УДК 004.94

ИНФОРМАЦИОННАЯ ПОДДЕРЖКА РАСЧЕТОВ ПАРАМЕТРОВ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ОХЛАДИТЕЛЕЙ

А.К. Стешенко[1,@], В.А. Дударев[2]

[1]Московский технологический университет (Институт тонких химических технологий), Москва 119571, Россия
[2]Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Москва 119334, Россия
[@]Автор для переписки, e-mail: anross2101@gmail.com

Описывается разработка информационной системы для моделирования по экспериментальным данным ряда полиноминальных функций, на основе которых рассчитываются параметры термоэлектрических охладителей. Ввод исходных данных производится вручную или посредством автоматического импорта файлов с входными данными. Расчет производится в несколько этапов, включающих в себя несколько видов расчетов, в том числе проводимых параллельно и независимо друг от друга. На первом этапе рассчитываются функции измеряемых величин методом наименьших квадратов. На их основе происходит итерационный расчет основных параметров, а также расчет ряда дополнительных параметров ветвей. Для удобства анализа получаемые результаты расчетов информационная система визуализирует их в табличном виде и в виде графиков, предоставляя их в приоритете важности для оператора. Полученные результаты могут быть экспортированы копированием или автоматически в файл Excel.

Ключевые слова: *компьютерное моделирование, термоэлектрические охладители, автоматизация, эффективная термоэлектрическая добротность модуля.*

DEVELOPMENT OF AN INFORMATION SYSTEM FOR CALCULATING PARAMETERS OF THERMOELECTRIC COOLERS

A.K. Steshenko[1,@], A.V. Dudarev[2]

[1]Moscow Technological University (Institute of Fine Chemical Technologies), Moscow 119571, Russia
[2]A.A. Baykov Institute of Metallurgy and Materials Science, Russian Academy of Sciences, Moscow 119334, Russia
[@]Corresponding author e-mail: anross2101@gmail.com

This article describes the development of information systems for modeling a number of polynomial functions based on experimental data, on the basis of which the parameters of thermoelectric coolers are calculated. The input data is entered manually or by uploading files with input data. The calculation is carried out in several stages, including different types of calculations. Some of them are done in parallel and independently of each other. At the first stage, the functions of the measured quantities are calculated by the method of least squares. On their basis the iterative calculation of the main parameters, and also the calculation of a number of additional parameters of the branches are carried out. For convenience in analyzing results, the IS visualizes them in a tabular form and in the form of graphs, giving them in priority of importance for the operator. The results can be exported by copying or automatically in an Excel file.

Keywords: *computer modeling, thermoelectric coolers, automation, efficient thermoelectric figure of merit of a module*

Введение

Получение и преобразование энергии является одним из важнейших направлений деятельности современной цивилизации. Большое внимание обращено в этой связи на твердотельные термоэлектрические преобразователи. Последние имеют ряд преимуществ перед традиционными электрическими генераторами и холодильниками: простота конструкции, отсутствие движущихся частей, бесшумность работы, высокая надежность, возможность миниатюризации без потери эффективности.

Известно, что термоэлектрическая добротность материала определяется безразмерным коэффициентом

$$ZT = \alpha^2\sigma T/æ,$$

где α – коэффициент Зеебека; σ, æ – удельные электропроводность и теплопроводность; T – температура.

Существенный прорыв в достижении высокой термоэлектрической добротности был осуществлен в 50-х годах прошлого века благодаря реализации выдвинутой А.Ф. Иоффе концепции полупроводниковых твердых растворов. Тогда наибольшее значение ZT составило 0.75. Однако метод твердых растворов себя исчерпал, и за последующие 50 лет удалось повысить это значение лишь до 1. Только в самом конце XX – начале XXI вв. наметился новый прорыв в повышении ZT термоэлектрических материалов, основанный на концепции создания наноструктур. Поэтому очень многие исследователи занимаются поиском новых способов получения термоэлектрических материалов с более высокими значениями термоэлектрической добротности, тем более что в последнее время очень остро встал вопрос о повышении эффективности преобразовании тепловой энергии в электрическую из-за ощутимой нехватки ископаемых видов топлива и выброса тепловыми электростанциями огромного количества газов, вызывающих парниковый эффект и глобальное изменение климата. Кроме того, большое внимание уделяется и термоэлектрическим охлаждающим устройствам, которые находят широкое применение во многих областях техники. Однако, для по-настоящему широких промышленных применений термоэлектрических преобразователей энергии необходимо существенное повышение их эффективности. Исследователям приходится изучать очень большое количество термоэлектрических материалов, исследуя как различные составы, так и способы их получения [1–3]. Чтобы уменьшить трудоемкость и затраты материалов при получении термоэлектрических устройств, необходимо было разработать программу, которая позволила бы найти наиболее оптимальные комбинации этих материалов в изделиях, что и составило цель данной работы.

Ввод исходных данных

Входные данные представляют собой массивы значений температуры измерения (T), коэффициента Зеебека (α), удельной электропроводность (α) и теплопроводность (κ) для p-ветви и n-ветви. Они могут быть введены пользователем:

- напрямую в программе;
- импортированием из Excel;
- импортированием из текстового файла.

Данные в xls должен быть следующего формата: первая строка заголовок или пустая. Вторая строка и далее значения, очередность колонок не должна нарушаться. Пример таблицы приведен ниже. Данные для p-ветви и n-ветви загружаются раздельно.

T, K	α*10^3, В/Т	σ, 1/(Ом*см)	κ*10^3, ВТ/(см*К)
296	203	955	12.7

Кроме того, для расчетов требуются значения следующих величин:

1) T_1 – начальная температура горячей стороны, К;
2) δT – приближение T_1;
3) ΔT_1 – шаг уменьшения температуры T_1;
4) T_n – конечная температура горячей стороны, К;
5) S – сечение ветвей, мм^2;
6) L – длина ветвей, мм;
7) N – число ветвей.

Редко изменяемые данные и предельные значения вводимых величин вынесены в настроечный файл xml. При запуске программы они загружаются, могут быть изменены во время работы и сохраняются при закрытии программы. В случае, если файл настроек отсутствует, при запуске программа покажет соответствующее сообщение.

Список сохраняемых значений (рис. 1):

1) степень полинома;
2) данные для расчета (T_1, T, δT, ΔT_1, T_n, S, L, N);
3) все значения в окне настроек (предельные значения величин при проверке экспериментальных данных).

При этом при импорте экспериментальных данных значения T_1 и T округляются в большую сторону до ближайшего числа, кратного 10, а значение T_n – в меньшую сторону.

Расчет

Перед расчетом обе таблицы проверяются на правильность значений:

1) нет незаполненных значений в таблицах;
2) значения температуры попадают в диапазон [50, 600];

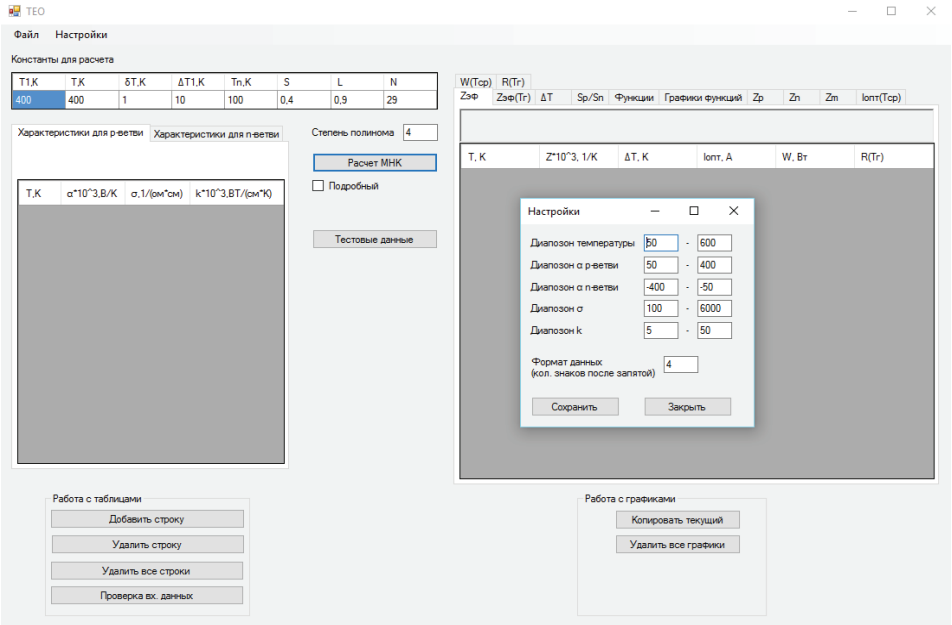

Рис. 1. Программа расчета ТЕО и ее меню настроек.

3) значения альфы попадают в диапазон [50, 400] для p-ветви;

4) значения альфы попадают в диапазон [-350, -50] для n-ветви;

5) значения сигмы попадают в диапазон [100, 6000];

6) значения каппы попадают в диапазон [5, 50];

7) степень полинома не превышает количество экспериментальных данных.

Расчет производится в несколько этапов. На первом этапе по экспериментальным данным, используя метод наименьших квадратов, формируются функции с заданной степенью полинома k:

$$1)\ \alpha_p(T) = A_{p0} + A_{p1}\left(\frac{t_p}{100}\right) + A_{p2}\left(\frac{t_p}{100}\right)^2 + A_{pk}\left(\frac{t_p}{100}\right)^k;$$

$$2)\ \sigma_p(T) = B_{p0} + B_{p1}\left(\frac{t_p}{100}\right) + B_{p2}\left(\frac{t_p}{100}\right)^2 + B_{pk}\left(\frac{t_p}{100}\right)^k;$$

$$3)\ \kappa_p(T) = C_{p0} + C_{p1}\left(\frac{t_p}{100}\right) + C_{p2}\left(\frac{t_p}{100}\right)^2 + C_{pk}\left(\frac{t_p}{100}\right)^k;$$

$$4)\ \alpha_n(T) = A_{n0} + A_{n1}\left(\frac{t_n}{100}\right) + A_{n2}\left(\frac{t}{100}\right)^2 + A_{nk}\left(\frac{t}{100}\right)^k;$$

$$5)\ \sigma_n(T) = B_{n0} + B_{n1}\left(\frac{t_n}{100}\right) + B_{n2}\left(\frac{t_n}{100}\right)^2 + B_{nk}\left(\frac{t_n}{100}\right)^k;$$

$$6)\ \kappa_n(T) = C_{n0} + C_{n1}\left(\frac{t_n}{100}\right) + C_{n2}\left(\frac{t_n}{100}\right)^2 + C_{nk}\left(\frac{t_n}{100}\right)^k.$$

Функции, полученные с помощью МНК, выводятся на вкладке «Функции» (рис. 2), для каждой функции рассчитывается средняя квадратичная погрешность аппроксимации и коэффициент Фишера. Для групп уравнений p-ветви и n-ветви приводятся табличные значения Фишера. В случае, если рассчитанный коэффициент Фишера больше табличного, будет показано предупреждающее сообщение. На следующей вкладке «Графики функций» (рис. 3) приведены графики соответствующих функций, построенные на диапазоне температур экспериментальных данных.

После получения функций вычисляются значения термоэлектрической эффективности ветвей Z_p, Z_n и эффективности модуля от температуры горячего спая Z_m в диапазоне температуры от T_l до T_n с шагом уменьшения ΔT_1. По результатам расчета выводятся таблицы значений $Z_p(T)$, $Z_n(T)$ и $Z_m(T)$ и соответствующие им графики. В этих расчетах используются следующие формулы:

$$Z_p = \frac{\alpha_p^{\,2} * \sigma_p}{\kappa_p},\ Z_n = \frac{\alpha_n^{\,2} * \sigma_n}{\kappa_n},\ Z_m = \frac{(\alpha_p + \alpha_n)^2 * (\sigma_p + \sigma_n)}{(\kappa_p + \kappa_n)}.$$

Для оценки экспериментальных данных рассчитывается оптимальное соотношение размеров ветвей S_p/S_n в аналогичном диапазоне температур. Таблица рассчитанных значений и график выводятся в соответствующий вкладке. Для расчетов используется формула:

$$S_p/S_n = \sqrt{\frac{\sigma_p * \kappa_p}{\sigma_n * \kappa_n}}.$$

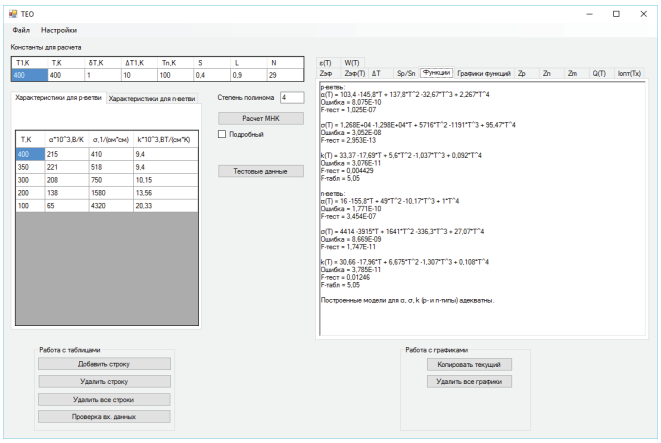

Рис. 2. Вывод функций.

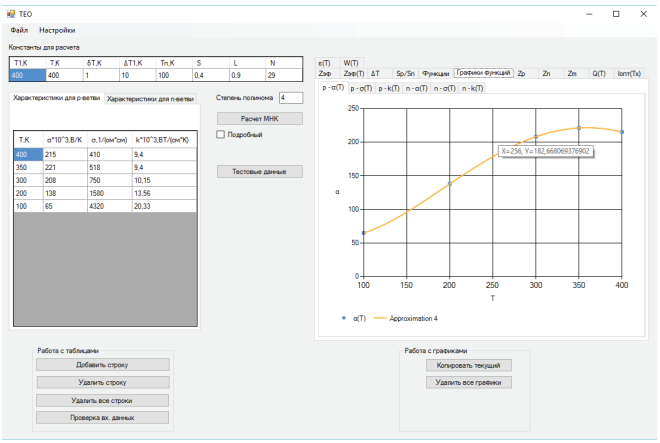

Рис. 3. Вывод графиков функций.

Далее проводятся основные расчеты по вычислению значений:

1) термоэлектрической добротности модуля $Z_m(T_г)$;

2) эффективной термоэлектрической добротности модуля $Z_{эф}(T_г)$;

3) разницы температуры горячей и холодной стороны ΔT;

4) сопротивление модуля $R_{бат}(T_г)$

5) плотности оптимального тока $I_{опт}(T_г)$;

6) мощности модуля $W(T_г)$.

Расчеты проводятся в диапазоне температур от T_1 до T_n с шагом уменьшения ΔT_1. Каждое значение $Z_{эф}(T)$ рассчитывается итерационно (алгоритм представлен на рис. 4). На первой итерации $T_г$ принимается равной T_1 для первого вычисляемого значения T_1 и далее $T_1 - \Delta T_1$. Рассчитывается Z_m от $T_г$. Далее рассчитывается ΔT по формуле:

$$\Delta T = \frac{(\sqrt{1+2*Z_m(T_г)*T_г}-1)^2}{(2*Z_m(T_г))}.$$

После этого рассчитываются значения T_x:

$$T_x = T_г - \Delta T,\ T_{ср}:\ T_{ср} = \frac{T_г + T_x}{2}\ \text{и}\ Z_{эф}:\ Z_{эф} = \frac{2*\Delta T}{T_x^{\ 2}}.$$

Если $\Delta T - \Delta T_{пред} > \delta T$ ($\Delta T_{пред} = \Delta T$ на предыдущей итерации), то выполняется повторный расчет, при котором принимается $\Delta T_{пред} = \Delta T$ и $T_г = T_{ср}$. Таким образом, расчет выполняется как минимум два раза. Если $\Delta T - \Delta T_{пред} < \delta T$, то итерационный расчет заканчивается, и мы получаем значение $Z_{эф}$ для текущего значения T_1.

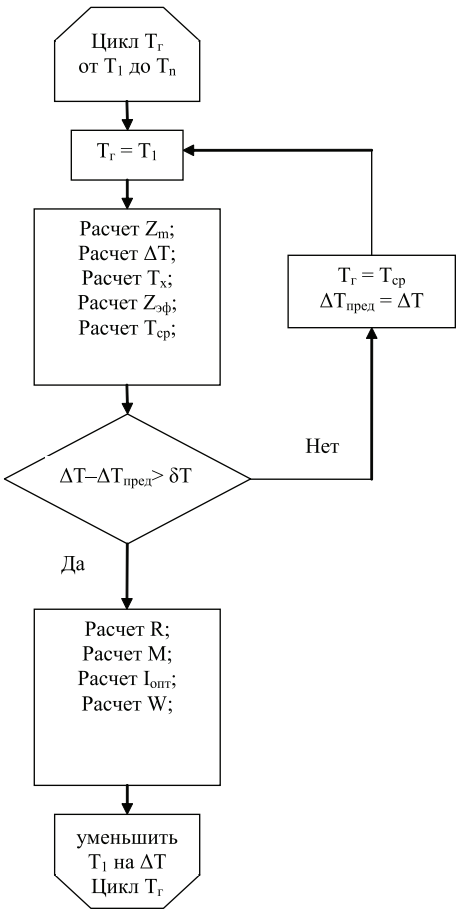

Рис. 4. Блок-схема расчетов основных параметров.

По окончании итерационного расчета выполняются расчеты значений $R_{бат}$, $I_{опт}$, W. Расчеты коэффициентов α_p, σ_p, κ_p, α_n, σ_n, κ_n проводятся для $T_{ср.}$:

$$R = L*N*(\frac{1}{S*\sigma_n} + \frac{1}{S*\sigma_p});$$

$$M = \sqrt{\frac{1+Z_{эф}*(T_г+T_x)}{2}};$$

$$I_{опт} = \frac{2*\Delta T*\overline{\alpha}}{L*(M-1)*\left(\frac{1}{S*\sigma_p}+\frac{1}{S*\sigma_n}\right)}, \text{ где } \overline{\alpha} = \frac{|\alpha_p|+|\alpha_n|}{2};$$

$$W = I_{опт}^2 * R.$$

По окончании все рассчитанные значения и их графики будут выведены в соответствующих вкладках (рис. 5).

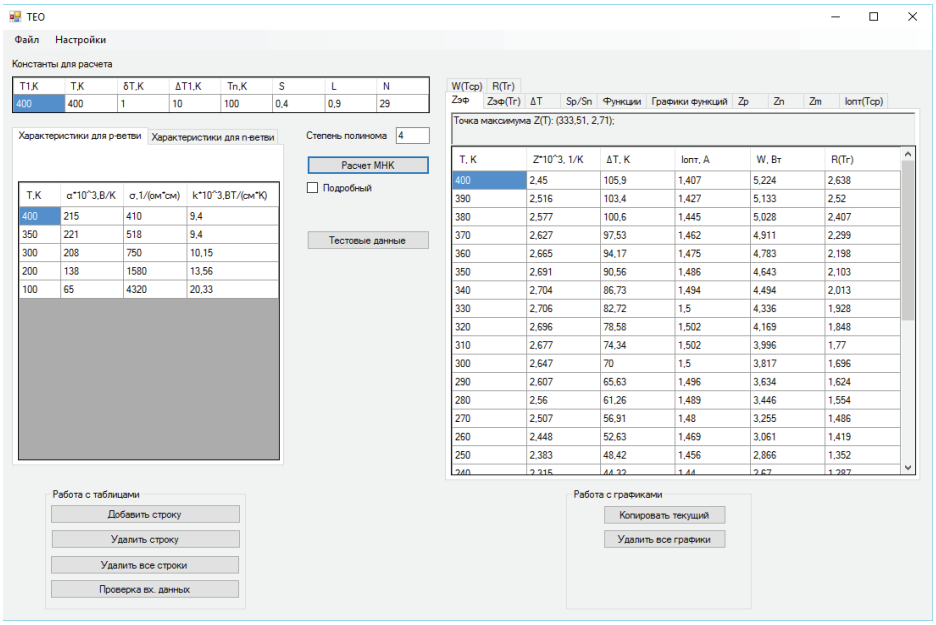

Рис. 5. Панель вывода результатов расчетов.

Экспорт результатов

Для дальнейшей работы с результатами расчетов проводится экспорт таблицы результатов в Excel либо в текстовый файл. Также доступно копирование таблицы функций с их описанием.

Для копирования графиков нужно выбрать нужный и нажать кнопку «Копировать текущий», выбранный график будет помещен в буфер обмена с разрешением 2100×1500.

Заключение

Разработана программа расчета энергетических характеристик термоэлектрических однокаскадных батарей, учитывающая температурные зависимости термоэлектрических параметров материалов для p- и n-ветвей этих батарей, позволяющая оценить наиболее выгодные сочетания этих материалов.

Список литературы:

1. Иоффе А.Ф., Стильбанс Л.С., Иорданишвили Е.К., Ставицкая Т.С. Термоэлектрическое охлаждение. М.-Л.: Изд-во АН СССР, 1956. 108 с.

2. Goldsmid H.J., Douglas R.W. The use of semiconductors in thermoelectric refrigeration // British J. Appl. Phys. 1954. V. 5. P. 386–390.

3. Иванова Л.Д., Петрова Л.И., Гранаткина Ю.В., Земсков В.С., Соколов О.Б., Скипидаров С.Я., Курганов В.А., Подбельский В.В. Материалы на основе халькогенидов висмута и сурьмы для каскадов термоохладителей // Неорган. материалы. 2011.Т. 47. № 5. С. 521–527.

4. Иванова Л.Д., Петрова Л.И., Гранаткина Ю.В., Никулин Д.С., Райкина О.А. Кристаллизация и механические свойства твердых растворов халькогенидов висмута и сурьмы // Неорган. материалы. 2016. Т. 52. № 3. С. 289–296.

References:

1. Ioffe A.F., Stil'bans L., Iordanishvili E.K., Stavitskaya T. S. Thermoelectric cooling. Moscow-Leningrad: The Academy of Sciences of the USSR Publ., 1956. 108 p. (in Russ.).

2. Goldsmid H.J., Douglas R.W. The use of semiconductors in thermoelectric refrigeration // British J. Appl. Phys. 1954. V. 5. P. 386–390.

3. Ivanova L.D., Petrova L.I., Granatkina Yu.V., Zemskov V.S., Sokolov O.B., Skipidarov S.Ya., Kurganov V.A., Podbelsky V.V. Materials based on bismuth chalcogenides and antimony for cascades of thermal chillers // Neorganicheskie materialy (Inorganic Materials). 2011. V. 47. № 5. P. 521–527. (in Russ.).

4. Ivanova L.D., Petrova L.I., Granatkina Yu.V., Nikulin D.S., Raikina O.A. Crystallization and mechanical properties of solid solutions of chalcogenides of bismuth and antimony // Neorganicheskie materialy (Inorganic

5. Иванова Л.Д., Петрова Л.И., Гранаткина Ю.В., Нихезина И.Ю., Аленков В.В., Кичик С.А., Мельников А.А. Влияние добавок порошка, полученного спиннингованием расплава, на термоэлектрические свойства халькогенидов висмута и сурьмы // Неорган. материалы. 2017. Т. 53. № 1. С. 1–7.

Materials). 2016. V. 52. № 3. P. 289–296. (in Russ.).

5. Ivanova L.D., Petrova L.I., Granatkina Yu.V., Nikhezina I.Yu., Alenkov V.V., Kichik S.A., Melnikov A.A. Influence of additives of powder obtained by spinning of melt on thermoelectric properties of bismuth and antimony chalcogenides // Neorganicheskie materialy (Inorganic Materials). 2017. V. 53. № 1. P. 1–7. (in Russ.).

Об авторах:

Стешенко Анатолий Константинович, магистр кафедры информационных систем в химических технологиях Института тонких химических технологий ФГБОУ ВО «Московский технологический университет» (119571, Россия, Москва, пр-т Вернадского, д. 86).

Дударев Виктор Анатольевич, кандидат технических наук, доцент, ведущий научный сотрудник ФГБУН Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН (119334, Россия, г. Москва, Ленинский пр-т, д. 49).