
ISSN 2306-1561

Automation and Control in Technical Systems (ACTS)

2014, No 1.1(8), pp. 3-13.

DOI: 10.12731/2306-1561-2014-1-1



Modeling of the propagation of heat in thermoelectric materials

Nikolaev Andrey Borisovich

Russian Federation, Honoris Causa, Doctor of Technical Sciences, Professor, Dean of the Faculty «Control Systems».

Moscow Automobile & Road construction State Technical University, 125319, Russian Federation, Moscow, Leningradsky prospekt, 64. Tel.: +7 (499) 151-64-12. <http://www.madi.ru>

nikolaev.madi@mail.ru

Ni Zaw

Republic of the Union of Myanmar, Postgraduate Student, Department of «Automated Control Systems».

Moscow Automobile & Road construction State Technical University, 125319, Russian Federation, Moscow, Leningradsky prospekt, 64. Tel.: +7 (499) 151-64-12. <http://www.madi.ru>

nizaw.miet@gmail.com

Abstract. This article deals with the problem of computer simulation of a nonlinear heat conduction problem, which has applications in integrated micro circuitry. We investigate the method of application of finite difference methods for solving the problem of propagation of heat in a medium with nonlinear sources (sinks) and the non-linear coefficient of thermal conductivity. Original method of averaging in the formalization of a stable finite-difference scheme, with non-linear coefficients.

Keywords: thermal conductivity, semiconductor thermoelectric material, the grid method, approximation, stability, convergence, boundary value problem.

ISSN 2306-1561

Автоматизация и управление в технических системах (АУТС)

2014. – №1.1(8). – С. 3-13.

DOI: 10.12731/2306-1561-2014-1-1



УДК 681.518

Моделирование процессов распространения тепла в термоэлектрических материалах

Николаев Андрей Борисович

Российская Федерация, Лауреат премии правительства РФ, Заслуженный деятель науки РФ, доктор технических наук, профессор, декан факультета «Управление».

ФГБОУ ВПО «Московский автомобильно-дорожный государственный технический университет (МАДИ)», 125319, Российская Федерация, г. Москва, Ленинградский проспект, д.64, Тел.: +7 (499) 151-64-12, <http://www.madi.ru>

nikolaev.madi@mail.ru

Ни Зо

Республика Союза Мьянма, аспирант кафедры «Автоматизированные системы управления».

ФГБОУ ВПО «Московский автомобильно-дорожный государственный технический университет (МАДИ)», 125319, Российская Федерация, г. Москва, Ленинградский проспект, д.64, Тел.: +7 (499) 151-64-12, <http://www.madi.ru>

nizaw.miet@gmail.com

Аннотация. Настоящая статья посвящена задаче компьютерного моделирования одной нелинейной задачи теплопроводности, имеющей приложения в интегральной микросхемотехнике. Исследуется методика применения конечно-разностных методов для решения задачи распространения тепла в среде с нелинейными источниками (стоками) и нелинейным коэффициентом теплопроводности. Описан оригинальный метод усреднения при формализации устойчивой конечно-разностной схемы с нелинейными коэффициентами.

Ключевые слова: теплопроводность, полупроводник, термоэлектрический материал, метод сеток, аппроксимация, устойчивость, сходимость, краевая задача.

1. Введение

Термоэлектрические материалы с точки зрения их технологии занимают промежуточное положение между высокоомными полупроводниками, применяемыми в радиоэлектронике (германий, кремний), и металлическими сплавами. Возобновление широкого интереса к проблеме создания эффективных термоэлектрических

преобразователей связано с внедрением новых подходов, в первую очередь, основанных на концепции Слэка о веществах, сочетающих свойства фононного стекла и электронного кристалла в результате пространственного разделения подструктур, отвечающих за транспорт носителей заряда и транспорт фононов [1 - 4]. В результате оказывается возможным практически независимое увеличение электропроводности и уменьшение фононной теплопроводности материала, что необходимо для реализации высоких значений безразмерной термоэлектрической эффективности.

2. Теплопроводность термоэлектрических материалов

Теплопроводность представляет собой одно из важнейших физических свойств полупроводникового металла, характеризующее способность тела передавать тепловую энергию от одной его точки к другой, если между ними существует разница температур. Электрические проводники и диэлектрики имеют различные механизмы теплопроводности, и, как следствие, температурные зависимости теплопроводности в них носят различный характер. Знание теплопроводности полупроводникового металла необходимо для проведения теплофизических расчетов [1 – 13].

Рассмотрим процесс распространения тепла в однородном стержне. На рисунке 1, представлена физическая модель, представляющая собой тонкий металлический стержень (брус), нагреваемый с одного или с обоих торцов [1].

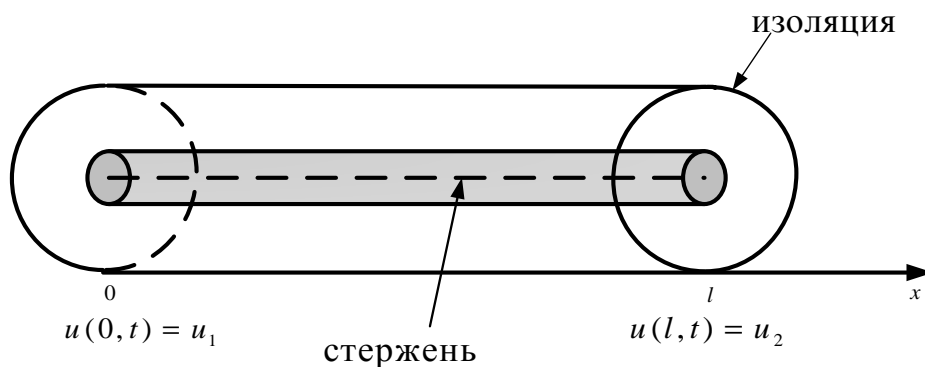


Рисунок 1 - Физическая модель распространения тепла в однородном стержне

При условии боковой изоляции стержня потери тепла через боковую поверхность отсутствуют. Поэтому, если считать, что теплоемкость стержня постоянна (однородный стержень), то температура в любом поперечном сечении будет зависеть лишь от координаты x и от времени t . Этот процесс может быть описан функцией $u(x, t)$, представляющей температуру в сечении x в момент времени t . Найдем уравнение, которому должна удовлетворять функция $u(x, t)$. Для этого сформулируем физические закономерности, определяющие процессы, связанные с распространением тепла [1 - 4].

Изучение температурных процессов в большом интервале изменения температур приводит к нелинейному уравнению теплопроводности в однородном стержне (однородной одномерной среде) запишется в виде:

$$c\rho \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(u, x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + F(u, x, t) \quad (1)$$

где c - удельная теплоемкость, ρ - плотность, $k(u, x)$ - коэффициент теплопроводности (в общем случае зависит от самого решения $u(x, t)$). Тепловой поток через боковую поверхность отсутствует. Внутри среды действуют источники или стоки, плотность которых описывается функцией $F(u, x, t)$.

Для выделения единственного решения уравнения теплопроводности необходимо к уравнению присоединить начальные и граничные условия. Начальное условие в отличие от уравнения гиперболического типа состоит лишь в задании значений функции $u(x, t)$ в начальный момент t_0 . Граничные условия могут быть различны в зависимости от температурного режима на границах. Рассматривают три основных типа граничных условий.

$u(x, 0) = \varphi(x)$ - начальное условие;

$$\begin{cases} \alpha_1 \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=0} + \beta_1 u(0, t) = q_1(t) \\ \alpha_2 \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=1} + \beta_2 u(1, t) = q_2(t). \end{cases} \quad (2)$$

При $\alpha_i = 0, \beta_i = 1$ - граничное условие первого рода. При $\alpha_i = 1, \beta_i = 0$ - граничное условие второго рода. Если $\alpha_i \neq 0, \beta_i \neq 0$ - граничное условие третьего рода, где $-\beta$ - параметр определяющей степенную зависимость функции поглощения от температуры; α - коэффициент температур-опроводности

Теоретической основой для численного решения поставленной задачи является метод сеток, в котором основными понятиями являются аппроксимация, устойчивость и сходимост ь конечно-разностных уравнений к точному решению исходной дифференциальной задачи при стремлении шагов сетки h к нулю. Изобразим сетку (рисунок 2), на которой мы ищем решение дифференциальной задачи:

$$Lu = f. \quad (3)$$

Сеточная система уравнений:

$$L_h u^{(h)} = f^{(h)}, \quad (4)$$

где L_h - конечно-разностная аппроксимация дифференциального оператора; $u^{(h)}$ - значения функции $u(x, t)$ в узлах сетки (матрица).

3. Определение сходимости

Пусть требуется приближенно вычислить решение u дифференциальной краевой задачи (3)

Для приближенного отыскания таблицы $[u]_h$, представляющей собой точное решение задачи (3), надо на основе этой задачи составить систему уравнений вида (4) относительно функции $u^{(h)}$ из U_h , чтобы имела место сходимост ь

$\| [u]_h - u^{(h)} \|_{U_h} \rightarrow 0, h \rightarrow 0$. Если для решения разностной краевой задачи (4) выполнено неравенство $\| [u]_h - u^{(h)} \|_{U_h} \leq ch^k, c = const$. Сходимость имеет порядок k относительно h .

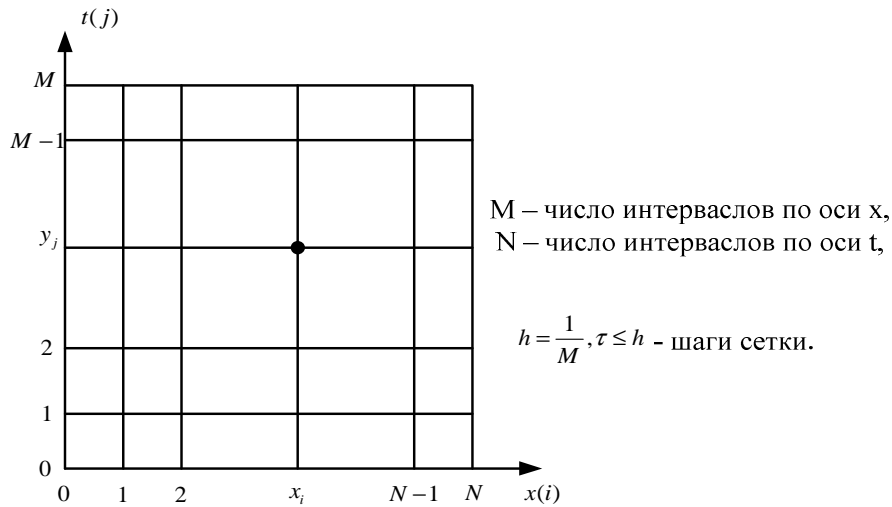


Рисунок 2 - Сетка для аппроксимации дифференциальной задачи

4. Аппроксимация

Чтобы понятие аппроксимации имело смысл, надо ввести норму в пространстве F_h , которому принадлежит правая часть $f^{(h)}$ уравнения (4). По определению разностная задача (4) аппроксимирует задачу (3) на решении u , если в равенстве $L_h[u]_h = f^{(h)} + \delta f^{(h)}$, невязка $\delta f^{(h)}$, возникающая при подстановке $[u]_h$ в разностную краевую задачу (4), стремится к нулю, при $h \rightarrow 0$: $\| \delta f^{(h)} \|_{F_h} \rightarrow 0$ и $\| \delta f^{(h)} \|_{F_h} \leq ch^k$. Где c не зависит от h , то аппроксимация имеет порядок k относительно h .

Определение устойчивости

Разностная краевая задача (4) по определению устойчива, если существуют числа $\delta > 0, h_0 > 0$ такие, что при любом $h < h_0$ и любом $\epsilon^{(h)}$ из F_h , удовлетворяющем неравенству $\| \epsilon^{(h)} \|_{F_h} < \delta$, разностная краевая задача $L_h z^{(h)} = f^{(h)} + \epsilon^{(h)}$, имеет одно и только одно решение, причем выполняется условие $\| z^{(h)} - u^{(h)} \|_{U_h} \leq c \| \epsilon^{(h)} \|_{F_h}$. где c – некоторая постоянная, не зависящая от h .

На рисунке 3 показаны варианты выбора шаблонов на сетке, обычно используемых при решении линейных задач теплопроводности. Здесь же приведена конечно-разностная система уравнений, аппроксимирующая дифференциальную задачу с постоянными коэффициентами на шаблоне “ящик” и имеющая повышенный порядок точности $O(\tau_2 + h_2)$.

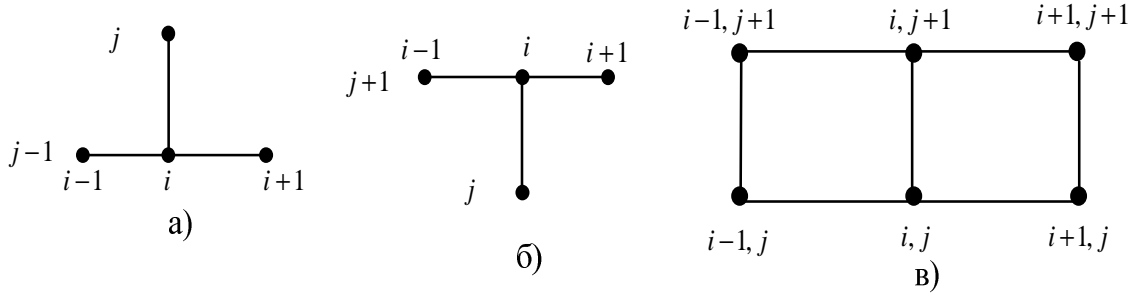


Рисунок 3 - Конечно-разностные схемы и виды шаблонов: а) образный шаблон для явной схемы; б) образный шаблон для неявной схемы; в) схема «Кранка-Николсона» (схема «ящик»)

Схемы а) и б) дают точность аппроксимации $O(\tau_2+h_2)$. Схема в) при значении весовых коэффициентов $\frac{1}{2} = 1 - \sigma$ дает точность $O(\tau_2+h_2)$. Соответствующая конечно-разностная система для этой схемы имеет вид:

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\tau} = \frac{u_{i-1,j+1} + u_{i+1,j+1}}{2h^2} + \frac{u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{2h^2} + f_{i,j+1/2}, \quad (5)$$

где

$$f_{i,j+1/2} = f(ih, (j+1/2)\tau).$$

Эта схема является неявной. Для решения поставленной нелинейной задачи предлагается использовать модификацию интегро-интерполяционного метода дискретизации дифференциальной задачи. Метод заключается в интегрировании основного уравнения по элементарной ячейке сетки $\Pi_{i,j}$ и использовании тех или иных квадратурных формул интерполяционного типа. Результирующая конечно-разностная система уравнений имеет порядок точности $O(\tau+h_2)$.

Рассмотрим приведенное уравнение нелинейной теплопроводности общего вида:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + f(u)$$

Проинтегрируем обе части данного уравнения по элементарной ячейке сетки, т.е. по малому прямоугольнику $\Pi_{i,j}$ имеет вид:

$$\iint_{\Pi_{ij}} \frac{\partial u}{\partial t} dxdt = \iint_{\Pi_{ij}} \frac{\partial}{\partial x} \left(k(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) dxdt + \iint_{\Pi_{ij}} f(u) dxdt \quad (6)$$

Распишем подробно интеграл в левой части:

$$\begin{aligned} \iint_{\Pi_{ij}} \frac{\partial u}{\partial t} dxdt &= \int_{t_j}^{t_{j+1}} dt \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{\partial u}{\partial t} dx = \int_{t_j}^{t_{j+1}} dt \frac{\partial}{\partial t} \int_{x_i}^{x_{i+1}} u dx = \int_{t_j}^{t_{j+1}} \frac{\partial}{\partial t} (u(x_i, t)) h + \tau o(h^2) = hu(x_i, t) \Big|_{t_j}^{t_{j+1}} + \tau o(h^2) = \\ &= h(u(x_i, t_{j+1}) - u(x_i, t_j)) + \tau o(h^2) = h(u_{i,j+1} - u_{i,j}) + \tau o(h^2) \end{aligned} \quad (7)$$

При вычислении интеграла от правой части, т.е. от функции $f(u)$, используем формулу трапеций при интегрировании по x и формулу прямоугольника при интегрировании по t . В результате получаем:

$$\iint_{\Pi_{ij}} f(u) dx dt = \int_{t_j}^{t_{j+1}} dt \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(u) dx = \tau h \hat{f}_{i,j} + \tau o(h^3) \quad (8)$$

где

$$\hat{f}_{i,j} = \frac{1}{2} (f(u_{i,j}) + f(u_{i+1,j}))$$

$$\int_{t_j}^{t_{j+1}} dt \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{\partial}{\partial x} (k(u) \frac{\partial u}{\partial x}) dx = \frac{\tau}{h} k_1 (u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}) + 2 \frac{\tau}{h} k_2 (u_{i+1,j+1} - u_{i,j+1}) + \tau o(h^2) + o(\tau^2) \quad (9)$$

где

$$\hat{f}_{i,j} = \frac{1}{2} (f(u_{i,j}) + f(u_{i+1,j})), k_1 = \frac{k_{i,j} + k_{i+1,j}}{2}, k_2 = \frac{k_{i+1,j} - k_{i,j}}{2}, k_{i,j} = k(u_{i,j}),$$

а устойчивость полученной схемы исследуется методом “замороженных коэффициентов”.

Отбрасывая бесконечно малые и, заменяя точное сеточное решение $u_{m,j}$ на приближенное $y_{m,j}$, получим окончательно следующую неявную конечно-разностную схему:

$$y_{m,j+1} - y_{m,j} = \mathcal{Y} [k_1 (y_{m+1,j+1} - 2y_{m,j+1} + y_{m-1,j+1}) + 2k_2 (y_{m+1,j+1} - y_{i,j+1}) + \tau \bar{f}_{m,j}] \quad (10)$$

Для исследования устойчивости по правой части ищутся частные решения в виде гармоник произвольной частоты $y_{m,j} = \lambda_j e^{im\varphi}$. При исследовании модуля λ как функции от φ , k_1 , k_2 коэффициенты k_1 и k_2 “размораживаются” и показывается, что $|\lambda| < 1$ при любых k_1 и k_2 .

Далее полученная конечно-разностная трехдиагональная система приводится к стандартному виду, показанному в выражении (11), и решается методом прогонки по временным слоям. Рассмотрим первую краевую задачу для приведенного нелинейного уравнения со степенными зависимостями основных характеристик:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} (k(u) \frac{\partial u}{\partial x}) + qf(u) \\ u(x, 0) = \phi(x), \\ u(0, t) = u_0, \\ u(1, t) = u_1, \\ x \in [0, 1], \end{cases} \quad (11)$$

Рассмотрим следующий случай физически реализуемой степенной зависимости коэффициента теплопроводности от температуры:

$$k(u) = \begin{cases} 1 + u^\sigma, & u \geq 0, \\ 1, & u < 0; \quad \sigma \geq 1. \end{cases}$$

Для функции источника (стока) также примем степенную зависимость от температуры: $f(u) = qu^\beta$; $\beta \geq 1$, где $q = 1$ соответствует источнику, а $q = -1$ – стоку. Наличие источников подобного типа чаще всего определяется разогревом проводящего материала при прохождении токов высокой частоты, а наличие стоков – эндотермическими (химическими) реакциями в материале, идущими с поглощением тепла.

Учитывая полученную выше аппроксимацию уравнения (11) на двумерной сетке $\omega_{h,\tau} = \{(x_i, t_j) \mid x_i = ih, \quad i = 0, 1, \dots, M; \quad h = \frac{1}{M}; \quad t_j = j\tau, \quad j = 0, 1, \dots, N; \quad \tau = 1/N, \quad \tau \leq h\}$ в форме неявной схемы (10), получаем конечно-разностную систему с трехдиагональной матрицей. Преобразуем (10) к стандартному виду:

$$\begin{cases} -a_{i,j} y_{i-1,j+1} + c_{i,j} y_{i,j+1} - b_{i,j} y_{i+1,j+1} = \bar{f}_{i,j}, \\ i = 1, 2, \dots, M - 1; \\ y_{0,j} = u_0, \quad j = 0, 1, \dots, N; \\ y_{i,N} = u_1, \quad i = 0, 1, \dots, M; \\ y_{i,0} = \phi_i = \phi(ih), \quad i = 0, 1, \dots, M; \end{cases} \quad (12)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{i,j} = \gamma k_1, \quad b_{i,j} = \gamma(k_1 + 2k_2), \\ c_{i,j} = 1 + 2\gamma(k_1 + k_2), \quad \bar{f}_{i,j} = y_{i,j} + \frac{\tau}{2}(f(y_{i,j}) + f(y_{i+1,j})). \end{array} \right.$$

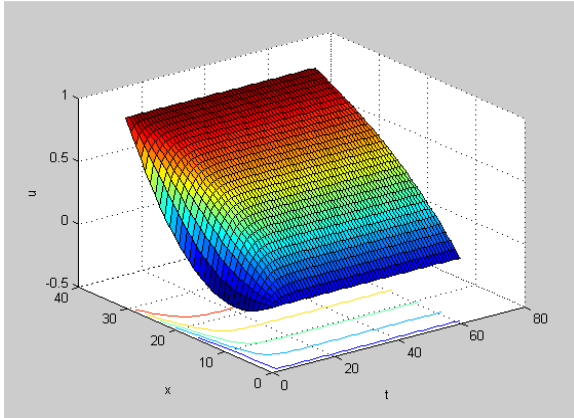
Для успешной реализации метода прогонки необходимо выполнение условия устойчивости:

$$|a_{i,j}| + |b_{i,j}| \leq |c_{i,j}|. \quad (13)$$

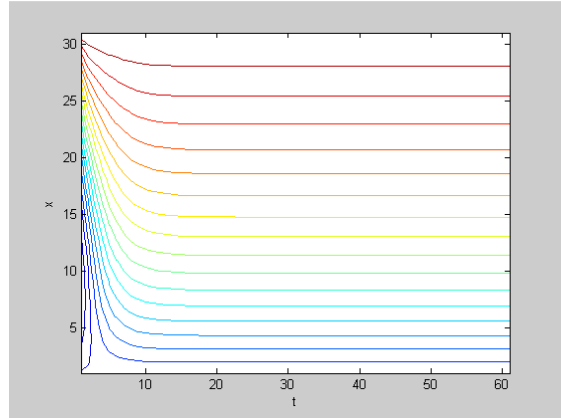
5. Вычислительный эксперимент и его результаты

На рисунках 4 и 5 показаны результаты вычислительного эксперимента, реализованного в пакете MATLAB с помощью специально разработанных программ *nonlinearheat* и *nonlinearheat1*. Первая из них предназначена для решения первой краевой задачи методом прогонки, вторая - для решения краевой задачи с условием второго рода на левом конце отрезка (условием отсутствия теплообмена через левый торец стержня). Наиболее интересные результаты получаются для второго случая.

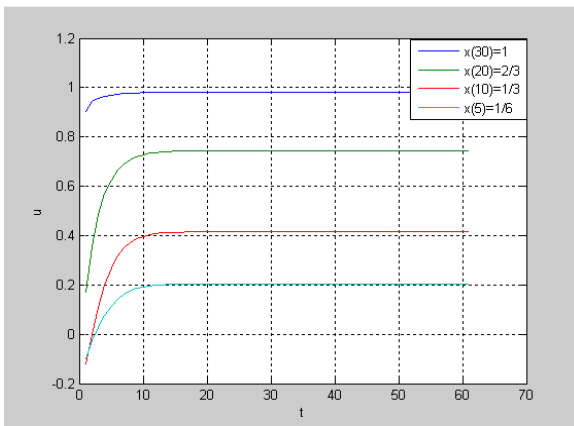
В качестве начального распределения температуры при $t = 0$ были рассмотрены две функции: первая из них имеет участок отрицательных температур на половине длины стержня, вторая – имеет квадратичную зависимость начальной температуры от 0 до u_1 .



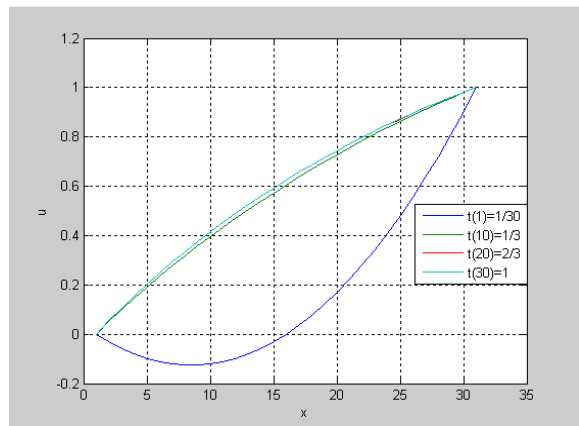
графический образ матрицы u_{ij}



линии уровней матрицы u_{ij}



зависимости температуры от t при фиксированном x



зависимости температуры от x при фиксированном t

Рисунок 4 - Графики срезов матрицы $Y=[u_{ij}]$:

$sig = 1; beta = 1; lev = 2; del = 1.0; m = 30; n = 90$

В программах предусмотрена ситуация, когда при вводе слишком больших значений u_l (температуры на правом конце стержня) нарушается условие устойчивости метода прогонки. В этом случае для преодоления неустойчивости необходимо уменьшать шаг τ по оси времени, что автоматически приводит к уменьшению промежутка существования решения по времени.

В программе MATLAB входными параметрами являются:

m - число интервалов равномерной сетки по оси ox ;

n - число интервалов равномерной сетки по оси ou (оси времени);

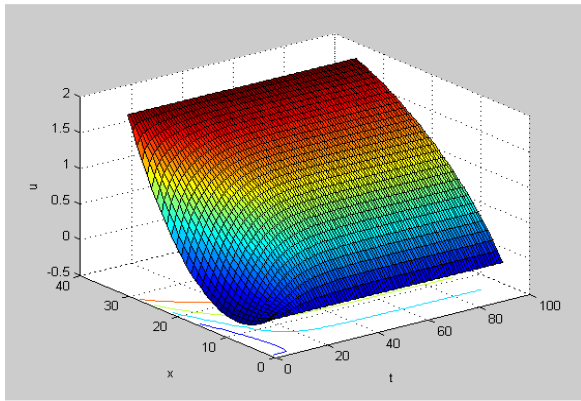
sig - определяет степенную зависимость коэффициента теплопроводности;

$beta$ - определяет степенную зависимость функции источника (стока);

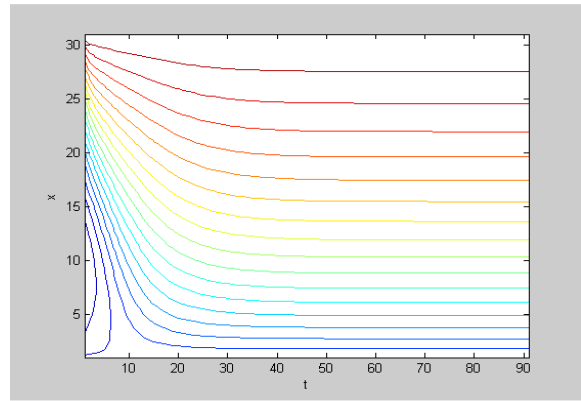
del - коэффициент уравнения шага τ по оси времени;

$znak = 1$, если включено источник и $znak = -1$, если включен сток;

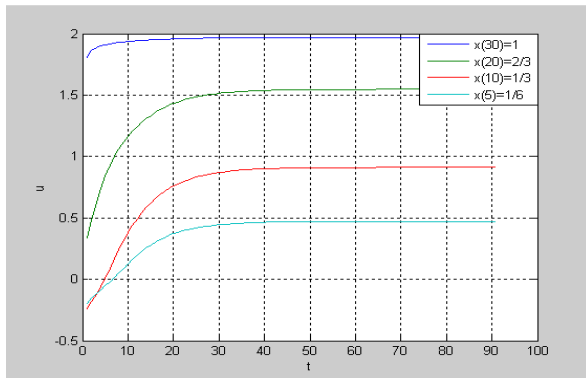
lev - определяет температуру, заданную на правом конце стержня.



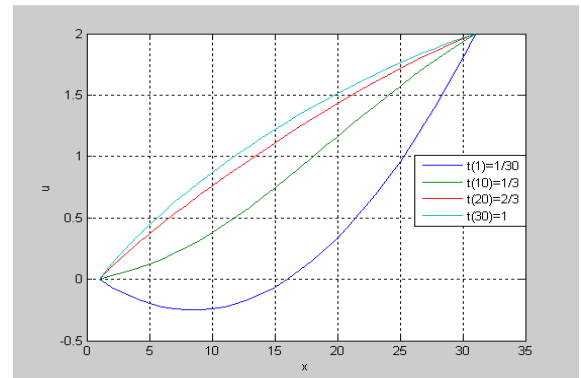
графический образ матрицы U_{ij} ;



линии уровней матрицы U_{ij} ;



зависимости температуры от t при фиксированном x



зависимости температуры от x при фиксированном t

Рисунок 5 - Графики срезов матрицы $Y=[u_{ij}]$:

$$sig = 1; beta = 2; lev = 2; del = 0.2; m = 30; n = 90$$

6. Заключение

Анализ полученных результатов раскрывает следующие особенности поведения решения:

1) В целом, при правильном выборе отношения шагов сетки $\tau/h \leq 1$, графики демонстрируют непрерывную зависимость решения от параметров σ , β и начальных данных.

2) При увеличении параметра β в диапазоне (2 - 3) наблюдается увеличение скорости роста температуры от времени, приводящее при некоторых значениях $lev > lev_{кр}$ к срыву прогонки вследствие появления неустойчивости. При этом, чем больше β , тем меньше соответствующее значение $lev_{кр}$ и тем меньшее значение шага τ следует задавать для преодоления неустойчивости, если фиксируется число узлов n по оси времени.

Например, из рисунков 4 и 5 видно, что при $\sigma = 1$, $\varphi(x) = pol1(x)$ шаг τ по оси времени пришлось взять в пять раз меньшие для $\beta = 2$, чем для $\beta = 1$.

Аналогичная ситуация наблюдается и при другом наборе параметров для фиксированных значений σ , lev и $\varphi(x)$.

Список информационных источников

- [1] Пилипенко В.А. Быстрые термообработки в технологии СБИС. Мн.: Изд. центр БГУ. – 2004. - С. 24.
- [2] Ни Зо. Использование нечетких регуляторов в системах управления технологическими процессами при производстве полупроводниковых микросхем // Автоматизация и управление в технических системах. – 2012. – № 2. – С. 22-28. URL: auts.esrae.ru/2-18 (дата обращения: 22.12.2013).
- [3] Ни Зо, Николаев А.Б. моделирование полупроводниковых микросхем с использованием термоэлектрического способа // Автоматизация и управление в технических системах. – 2012. – № 2. – С. 28-38. URL: auts.esrae.ru/2-19 (дата обращения: 22.12.2013).
- [4] Николаев А.Б., Ни Зо. Исследование системы автоматического управления термоэлектрическим объектом // Автоматизация и управление в технических системах. – 2013. – № 4.1. - С. 113-120. DOI: [10.12731/2306-1561-2013-4-18](https://doi.org/10.12731/2306-1561-2013-4-18).
- [5] Остроух А.В. Основы построения систем искусственного интеллекта для промышленных и строительных предприятий: монография / А.В. Остроух. – М.: ООО «Техполиграфцентр», 2008. - 280 с. - ISBN 978-5-94385-033-2.
- [6] Остроух А.В. Информационные технологии в научной и производственной деятельности / [ред. А.В. Остроух] - М: ООО "Техполиграфцентр", 2011. - 240 с. - ISBN 978-5-94385-056-1.
- [7] Остроух А.В. Ввод и обработка цифровой информации: учебник для нач. проф. образования / А.В. Остроух. – М.: Издательский центр «Академия», 2012. – 288 с. - ISBN 978-5-7695-9457-1.
- [8] Остроух А.В. Исследование начального периода моделирования на точность среднеинтегральной оценки имитационных моделей / А.В. Остроух, А.А. Солнцев, Н.В. Солдатов, К.А. Новицкий, П.С. Якунин // Вестник МАДИ. – 2010. - Вып. 2(21). - С. 61-65.
- [9] Остроух А.В. Системы искусственного интеллекта в промышленности, робототехнике и транспортном комплексе: монография / А.В. Остроух - Красноярск: Научно-инновационный центр, 2013. – 326 с. - ISBN 978-5-906314-10-9.
- [10] Nickolayev A.V., Ostroukh A.V., Zamytskikh P.V., Gubanov A.I. Automated system of oil quantity and quality indexes estimation // EUROPEAN JOURNAL OF NATURAL HISTORY. – 2011. – № 3 – С. 96-98.
- [11] Остроух А.В., Тянь Юань. Современные методы и подходы к построению систем управления производственно-технологической деятельностью промышленных предприятий // Автоматизация и управление в технических системах. – 2013. – № 1(3). – С. 29-31.
- [12] Остроух А.В. Интеграция компонентов системы мониторинга / А.В. Остроух, Юань Тянь // Молодой ученый. – Чита: ООО «Издательство Молодой ученый», 2013. - №10. - С. 182-185.
- [13] Остроух А.В., Николаев А.Б., Сальный А.Г., Кухаренко В.Н. Общие принципы построения SCADA-систем // Автоматизация и управление в технических системах. – 2013. – № 2(4). – С. 8-12.