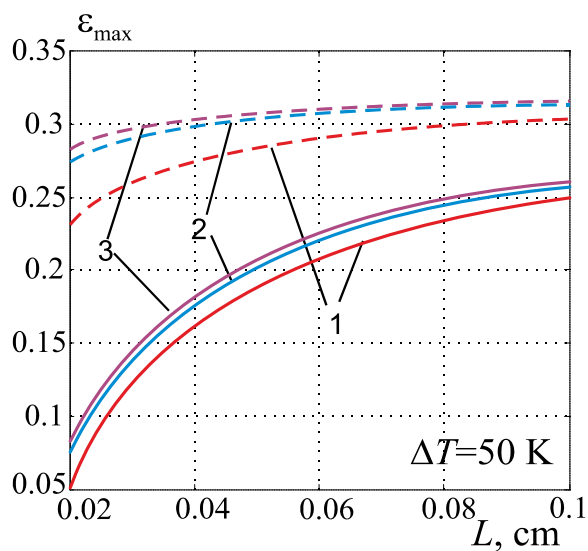


Рис. 7. Залежності максимального COP ε_{max} від довжини вітки L . Контактний опір: $r_c = 5 \times 10^{-6} \text{ Ом см}^2$ (суцільні лінії), $r_c = 10^{-7} \text{ Ом см}^2$ (штрихові лінії). Ізоляційні пластини: 1 – Al_2O_3 , 2 – AlN , 3 – пресований алмазний порошок. Перепад температур: $\Delta T = 50 \text{ К}$. $T_h = 300$

Розрахунок проводився для двох значень контактного опору r_c , а саме для значення $r_c = 5 \times 10^{-6} \text{ Ом см}^2$, яке вважається типовим для комерційних ТЕ модулів, та для мінімального значення $r_c = 10^{-7} \text{ Ом см}^2$, яке зумовлене потенціальним бар'єром на межі між ТЕМ і антидифузійним шаром нікелю.

Для генераторних перетворювачів досліджено вплив небажаних електричних і теплових опорів на ефективність і густину потужності. Залежності максимального ККД η_{max} і густини потужності w від довжини гілок наведено на рис. 8. Зменшення довжини термоелементів призводить до зниження ККД, який особливо різко спадає, якщо довжина менша за 0.1 см, а контактний опір великий. Очевидно, що зі зменшенням довжини гілок густина генерованої потужності зростає. Це свідчить про безумовну перевагу перетворювачів з мініатюрними термоелементами. Але небажані електричні та термічні опори суттєво впливають на цю перевагу, зменшуючи густину потужності.

Ми порівняли два методи проектування модулів – класичний метод А. Іоффе та метод оптимального керування. Як приклад ми розрахували COP модуля для ідеальної моделі А. Іоффе (без небажаних електричних і теплових опорів) і для реальної моделі. Результати представлені в таблиці 1 як відношення ідеального COP до реального COP для різних електричних і теплових опорів контактів та ізоляційних пластин. Видно, що COP ε_{max} наближається до значення ε_0 ідеальної моделі, лише якщо контактний електричний опір мінімальний, а ізоляційні пластини виготовлені з матеріалів з високою теплопровідністю. В іншому випадку ε_{max} мініатюрного

модуля з довжиною віток меншою за 0.05 см у 2–6 разів менше значення ϵ_0 . Цей факт свідчить про доцільність застосування методу оптимального керування.

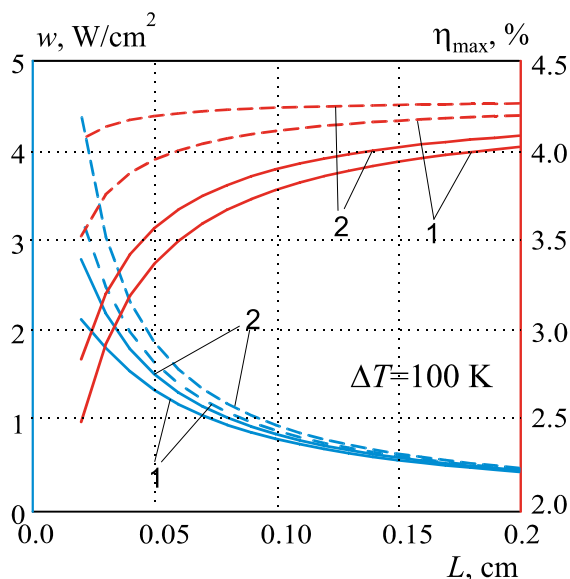


Рис. 8. Залежності максимального ККД η_{max} і густини потужності w від довжини вітки L . Контактний опір: $r_c = 5 \times 10^{-6} \Omega \text{ см}^2$ (суцільні лінії), $r_c = 10^{-7} \Omega \text{ см}^2$ (штрихові лінії). Ізоляційні пластини: 1 – Al_2O_3 , 2 – AlN . Перепад температур: $\Delta T = 100 \text{ К}$. $T_c = 300 \text{ К}$

Таблиця 1

Відношення $\epsilon_0/\epsilon_{max}$ COP ідеального модуля ϵ_0 до COP реального модуля ϵ_{max} в залежності від довжини термоелемента

Довжина вітки L , см	$\epsilon_0/\epsilon_{max}$ $r_c = 10^{-7} \Omega \text{ см}^2$, ізоляційні пластини з AlN	$\epsilon_0/\epsilon_{max}$ $r_c = 10^{-7} \Omega \text{ см}^2$, ізоляційні пластини з Al_2O_3	$\epsilon_0/\epsilon_{max}$ $r_c = 5 \times 10^{-6} \Omega \text{ см}^2$, ізоляційні пластини з AlN	$\epsilon_0/\epsilon_{max}$ $r_c = 5 \times 10^{-6} \Omega \text{ см}^2$, ізоляційні пластини з Al_2O_3
Перепад температур на модулі $\Delta T = 10 \text{ К}$, $\epsilon_0 = 4.149$				
0.1	1.02	1.06	1.10	1.14
0.05	1.04	1.12	1.21	1.29
0.02	1.11	1.30	1.54	1.77
Перепад температур на модулі $\Delta T = 30 \text{ К}$, $\epsilon_0 = 0.961$				
0.1	1.02	1.05	1.14	1.17
0.05	1.04	1.10	1.29	1.35
0.02	1.11	1.26	1.85	2.11
Перепад температур на модулі $\Delta T = 50 \text{ К}$, $\epsilon_0 = 0.324$				
0.1	1.03	1.07	1.25	1.29
0.05	1.07	1.14	1.59	1.72
0.02	1.18	1.40	4.18	6.47
2-каскадний модуль $\Delta T = 70 \text{ К}$, $\epsilon_0 = 0.153$				
0.1	1.02	1.08	1.32	1.40
0.05	1.05	1.17	1.76	2.0
3-каскадний модуль $\Delta T = 90 \text{ К}$, $\epsilon_0 = 0.0618$				
0.1	1.03	1.09	1.47	1.57
0.05	1.05	1.19	2.22	2.54
4-каскадний модуль $\Delta T = 105 \text{ К}$, $\epsilon_0 = 0.0284$				
0.1	1.03	1.1	1.66	1.78
0.05	1.06	1.21	2.84	3.3

Аналіз цих даних також показує, що ефективність мініатюрних модулів можна значно підвищити, якщо небажані опори зменшити до раціональних значень. Переважаючим фактором є зниження електричного контактного опору.

Залежності COP і ККД від питомого контактного опору для перетворювачів з різною довжиною термоелемента наведені на рис. 9. З даних видно, що існує таке раціональне значення питомого контактного опору $r_{c\,opt}$, що за $r_c < r_{c\,opt}$ збільшення ефективності стає незначним, а саме не перевищує 5%. Результати комп'ютерних розрахунків показали, що раціональне значення $r_{c\,opt}$ залежить тільки від довжини віток перетворювача і не залежить ні від перепаду температури в перетворювачі, ні від теплового опору ізоляційних пластин.

За даними рис. 9 визначено раціональні значення, до яких доцільно зменшувати питомий електричний контактний опір для охолоджуючих і генераторних перетворювачів з різною довжиною віток. Результати представлені в таблиці 2.

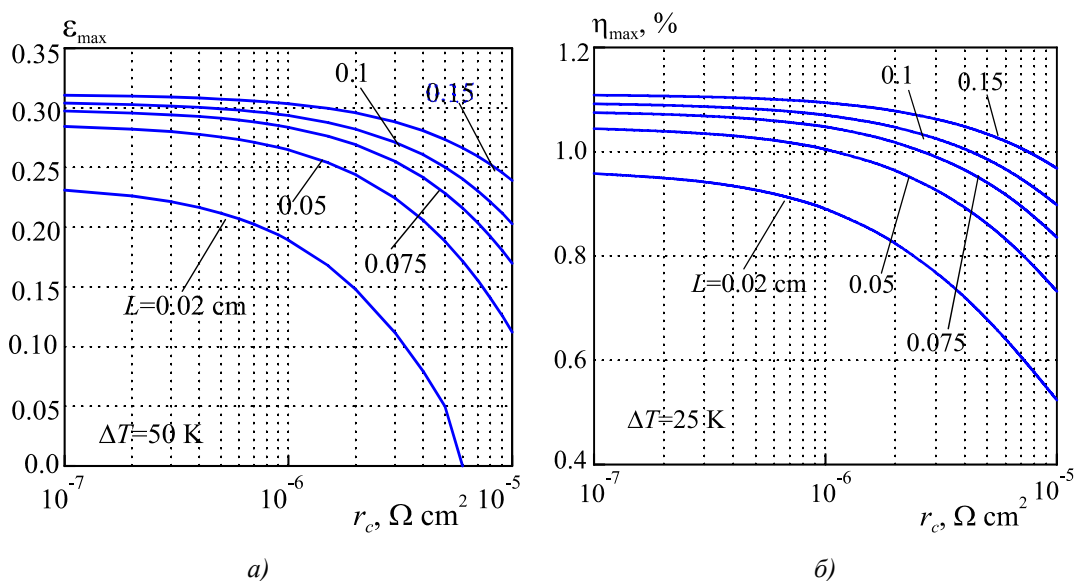


Рис. 9. Залежності COP (а) і ККД (б) від контактної опору для перетворювачів з різною довжиною термоелементів. Ізоляційні пластини виготовлені з Al_2O_3

Таблиця 2

Раціональні значення контактної опору $r_{c\,opt}$

Модуль охолодження					
Довжина термоелемента L , см	0.15	0.1	0.075	0.05	0.02
Раціональний питомий контактний опір $r_{c\,opt}$, $\Omega \cdot \text{cm}^2$	$2 \cdot 10^{-6}$	10^{-6}	$9 \cdot 10^{-7}$	$7 \cdot 10^{-7}$	$3 \cdot 10^{-7}$
Генераторний модуль					
Довжина термоелемента L , см	0.15	0.1	0.075	0.05	0.02
Раціональний питомий контактний опір $r_{c\,opt}$, $\Omega \cdot \text{cm}^2$	$3 \cdot 10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-6}$	$1.5 \cdot 10^{-6}$	10^{-6}	$6 \cdot 10^{-7}$

Саме на такі раціональні значення контактного опору необхідно орієнтуватися у розробці технології мініатюрних модулів.

Висновки

У цій лекції викладаються основні поняття теорії оптимального керування та пояснюється, як вони використовуються для проєктування термоелектричних перетворювачів для охолоджувачів і генераторів та розрахунку їхніх характеристик. Показано, що розроблений на основі теорії оптимального керування чисельний метод проєктування модулів має ряд переваг порівняно з використанням для цієї мети класичних оптимальних співвідношень А. Іоффе. Цей метод підходить для оптимізації одно- і багатокаскадних перетворювачів з однорідних або неоднорідних матеріалів. Він враховує температурну залежність термоелектричних параметрів матеріалу та додаткові термоелектричні ефекти в об'ємі матеріалу, а також електричні та теплові втрати в контактах, комутаціях, ізоляційних пластинах і тепловідводах на гарячій і холодній поверхнях модуля.

У лекції наведено приклади розрахунку характеристик перетворювача та проаналізовано вплив небажаних електричних і теплових опорів контактів, комутацій та ізоляційних пластин на максимальний холодильний коефіцієнт і ККД перетворювачів з матеріалів на основі Bi_2Te_3 . Показано, що енергоефективність модуля значно покращується, якщо ці опори зменшити до їх раціональних значень. Зокрема, холодильний коефіцієнт модулів з мініатюрними термоелементами зростає в 2–6 разів, а ККД генераторних перетворювачів – в 1.5–2 рази.

Показано, що зниження електричного контактного опору є переважаючим фактором підвищення ефективності перетворювачів з мініатюрних термопар. Визначено раціональні значення, до яких доцільно знизити контактний опір. Цих значень контактного опору слід дотримуватися у розробці технології мініатюрних модулів.

Література

1. Salah W.A., Abuhelwa M. (2020). Review of thermoelectric cooling devices recent applications. *J Eng Sci Technol* 15(1), 455–76.
2. Dunham M.T., Barako M.T., LeBlanc S., Asheghi-Roudheni M., Chen B., Goodson K. (2013). Modeling and optimization of small thermoelectric generators for low-power electronics. In *Proceedings of the ASME 2013 International Technical Conference and Exhibition on Packaging and Integration of Electronic and Photonic Microsystems. Volume 1*: Burlingame, California, USA. July 16–18, 2013.
3. Scott A., Whalen C.A., Apblett T.L. (2008). Improving power density and efficiency of miniature radioisotopic thermoelectric generators, *J Power Sources*, 180, 657-663.
4. Qian Xu, Biao Deng, Lenan Zhang, Shaoting Lin, et al. (2022). High-performance, flexible thermoelectric generator based on bulk materials, *Cell Reports Physical Science*, 3(3), 100780.
5. Vikhor L., Kotsur M. (2023). Evaluation of efficiency for miniscale thermoelectric converter under the influence of electrical and thermal resistance of contacts. *Energies*, 16, 4082.
6. Ioffe A.F. (1957). *Semiconductor thermoelements and thermoelectric cooling*; Infosearch Limited: London, UK, 184 pp.
7. Anatyshuk L.I. (2003). *Thermoelectricity. Volume 2. Thermoelectric energy converters*. Institute of Thermoelectricity: Chernivtsi, Ukraine, 348 pp.
8. Anatyshuk L.I. and Vikhor L.N. (2012). *Thermoelectricity. Volume IV. Functionally graded thermoelectric materials*. Institute of Thermoelectricity, Chernivtsi, Ukraine, 172 pp.

9. He H., Wu Y., Liu W., Rong M., Fang Z., Tang X. (2019). Comprehensive modeling for geometric optimization of a thermoelectric generator module. *Energy Convers. Manag.* 183, 645–659.

Надійшла до редакції: 10.09.2024.

L.M. Vikhor, DSc. (Phys.-Math.)

Institute of Thermoelectricity of the NAS and MES of Ukraine,
1 Nauky str., Chernivtsi, 58029, Ukraine
e-mail: vikhorl@ukr.net

**MODELING OF THERMOELECTRIC
CONVERTER CHARACTERISTICS**
(Lecture at the Summer Thermoelectric School,
June 30, 2024, Krakow, Poland)

Under the rough estimation the annual worldwide production of thermoelectric converters (modules) for the needs of thermoelectric power generation and cooling reaches more than 50 million pieces. The thermoelectric converters are mechanically stable, high-reliable with a life cycle up to 20 years. The main disadvantage is their low energy efficiency. This especially applies to miniature modules with a length of thermoelements in the range from 500 μm down to 200 μm . Their low efficiency is due to the effect of electrical and thermal resistances of contacts, interconnectors and insulating plates. One way to improve the efficiency of thermoelectric generators and coolers is to optimize the materials and structure of thermoelectric modules for the required operating conditions. For this purpose, it is advisable to use methods of optimal control theory. They are suitable for optimizing single- and multi-stage converters made of homogeneous or inhomogeneous, so-called functionally graded thermoelectric materials (FGTM). The optimal control method makes it possible to take into consideration the temperature dependences of the thermoelectric parameters of materials, additional bulk thermoelectric effects that occur in FGTM, and the influence of unwanted electrical and thermal resistances in modules. This lecture outlines the main concepts of the optimal control theory and explains how to use them to design modules with optimal structure and simulate module characteristics. Examples of modeling the converter performances are considered and the effect of undesirable electrical and thermal resistances on the maximum efficiency of cooling and generating converters made of Bi_2Te_3 -based materials is analyzed. It is shown that the efficiency of modules, especially of miniature ones, can be significantly improved if these unwanted resistances are reduced to their rational values. The decrease in electrical contact resistance is the predominant factor. The rational values to which it is advisable to decrease the electrical contact resistivity have been determined. It is necessary to focus on such rational contact resistance values in the development of modules' technology. Bibl. 9, Figs. 9, Tabl. 2.

Key words: thermoelectric converter, thermoelectric module efficiency, methods of optimal control theory, coefficient of performance, electrical contact resistance, thermal resistance of interconnect and insulating plates.

References

1. Salah W.A., Abuhelwa M. (2020). Review of thermoelectric cooling devices recent applications. *J Eng Sci Technol* 15(1), 455–76.

2. Dunham M.T., Barako M.T., LeBlanc S., Asheghi-Roudheni M., Chen B., Goodson K. (2013). Modeling and optimization of small thermoelectric generators for low-power electronics. In *Proceedings of the ASME 2013 International Technical Conference and Exhibition on Packaging and Integration of Electronic and Photonic Microsystems. Volume 1*: Burlingame, California, USA. July 16–18, 2013.
3. Scott A., Whalen C.A., Apblett T.L. (2008). Improving power density and efficiency of miniature radioisotopic thermoelectric generators, *J Power Sources*, 180, 657-663.
4. Qian Xu, Biao Deng, Lenan Zhang, Shaoting Lin, et al. (2022). High-performance, flexible thermoelectric generator based on bulk materials, *Cell Reports Physical Science*, 3(3), 100780.
5. Vikhor L., Kotsur M. (2023). Evaluation of efficiency for miniscale thermoelectric converter under the influence of electrical and thermal resistance of contacts. *Energies*, 16, 4082.
6. Ioffe A.F. (1957). *Semiconductor thermoelements and thermoelectric cooling*; Infosearch Limited: London, UK, 184 pp.
7. Anatyshuk L.I. (2003). *Thermoelectricity. Volume 2. Thermoelectric energy convertors*. Institute of Thermoelectricity: Chernivtsi, Ukraine, 348 pp.
8. Anatyshuk L.I. and Vikhor L.N. (2012). *Thermoelectricity. Volume IV. Functionally graded thermoelectric materials*. Institute of Thermoelectricity, Chernivtsi, Ukraine, 172 pp.
9. He H., Wu Y., Liu W., Rong M., Fang Z., Tang X. (2019). Comprehensive modeling for geometric optimization of a thermoelectric generator module. *Energy Convers. Manag.* 183, 645–659.

Submitted: 10.09.2024.