

Titre: Optimisation du rendement thermoélectrique de modules
générateurs à pattes segmentées
Title: Optimisation du rendement thermoélectrique de modules
générateurs à pattes segmentées

Auteur: Lurdez Prieto Vargas
Author:

Date: 2015

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Prieto Vargas, L. (2015). Optimisation du rendement thermoélectrique de
modules génératrices à pattes segmentées [Mémoire de maîtrise, École
Polytechnique de Montréal]. PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/1901/>
Citation:

Document en libre accès dans PolyPublie Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/1901/>
PolyPublie URL:

Directeurs de recherche: Sylvain Turenne, & Rémo A. Masut
Advisors:

Programme: Génie physique
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

OPTIMISATION DU RENDEMENT THERMOÉLECTRIQUE DE MODULES
GÉNÉRATEURS À PATTES SEGMENTÉES

LURDEZ PRIETO VARGAS

DÉPARTEMENT DE GÉNIE PHYSIQUE

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE PHYSIQUE)

AOÛT 2015

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé:

OPTIMISATION DU RENDEMENT THERMOÉLECTRIQUE DE MODULES
GÉNÉRATEURS À PATTES SEGMENTÉES

présenté par : PRIETO VARGAS Lurdez

en vue de l'obtention du diplôme de : Maîtrise ès sciences appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

M. KLEMBERG-SAPIEHA Jolanta-Ewa, Doct., présidente

M. MASUT Remo A., Ph. D., membre et directeur de recherche

M. TURENNE Sylvain, Ph. D., membre et codirecteur de recherche

M. ROCHEFORT Alain, Doct., membre

DÉDICACE

À Mauricio, Sébastien y Louisa

Vous êtes toute ma vie.

REMERCIEMENTS

Ce travail a été réalisé au sein du Département de génie mécanique de l'École Polytechnique de Montréal ainsi qu'au laboratoire de thermoélectricité.

Ma gratitude et ma reconnaissance s'adressent tout d'abord à mon directeur et à mon codirecteur de recherche, qui m'ont confié ce projet. Spécialement, je veux vivement remercier Monsieur Sylvain Turenne pour l'encadrement qu'il m'a offert, pour sa disponibilité et surtout pour son soutien et ses précieux conseils qui m'ont permis de finaliser ma maîtrise. Je voudrais également remercier tout le personnel de Polytechnique ainsi que tous les professeurs qui ont contribué d'une façon ou d'une autre avec leur intérêt pour la recherche scientifique à accroître mes connaissances scientifiques. Je remercie particulièrement le professeur Aurelian Vadean qui m'a aidé à avec mes questions sur le logiciel utilisé ; ses idées et ses conseils ont contribué à enrichir mon travail.

Je tiens à remercier également Monsieur Dimitri Vasilevskiy qui m'a encadré et accepté au sein du laboratoire de thermoélectricité.

Je remercie également toute ma famille en pensant plus particulièrement à ma Mère pour son aide inestimable, à ma sœur et mes amis pour leurs encouragements tout au long de l'écriture de mon mémoire.

Enfin, je tiens à remercier tout particulièrement mon mari pour son écoute, sa collaboration et sa patience.

RÉSUMÉ

L'amélioration de la performance thermoélectrique des modules générateurs thermoélectriques a fait l'objet de plusieurs études. Dans les dernières décennies, la plupart d'entre elles ont été faites à l'aide des éléments finis. Les simulations par éléments finis prennent à chaque jour une place plus grande dans la recherche. Des logiciels comme ANSYS Workbench fournissent des outils spécifiques pour chaque type d'analyses en plus d'un environnement convivial pour les nouveaux utilisateurs. Pour cette raison, dans ce mémoire où on s'est intéressé à l'effet de la segmentation des pattes dans la performance thermoélectrique du module, ainsi qu'aux propriétés mécaniques en générale et en particulier sur la résistance mécanique des modules, cette méthode d'analyse a été choisie.

Le but du projet est de développer la simulation du comportement thermoélectrique et thermomécanique d'un module générateur thermoélectrique (MGT) à pattes segmentées afin d'établir et d'optimiser les paramètres permettant une performance supérieure dans la récupération de la chaleur perdue dans certains procédés industriels. De manière à bien atteindre cet objectif, on a construit trois géométries différentes de modules thermoélectriques afin de bien évaluer l'influence de la segmentation dans la performance des MGT ; deux modules standards, un module segmenté symétriquement et un modèle segmenté asymétriquement. Toutes les géométries ont été inspirées d'un MGT typique de $40 \times 40 \text{ mm}^2$ d'aire avec des pattes de 1.5 mm de longueur et $1.4 \times 1.4 \text{ mm}^2$ de section. Des alliages à base de tellure de bismuth produits par extrusion à chaud à l'École Polytechnique ont été utilisés comme matériaux pour tous les modèles développés.

Pour tous les modèles, plusieurs analyses ont été faites et comparées pour arriver à établir la viabilité du modèle proposé. Finalement, le modèle du MGT segmenté de façon asymétrique qui a été proposé a montré un gain en puissance de 9% par rapport au modèle simulé sans segmentation et a montré qu'il résiste aux contraintes mécaniques induites par le gradient de température. L'effet de la segmentation sur la performance des modules a été confirmé et l'effet de la déformation plastique de l'alliage de soudure sur la résistance mécanique des modules a été observé dans les résultats de la simulation.

Le modèle numérique du MGT proposé et développé dans ce travail est un outil polyvalent qui permet d'introduire différentes variations dans la géométrie et l'opération des modules pour vérifier l'influence d'autres facteurs tels que les matériaux, la plage de température, la forme de la section de pattes et les dimensions. Cet outil est bien adapté pour l'étude de la performance thermoélectrique et thermomécanique des modules, afin de poursuivre des travaux de recherche dans le futur.

ABSTRACT

The performance improvement of thermoelectric generators (TEG) modules has been the subject of several studies, and in recent years most of them were made using a finite elements approach due to its reliability. For instance, software like ANSYS Workbench provides not only specific tools for each type of analysis, but also a pleasant environment for new users. For this reason in this work, where we are interested on how leg-segmentation affects the thermoelectric performance of the module as well as its general and particular mechanical properties and its strength, this method of analysis has been chosen.

The project goal is to develop the simulation of the thermoelectric, and thermomechanical behaviour of a segmented-leg TEG module to establish, and to optimize the settings for enhanced performance in the recovery of waste-heat from industrial processes. In order to achieve this we built three different geometries of thermoelectric modules to assess the influence of the segmentation on module performance. A total of four modules were used for this purpose; two of them were standard modules, and the other modules were symmetrically and asymmetrically segmented. All the geometries have been created taking into account the dimensions of a typical TEG ($40 \times 40 \text{ mm}^2$, legs of 1.5 mm length and $1.4 \times 1.4 \text{ mm}^2$ section.) Moreover, bismuth telluride alloys produced by hot extrusion, carried out at the École Polytechnique, were used as materials for all the models developed.

Several analyses were carried out and models compared to determine the viability of the proposed model. Finally, the asymmetrically segmented TEG model has shown a power gain up to 9% with respect to the TEG without segmentation, and is capable to withstand the mechanical stresses induced by the temperature gradient. The effect of segmentation on the performance of the modules has been confirmed and the effect of plastic deformation of solder alloys on the strength of the modules has been observed in the results of the simulation.

The model TEG asymmetrically segmented, proposed and developed in this work, is a versatile tool to introduce different variations in the model to verify the influence of other factors such as materials, temperature gradients, leg geometries and dimensions. This work has contributed a well-adapted tool to further study the thermomechanical and thermoelectric performance of TEG modules.

TABLE DES MATIÈRES

| | |
|--|------|
| DÉDICACE | III |
| REMERCIEMENTS | IV |
| RÉSUMÉ | V |
| ABSTRACT | VII |
| TABLE DES MATIÈRES | VIII |
| LISTE DES TABLEAUX | X |
| LISTE DES FIGURES | XI |
| LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS | XV |
| CHAPITRE 1 INTRODUCTION | 1 |
| CHAPITRE 2 CONCEPTS GÉNÉRAUX ET REVISION DE LA LITTÉRATURE..... | 5 |
| 2.1 Dispositifs thermoélectriques..... | 5 |
| 2.1.1 Thermocouples..... | 5 |
| 2.1.2 Modules générateurs thermoélectriques | 8 |
| 2.1.3 Modules réfrigérateurs | 9 |
| 2.1.4 Modules à deux étage..... | 9 |
| 2.2 Concepts généraux de la thermoélectricité | 10 |
| 2.2.1 Les effets thermoélectriques | 10 |
| 2.3 La figure de mérite..... | 13 |
| 2.4 Les matériaux thermoélectriques | 14 |
| 2.5 Simulations numériques de dispositifs thermoélectriques | 15 |
| 2.5.1 Éléments finis..... | 15 |
| 2.5.2 Équations qui gouvernent la thermoélectricité | 16 |
| 2.6 Revue de littérature sur les simulations par éléments finis..... | 19 |

| | | |
|-------|---|-----------|
| 2.6.1 | La méthode des éléments finis | 19 |
| 2.6.2 | Performance thermoélectrique | 20 |
| 2.6.3 | Résistance thermomécanique..... | 24 |
| | CHAPITRE 3 DESIGN ET SIMULATION DU MODÈLE..... | 27 |
| 3.1 | Conception du modèle | 27 |
| 3.1.1 | Détails techniques | 27 |
| 3.1.2 | Modèle en éléments finis | 32 |
| 3.1.3 | Modèle proposé..... | 33 |
| 3.2 | Choix des matériaux | 35 |
| 3.3 | Résolution et optimisation | 39 |
| 3.3.1 | Analyse thermoélectrique (A)..... | 40 |
| 3.3.2 | Analyse thermomécanique (B) | 41 |
| 3.3.3 | Optimisation (C) | 42 |
| | CHAPITRE 4 RÉSULTATS ET DISCUSSION | 45 |
| 4.1 | Résultats de la simulation | 45 |
| 4.1.1 | Analyse de la performance thermoélectrique | 45 |
| 4.1.2 | Analyse du comportement thermomécanique..... | 56 |
| | CHAPITRE 5 CONCLUSIONS ET RECOMMANDATIONS..... | 62 |
| 5.1 | Outil développé..... | 62 |
| 5.2 | Limitations | 63 |
| | BIBLIOGRAPHIE..... | 65 |

LISTE DES TABLEAUX

| | |
|---|----|
| Tableau 3-1: Dimensions des éléments dans le premier module | 28 |
| Tableau 3-2: Comparaison entre les données du module de Kryotherm et notre module standard pour une plage de température de 170°C avec $T_f = 30^\circ\text{C}$. R_{ac} – résistance électrique dans le conditions d'opération; R_t – résistance thermique; V_{oc} – tension a circuit ouvert; I_{cc} – courant en cc; V – tension maximale; P – puissance maximale; I – courant à puissance maximale; η – efficacité [30]. | 29 |
| Tableau 3-3: Composition des alliages utilisés pour le projet | 36 |
| Tableau 3-4 : Propriétés des matériaux [4] | 39 |
| Tableau 4-1 : Résultats de l'optimisation du module SS avec $\Delta T = 150^\circ\text{C}$ à partir de la température de la pièce et $I_0 = 0 \text{ A}$ et $I_{max} = 3.5 \text{ A}$ | 49 |
| Tableau 4-2 : Résultats de l'optimisation du module ASS pour une plage de température de 150°C à partir de la température de la pièce et une plage de courant de 3.5 A avec $I_0 = 0.53$ | |

LISTE DES FIGURES

| | |
|--|----|
| Figure 1-1: Les thermocouples sont de simples circuits électriques qui peuvent être utilisés pour (a) générer la puissance électrique ou (b) réfrigérer. (c) Les dispositifs thermoélectriques peuvent contenir des centaines de thermocouples [2]..... | 1 |
| Figure 2-1: Schéma d'un couple TE et du circuit électrique-thermique qui le parcourt. | 5 |
| Figure 2-2: Couple thermoélectrique modélisé..... | 7 |
| Figure 2-3: Module thermoélectrique; en rouge la plaque céramique supérieure, en bleu la céramique inférieur et en gris les conducteurs de cuivre [8]. | 8 |
| Figure 2-4: Module thermoélectrique segmenté, la patte P a été segmentée en trois étages afin de combiner trois matériaux thermoélectriques différents tandis que la patte N a été segmentée en deux étages [9]. | 9 |
| Figure 2-5: Schéma d'un thermocouple [14]...... | 11 |
| Figure 2-6: Figure de mérite pour des matériaux de type P [16]..... | 14 |
| Figure 2-7: Figure de mérite pour des matériaux de type N [16]. | 15 |
| Figure 2-8: Éléments de volume (Solides 3D) [24]...... | 18 |
| Figure 2-9: Modèle de thermocouple modélisé en ANSYS [12]..... | 21 |
| Figure 2-10: Modèles de thermocouples modélisés par ANSYS [11]. À gauche, le modèle à un seul étage où les deux pattes sont composées d'un alliage à base de skuttérudite et à droite, le modèle à deux étages dont les matériaux sont décrits dans la figure..... | 22 |
| Figure 2-11: Modèle des MGT par Erturun et coll. [26] en ANSYS. Toutes les dimensions montrées sont en millimètres. | 23 |
| Figure 2-12: Modèle des MGT en ANSYS par Jia et coll. [13]. | 24 |
| Figure 3-1: Dimensions générales du premier modèle montrées sur une portion du module; la plaque supérieure de céramique et un conducteur de cuivre ont été retirés pour faciliter la visualisation. | 27 |
| Figure 3-2: Courbe de performance thermoélectrique pour le premier module, $T_f = 30^\circ\text{C}$, $T_c = 200^\circ\text{C}$ | 28 |

| | |
|--|----|
| Figure 3-3: Schéma de la relation entre le premier modèle (127 thermocouples) et le module standard (31.5 thermocouples). Les flèches en rouge indiquent les couplages électriques qui ont été ajoutés pour fermer le circuit. Les flèches en bleu indiquent l'entrée de courant (flèche à droite) et la mise à terre (flèche à gauche). | 30 |
| Figure 3-4: Conditions de couplages A-D et connexions à l'entrée et à la sortie de courant créées sur le quart de module. En bleu les pattes de type P et en brun les pattes de type N. Les plaques céramiques ont été masquées pour faciliter la visualisation..... | 31 |
| Figure 3-5: Illustration du pré-maillage et du maillage hexaédrique appliqués au modèle. Une taille de 0.18 mm a été choisie pour les thermo-éléments, les conducteurs de cuivre et les soudures, tandis qu'une taille de 0.7 mm a été choisie pour les plaques céramiques pour avoir un total de 497 000 nœuds dans le modèle..... | 33 |
| Figure 3-6: Création du module segmenté symétrique. En gris les deux plans de coupe utilisés pour segmenter les pattes à deux points différents de façon à simuler une couche de soudure entre les deux segments de pattes. Chaque couleur indique un matériau différent. | 34 |
| Figure 3-7: Représentation de la géométrie et les matériaux constituant le modèle du module segmenté asymétrique (ASS)..... | 35 |
| Figure 3-8: Figure de mérite pour une sélection d'échantillons de type P ayant le maximum de performance TE dans la plage de températures entre 50°C et 170°C. Dans la figure les points correspondent à des valeurs expérimentales tandis que les lignes correspondent à des courbes de tendance. | 36 |
| Figure 3-9: Figure de mérite pour une sélection d'échantillons de type N ayant le maximum de performance TE dans la plage de températures entre 50°C et 170°C..... | 37 |
| Figure 3-10: Figure de mérite pour les matériaux choisis, construite à partir de donnés de polynômes tirés des mesures expérimentales. | 38 |
| Figure 3-11: Modules d'analyse du projet, combinés dans ANSYS Workbench..... | 40 |
| Figure 3-12: Plan d'expériences avec 15 points de conception. À gauche, il est possible de voir les paramètres d'entrée et de sortie de notre projet. Les variables choisies pour l'optimisation sont cochées, à gauche en bas le nombre de points de conception est montré. | |

| | |
|---|----|
| À droite, les colonnes en blanc montrent les valeurs d'entrée (les variables) et les colonnes en gris montrent les valeurs de sortie une fois que le calcul est terminé..... | 43 |
| Figure 4-1: Comparaison de l'efficacité des modules standards. $\Delta T = 150^\circ\text{C}$ avec $T_f = 20^\circ\text{C}$, $I_0 = 0 \text{ A}$ et $I_{max} = 3.5 \text{ A}$ | 46 |
| Figure 4-2: Comparaison de la puissance de sortie des modules standards avec $\Delta T = 150^\circ\text{C}$ avec $T_f = 20^\circ\text{C}$ et $I_0 = 0 \text{ A}$ et $I_{max} = 3.5 \text{ A}$ | 47 |
| Figure 4-3 : Comparaison de l'efficacité en fonction du courant pour les trois modules thermoélectriques simulés, $\Delta T = 150^\circ\text{C}$ avec $T_f = 20^\circ\text{C}$, $I_0 = 0 \text{ A}$ et $I_{max} = 3.5 \text{ A}$. Longueur du premier segment de pattes pour le module SS, 0.7 mm. Les intervalles de courant et d'efficacité ont été réduits dans le graphique pour mieux mettre en évidence la différence entre les performances des trois modules..... | 50 |
| Figure 4-4 : Comparaison de la puissance thermoélectrique générée en fonction du courant pour les trois modules simulés, $\Delta T = 150^\circ\text{C}$ avec $T_f = 20^\circ\text{C}$, $I_0 = 0 \text{ A}$ et $I_{max} = 3.5 \text{ A}$ | 50 |
| Figure 4-5 : Distribution de température dans deux pattes du module SS mis en opération avec $T_f = 20^\circ\text{C}$ et $T_c = 170^\circ\text{C}$. Segmentation avec une longueur de 0.7 mm du côté froid..... | 51 |
| Figure 4-6 : Puissance de sortie (W) en fonction de la longueur du premier étage de chaque type de patte pour un $\Delta T = 150^\circ\text{C}$ avec $T_f = 20^\circ\text{C}$, et une intensité de courant de 1.7 A. L'échelle de couleur donne la valeur de la puissance en W..... | 54 |
| Figure 4-7 : Comparaison entre l'efficacité des quatre modèles créés, $\Delta T = 150^\circ\text{C}$ à partir de la température de la pièce, $I_0 = 0 \text{ A}$ et $I_{max} = 3.5 \text{ A}$ | 55 |
| Figure 4-8 : Comparaison de la puissance générée des quatre modules simulés, $\Delta T = 150^\circ\text{C}$, avec $T_f = 20^\circ\text{C}$, $I_0 = 0 \text{ A}$ et $I_{max} = 3.5 \text{ A}$ | 55 |
| Figure 4-9 : Contrainte de Von Mises sur les pattes quand le module ASS est soumis à une $\Delta T = 150^\circ\text{C}$ avec $T_f = 20^\circ\text{C}$ et à un courant $I = 1.69 \text{ A}$. L'échelle de couleur donne le niveau de contrainte en MPa..... | 57 |
| Figure 4-10 : Distribution de contrainte de Von Mises (MPa) dans le cuivre quand il est soumis à une $\Delta T = 150^\circ\text{C}$ avec $T_f = 20^\circ\text{C}$ et un courant $I = 1.69 \text{ A}$. L'échelle de couleur donne le niveau de contrainte en MPa..... | 58 |

| | |
|--|----|
| Figure 4-11 : Contrainte de Von Mises sur la soudure (côté chaud) quand il est soumis à une $\Delta T = 150^\circ\text{C}$ à partir de la température de la pièce et un courant $I = 1.69 \text{ A}$. L'échelle de couleur donne le niveau de contrainte en MPa..... | 58 |
| Figure 4-12: Contrainte de Von Mises sur la soudure à la jonction entre les deux segments de pattes pour un quart de module ASS. Le premier étage (côté froid) de la patte N à une longueur de 0.4 mm et le premier étage (côté froid) de la patte P à une longueur de 0.8 mm. Le module est soumis à une différence de température entre 20°C et 170°C et un courant de 1.69 A à travers le module. L'échelle de couleur donne le niveau de contrainte en MPa.... | 59 |
| Figure 4-13 : Déformation du module TB-127-1.4-1.5 avec $\Delta T = 100^\circ\text{C}$ par [26], (a) intérieur du profilomètre, (b) direction de la sonde et (c) mesure de la déformation ΔZ | 60 |
| Figure 4-14 : Déformation du quart de module ASS simulé, quand il est soumis à une $\Delta T = 150^\circ\text{C}$ avec $T_f = 20^\circ\text{C}$ et à un courant $I = 1.69 \text{ A}$. La flexion du module a été exagérée pour faciliter la visualisation. L'échelle de couleur donne le niveau de déformation en mm..... | 61 |

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

| | |
|-------|--|
| MGT | Module générateur thermoélectrique |
| TEG | Thermoelectric generator |
| TE | Thermoélectrique |
| MEF | Méthode d'éléments finis |
| MOCVD | Metal Organic Chemical Vapor Deposition |
| FGTM | Functionally graded thermoelectric materials |

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

Un matériau thermoélectrique est capable de transformer directement la chaleur en électricité s'il est soumis à une différence de température entre ses extrémités (cas générateur), ou de déplacer la chaleur d'un point à l'autre s'il est traversé par un courant électrique (cas réfrigérateur), tel qu'illustré à la figure 1-1. Une de ces capacités est utilisée dans les modules générateurs thermoélectriques (MGT) pour générer de la puissance électrique. Dans un MGT, on connecte deux types de matériaux thermoélectriques, normalement semi-conducteurs, qui sont soumis à une différence de température entre leurs extrémités en utilisant, par exemple, d'un côté la température de la pièce et de l'autre côté de la chaleur produite dans des procédés industriels. De cette façon, on profite de l'énergie thermique (chaleur) produite dans des procédés industriels, et normalement inutilisée, pour produire l'énergie électrique. Dû à cette avantage, les dispositifs thermoélectriques peuvent être trouvés dans une grande gamme d'applications [1].

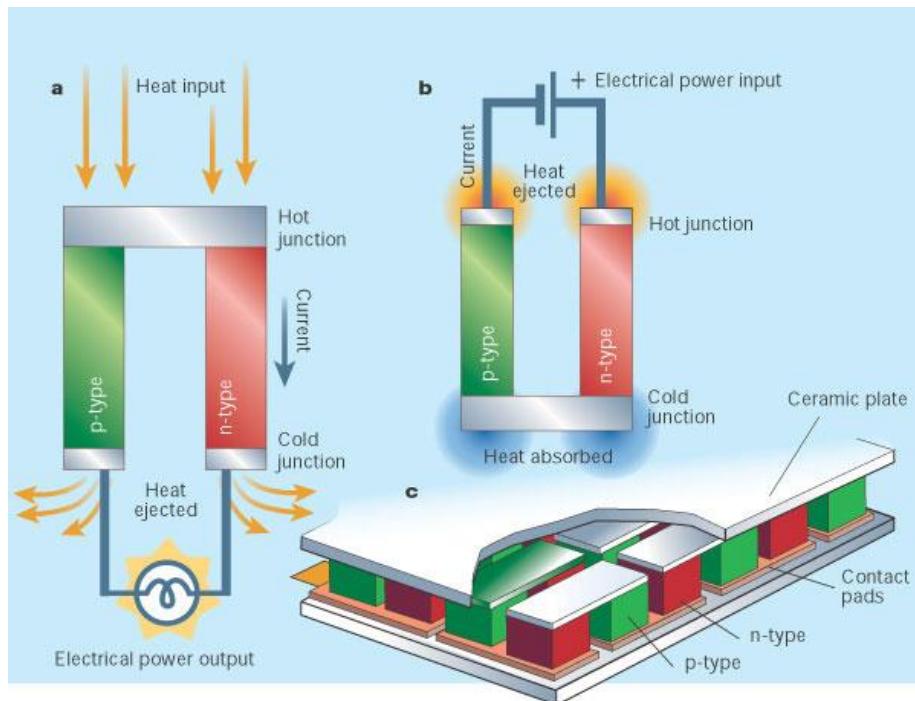


Figure 1-1: Les thermocouples sont de simples circuits électriques qui peuvent être utilisés pour (a) générer la puissance électrique ou (b) réfrigérer. (c) Les dispositifs thermoélectriques peuvent contenir des centaines de thermocouples [2].

En général, un module générateur est un dispositif thermoélectrique constitué de pattes de matériaux semi-conducteurs (type P et type N) qui sont connectées électriquement en série et

thermiquement en parallèle et qui sont exposées à une différence de température pour produire de l'électricité. La performance de ce type de module dépend de la performance des matériaux semi-conducteurs utilisés dans les pattes et de la différence de température imposée, ainsi que d'autres facteurs moins importants reliés à la géométrie.

Il est possible alors de croire que par la sélection de matériaux performants et d'une large plage de température d'opération, il soit possible d'avoir des MGT performants. Néanmoins, ces deux facteurs ne sont pas reliés par une relation aussi simple et la variation d'un d'entre eux peut affecter négativement l'autre. Ainsi, la performance thermoélectrique d'un matériau montre généralement un maximum plus ou moins étroit (selon la nature du matériau) en fonction de la température. Cela veut dire que le choix d'une large plage de température, par rapport à l'étendue du maximum, peut entraîner une pauvre performance thermoélectrique d'un module même si les matériaux choisis ont un large maximum de performance thermoélectrique. On cherche donc à exploiter les matériaux thermoélectriques dans une plage de température où leurs performances sont optimales. Ceci aura donc un impact sur le choix des procédés industriels pour lesquels l'énergie thermique perdue pourra être exploitée.

Il est donc nécessaire de développer de nouveaux concepts de modules thermoélectriques qui permettent de profiter à la fois de la performance thermoélectrique d'une grande variété des matériaux ainsi que des plages de températures assez larges mesurées entre la température de la pièce et la température d'un fluide chaud échappé d'un procédé industriel. On parle alors de systèmes de conversion d'énergie thermique en énergie électrique plus performants.

Presque deux siècles après les découvertes de Seebeck et Peltier, les chercheurs du monde entier cherchent encore à trouver la façon d'améliorer la performance des modules générateurs thermoélectriques, pour que les gains en efficacité de ces dispositifs permettent de compenser les coûts de production et d'installation, de même que pour faire de ces modules une alternative viable pour la production d'énergie électrique propre.

Une approche explorée consiste à segmenter les pattes d'un MGT. Cela veut dire que les pattes qui sont initialement conçues d'un même matériau semi-conducteur P ou N sont désormais segmentées afin de combiner deux ou plusieurs matériaux semi-conducteurs largement performants dans chaque patte. Ainsi, chaque segment de matériaux TE à l'intérieur de chaque patte fonctionne dans une plage de température restreinte dans laquelle sa performance se trouve

près du maximum. Cette segmentation des pattes permettrait au module de performer adéquatement dans une plage de température relativement large.

Le but de ce mémoire de maîtrise est de développer la simulation du comportement thermoélectrique et thermomécanique d'un module générateur thermoélectrique à pattes segmentées afin d'établir et d'optimiser les paramètres permettant une performance supérieure dans la récupération de la chaleur perdue dans certains procédés industriels. Plus spécifiquement, on s'intéresse à l'utilisation de l'air chaud échappé dans les fonderies de l'aluminium, où on observerait une plage de température d'opération du module d'entre 20°C et 170°C. On cherchera à définir un modèle de module thermoélectrique optimisé qui pourra ensuite être fabriqué pour valider la simulation. Pour réaliser cette simulation on utilisera les données de différents alliages de Bi_2Te_3 produits par extrusion à chaud dans le groupe de thermoélectricité de l'École Polytechnique de Montréal. D'abord on utilisera des données qui ont déjà été utilisées dans d'autres projets réalisés au Laboratoire de thermoélectricité [3, 4]. Ensuite d'autres alliages produits par le groupe seront caractérisés et utilisés dans le modèle afin de vérifier la polyvalence du modèle optimal proposé par la simulation, pour prédire les conditions dans lesquelles chaque groupe de matériaux doit être combiné pour générer le MGT le plus performant.

Pour bien faire connaître le projet, ce document comporte quatre chapitres en plus de celui dédié à l'introduction.

Dans le deuxième chapitre on fait un survol des principaux dispositifs thermoélectriques et de leur fonctionnement et on énonce les principes de la thermoélectricité nécessaires à la compréhension de ce projet ainsi que les caractéristiques générales des matériaux choisis. De plus une révision bibliographique centrée sur les simulations et les analyses thermoélectriques et thermomécaniques par éléments finis est faite.

Le troisième chapitre présente la méthodologie suivie pour atteindre notre objectif de modélisation du comportement thermomécanique des modules segmentés. Dans ce chapitre, on parle plus profondément des matériaux, on explique les étapes de création des modèles qui feront l'objet d'étude dès la création de la géométrie jusqu'à l'optimisation en passant par les conditions de symétrie et le maillage. À la fin de ce chapitre, on explique les détails des analyses thermoélectriques et thermomécaniques qui ont été menées avec le modèle retenu.

Les quatrième et cinquième chapitres sont destinés respectivement à décrire et expliquer les résultats obtenus lors de chaque type d'analyses réalisées ainsi qu'à discuter les limites de ce projet et les perspectives.

CHAPITRE 2 CONCEPTS GÉNÉRAUX ET REVISION DE LA LITTÉRATURE

2.1 Dispositifs thermoélectriques

Les dispositifs thermoélectriques sont principalement associés à la transformation de l'énergie thermique en énergie électrique ou vice-versa. En général, les dispositifs thermoélectriques peuvent être classés en deux groupes : dispositifs générateurs et dispositifs réfrigérateurs.

2.1.1 Thermocouples

Un thermocouple est un dispositif thermoélectrique générateur qui est typiquement constitué de deux pattes faites de matériaux semi-conducteurs, un de type P et un de type N de longueurs L_P et L_N et de sections A_P et A_N respectivement. Ces pattes sont connectées électriquement en série et thermiquement en parallèle à l'aide de plaques conductrices, le côté froid est connecté à une résistance externe R_o . La différence de température entre les côtés chaud et froid génère un courant électrique qui dissipe une puissance dans la résistance de charge. La figure 2-1 montre le schéma du circuit électrique-thermique à l'intérieur d'un thermocouple sous effet Seebeck.

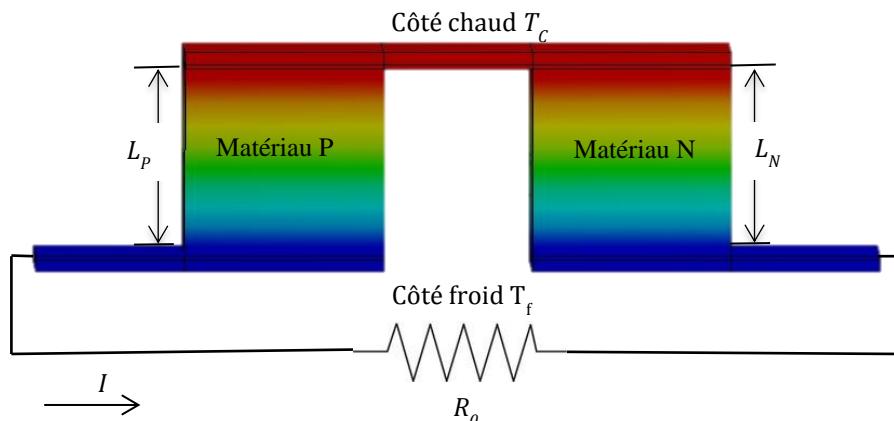


Figure 2-1: Schéma d'un couple TE et du circuit électrique-thermique qui le parcourt.

Le transfert de chaleur à travers le couple est le résultat de la différence de température entre les côtés chaud et froid. Les données thermoélectriques telles que la chaleur, le courant électrique, la puissance et l'efficacité sont calculées comme suit en faisant quelques hypothèses

simplificatrices [5]. En général, cette simplification de la configuration d'un module est faite en négligeant les résistances thermique et électrique qui apparaissent dans les contacts.

Dans ce modèle, les flux de chaleur qui traversent le côté chaud et le côté froid du thermocouple sont donnés par [6]:

$$Q_c = \alpha T_c I - \frac{1}{2} I^2 R + K \Delta T \quad 2.1$$

$$Q_f = \alpha T_f I + \frac{1}{2} I^2 R + K \Delta T \quad 2.2$$

où :

$$\alpha \text{ est le coefficient de Seebeck combiné} \quad \alpha = |\alpha_N| + |\alpha_P|$$

$$R \text{ est la résistance électrique interne du couple} \quad R = \rho_N (L_N / A_N) + \rho_P (L_P / A_P)$$

où ρ est la résistance électrique de chaque matériau

$$K \text{ est la conductance thermique interne} \quad K = \lambda_N (A_N / L_N) + \lambda_P (A_P / L_P)$$

où λ est la conductivité thermique de chaque matériau

$$\Delta T \text{ est la différence de température appliquée entre les côtés chaud et froid} \quad \Delta T = T_c - T_f$$

Le courant électrique est donné par :

$$I = \alpha \Delta T / (R + R_0) \quad 2.3$$

Où :

$\alpha \Delta T$ est la tension de Seebeck ou V_{oc}

Ainsi la puissance de sortie peut être estimée théoriquement à partir des équations 2.1 et 2.2 [7]:

$$P = Q_c - Q_f \quad 2.4$$

$$P = \alpha I \Delta T - RI^2 \quad 2.5$$

$$P = I(V_{oc} - RI) \quad 2.6$$

Conventionnellement, l'efficacité dans la conversion d'énergie est donnée par le ratio entre la puissance de sortie et la chaleur absorbée, à partir des équations 2.1 et 2.6 on peut définir l'efficacité comme suit:

$$\eta = \frac{P}{Q_c} = \frac{IV_{oc}-RI^2}{\alpha T_c I - \frac{1}{2} l^2 R + K \Delta T} \quad 2.7$$

La figure 2-2 montre un modèle de thermocouple modélisé.

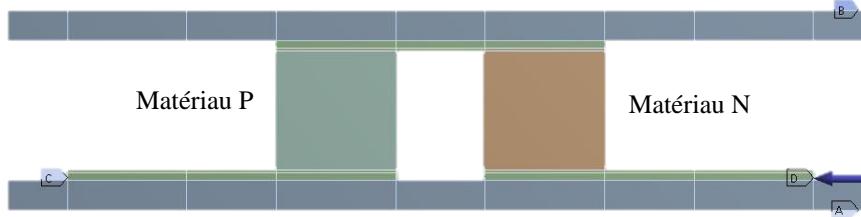


Figure 2-2: Couple thermoélectrique modélisé.

Dans ce modèle, une couleur différente est donnée à chaque type de matériaux pour favoriser la visualisation des composants du thermocouple, les plaques en vert clair sont des conducteurs en cuivre, deux surfaces céramiques marquées avec A et B servent à distribuer la chaleur uniformément à l'extrémité des pattes, de façon à obtenir un gradient de température le long de chaque patte pour mettre le thermocouple en opération.

Néanmoins, pour avoir plus d'exactitude dans les résultats il est important de considérer un modèle plus réaliste dans lequel il faut prendre en compte N thermocouples connectés électriquement en série et thermiquement en parallèle, ainsi que tenir compte des effets des résistances thermique et électrique dans les contacts. Dans ce modèle la puissance de sortie et l'efficacité dans la conversion d'énergie peuvent s'écrire comme suit [7]:

$$P = \frac{\alpha^2}{2\rho} \frac{NA\Delta T^2}{(l+n)(1+2rl_c/l)} \quad 2.8$$

$$\eta = \frac{\left(\frac{\Delta T}{T_c}\right) \left[1+2r\frac{l_c}{l}\right]^2}{\left[2-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta T}{T_c}\right)+\frac{4}{ZT_c}\left(\frac{l+n}{l+2rl_c}\right)\right]} \quad 2.9$$

où, α et ρ sont les coefficient de Seebeck et la résistivité électrique des matériau semi-conducteurs des pattes, Z est la figure de mérite; N est le nombre de thermocouples dans le module, A est la section des pattes; ΔT est la différence de température entre les extrémités froid (T_f) et chaud (T_c) ; l_c est l'épaisseur de la plaque de céramique; $n = \rho_c/\rho$ et $r = \lambda/\lambda_c$, où ρ_c et λ_c sont les résistances de contact électrique et thermique respectivement.

Les équations 2.8 et 2.9 ont d'importantes conséquences dans l'analyse thermoélectrique de modules quand on vise la fabrication. Néanmoins, dans notre travail ont a considéré des contacts parfaits entre tous les matériaux du module de façon à négliger les résistances de contact.

2.1.2 Modules générateurs thermoélectriques

En mode générateur, un module est soumis à une différence de température qui génère un flux de chaleur à travers le module; une portion de ce flux de chaleur est transformée en puissance électrique. En général, un MGT est un dispositif formé par la connexion de plusieurs thermocouples, tous connectés électriquement en série et thermiquement en parallèle en utilisant des plaques de cuivre. En plus des plaques céramiques sont ajoutées pour distribuer la chaleur de façon uniforme sur toute la surface du module. Un module générateur thermoélectrique typique est montré dans la figure 2-3.

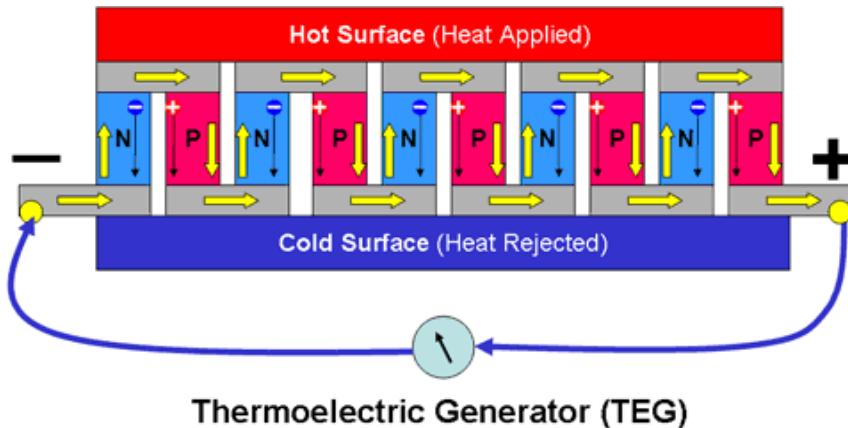


Figure 2-3: Module thermoélectrique; en rouge la plaque céramique supérieure, en bleu la céramique inférieur et en gris les conducteurs de cuivre [8].

Ce type de module est conçu pour supporter les contraintes mécaniques induites par la différence de température entre les deux côtés du module. Pour cette raison, ses pattes du côté chaud sont fixées avec une soudure à partir d'un alliage ayant un point de fusion élevé. Normalement, le point de fusion de la soudure doit dépasser largement la plus haute température que le module ait à supporter. Les modules de réfrigération, par contre, ne respectent pas nécessairement ces caractéristiques, ce qui explique pourquoi ils ne sont pas adéquats pour opérer dans des hautes températures.

2.1.3 Modules réfrigérateurs

En mode réfrigération, le module est alimenté par un courant électrique. Ceci entraîne un pompage de la chaleur d'un côté à l'autre. Le résultat est qu'un côté du module devient froid dans un environnement isolé. L'autre devient chaud et a besoin d'un système d'extraction de chaleur. Ce type de module est conçu pour travailler à basse température, normalement en dessous de 70°C à 90°C. C'est pour cette raison que les modules de refroidissement sont brasés avec des matériaux qui possèdent un point de fusion inférieur à ceux utilisés pour les modules générateurs.

2.1.4 Modules à deux étage

Une façon pour tenter d'augmenter les performances des modules thermoélectriques quand ils doivent opérer dans une large plage de température consiste à utiliser deux ou plusieurs matériaux semi-conducteurs différents dans chaque thermo-élément (patte), tel que montré dans la figure 2-4.

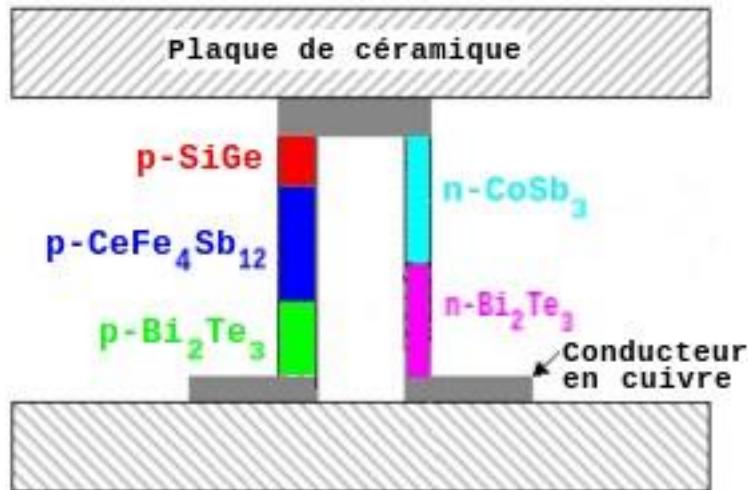


Figure 2-4: Module thermoélectrique segmenté, la patte P a été segmentée en trois étages afin de combiner trois matériaux thermoélectriques différents tandis que la patte N a été segmentée en deux étages [9].

Cette approche permet de combiner des matériaux performants dans leur plage de température d'utilisation optimale. Anatychuck et coll. [10] ont conçu des MGT avec des thermo-éléments inhomogènes avec deux et trois segments. Dans leurs résultats, ils rapportent que l'efficacité des MGT peut être augmentée significativement en utilisant deux segments à

l'intérieur de chaque patte au lieu d'un seul. Dans son article, Anatychuck et coll., décrit une technique utilisée pour fabriquer les thermo-éléments segmentés au laboratoire, cette technique s'appelle (FGTM) pour son nom en anglais functionally graded thermoelectric materials et est caractérisée par la variation progressive de la composition et de la structure du thermo-élément, en altérant la distribution du dopage ce qui entraîne une distribution optimale de porteurs de charge et des changements correspondants dans les propriétés des matériaux (coefficient de Seebeck α , résistivité électrique ρ , et conductivité thermique λ). Une autre façon de faire est tout simplement de souder les morceaux des matériaux de l'épaisseur désirée, puis découper les pattes et assembler le module.

Pour analyser minutieusement l'influence de la segmentation sur la performance des modules, plusieurs analyses par éléments finis ont été menées dans les dernières années [11-13]. Dans ces types d'analyses, la segmentation se fait en utilisant des plans de coupes pour découper horizontalement les thermo-éléments initialement conçus d'un seul matériau; puis un nouveau matériau est ajouté dans chaque thermo-élément. Plus de détails seront données dans la section 3.1.3.

2.2 Concepts généraux de la thermoélectricité

2.2.1 Les effets thermoélectriques

Les effets thermoélectriques sont discutés dans ce travail parce qu'ils sont responsables de la conversion d'énergie à l'intérieur d'un thermocouple. Les principaux effets thermoélectriques sont ceux de Seebeck, Peltier et Thomson.

- L'effet Seebeck

Dans un circuit ouvert formé par deux semi-conducteurs différents A et B comme celui montré dans la figure 2-5, où un des contacts entre les matériaux se trouve à une température T_c et l'autre à une température T_f ($T_f < T_c$), une différence de potentiel électrique, ou force électromotrice (f.e.m.), apparaît aux extrémités C et D du circuit. Quand la différence de température est faible, la f.e.m. induite est proportionnelle à la différence de température et dépend de la nature des matériaux dans le circuit. Le coefficient de proportionnalité est appelé

coefficient de Seebeck. Ce coefficient α est une propriété intrinsèque des matériaux qui est reliée à leur structure électronique.

Cet effet est le plus simple à matérialiser, il suffit de posséder deux fils de différents matériaux thermoélectriques (A et B), formant une chaîne, où une des jonctions est réchauffée ;

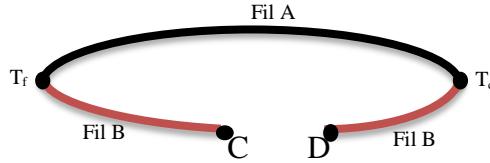


Figure 2-5: Schéma d'un thermocouple [14].

La différence de température $\Delta T = T_c - T_f$ entre les jonctions de deux matériaux, génère une différence de potentiel électrique ΔV entre les extrémités C et D selon :

$$\Delta V = \alpha_{AB} \Delta T \quad 2.10$$

$$V = \int_{T_f}^{T_c} \alpha_{AB} \, dT \quad 2.11$$

$$V = \alpha_{AB} (T_c - T_f) \quad 2.12$$

Le coefficient α_{AB} est la valeur mesurée du coefficient de Seebeck dans lequel est inclus la contribution des deux matériaux α_A ainsi que α_B :

$$\alpha_{AB} = \alpha_A - \alpha_B \quad 2.13$$

Ce coefficient s'exprime en VK^{-1} (ou plus généralement en μVK^{-1}). α_{AB} est positif si la force électromotrice (f.e.m.) génère un courant à travers le fil B qui va de la jonction chaude à la jonction froide.

- L'effet Peltier

Dans le cas de l'effet Peltier, un courant électrique I est imposé à un circuit composé de deux matériaux A et B conducteurs ou semi-conducteurs de type P et N respectivement, ce qui entraîne une libération ou une absorption de chaleur à chaque jonction dépendant de la direction du courant; pour une direction donnée du courant, une des jonctions va absorber de la chaleur tandis que l'autre l'émettra, cet effet est utilisé dans la fabrication de modules réfrigérateurs. La chaleur Peltier dégagée est calculée selon :

$$Q_{AB} = \Pi_{AB} I \quad 2.14$$

où $\Pi_{AB} = \Pi_A - \Pi_B$

Ce terme de chaleur Q_{AB} est aussi connu sous le nom de chaleur Peltier Q_Π et il est proportionnel au courant, où le coefficient de proportionnalité Π_{AB} est appelé coefficient de Peltier du thermocouple exprimé normalement en mV à 273 K et Π_A et Π_B sont les coefficients de Peltier de chaque matériau.

- Coefficient Thomson

Au contraire des coefficients Seebeck et Peltier, le coefficient Thomson peut être mesuré directement et de façon individuelle pour un matériau conducteur ou semi-conducteur thermiquement non-uniforme. Lorsque sont présents simultanément un gradient de température et un courant électrique entre les extrémités du matériau de géométrie linéaire (un fil ou un barreau), il y a génération ou absorption de chaleur dans chaque segment de matériau pris individuellement due à la circulation du courant. Le gradient de flux thermique au sein du matériau est alors donné par :

$$\frac{dQ}{dx} = I \frac{dT}{dx} \tau \quad 2.15$$

où

$\frac{dQ}{dx}$ est le taux d'absorption du chaleur par unité de longueur du conducteur,

τ est le coefficient de Thomson du matériau dont l'unité pratique est μVK^{-1} , et

$\frac{dT}{dx}$ est le gradient de température.

La quantité de chaleur absorbée par seconde est donnée par :

$$Q_T = I \int_{T_f}^{T_c} \tau dT \quad 2.16$$

L'effet Thomson se manifeste par l'apparition d'une f.e.m. Si nous inversons le sens du courant, l'effet calorifique s'inverse également.

- Relations entre les coefficients Seebeck, Peltier et Thomson

Quand un circuit est fermé, les trois effets agissent simultanément. Il a été montré que les trois coefficients Seebeck, Peltier et Thomson ne sont pas indépendants les uns des autres. Ils sont liés par les deux relations [15]:

$$\Pi_A = \alpha_A T \quad 2.17$$

$$\tau_A = T \frac{d\alpha_A}{dT} \quad 2.18$$

Ces relations peuvent être dérivées en utilisant la thermodynamique irréversible [16]. Leur validité a été démontrée pour beaucoup de matériaux thermoélectriques et on assume que ces relations peuvent être utilisées pour toutes les applications thermoélectriques.

2.3 La figure de mérite

Les coefficients des propriétés électriques et thermiques d'un matériau peuvent être combinés dans un seul paramètre appelé figure de mérite. La figure de mérite est un paramètre qui détermine l'utilité et l'efficacité des matériaux semi-conducteurs thermoélectriques pour être utilisés dans des dispositifs thermoélectriques [17]. Dans le cas d'un générateur thermoélectrique, ZT est la figure de mérite adimensionnelle avec laquelle on évalue l'efficacité des matériaux thermoélectriques pour générer de l'énergie électrique [18] et elle est donnée par l'équation (2.19), où T est la température absolue et Z est un paramètre proportionnel au coefficient de Seebeck au carré et inversement proportionnel à la résistivité électrique et à la conductivité thermique.

$$ZT = \frac{\alpha^2 T}{\rho \lambda} \quad 2.19$$

où α = Coefficient de Seebeck, V/K

$\rho = \frac{1}{\sigma}$ = Résistivité électrique, Ωm

λ = Conductivité thermique, $W/m K$

Comme il a été déjà mentionné, l'efficacité d'un MGT mis en opération dans une plage de température donnée est liée à la valeur de ZT dans la même plage de température. Pour avoir une haute performance thermoélectrique, il faut avoir un coefficient Seebeck élevé, une basse

résistivité électrique et une basse conductivité thermique. Quand ZT augmente, l'efficacité de la génération d'énergie s'approche au maximum permis par les lois de la thermodynamique, cela veut dire à la limite de Carnot [19].

2.4 Les matériaux thermoélectriques

Dans la production de dispositifs thermoélectriques, les matériaux semi-conducteurs de type P et de type N sont utilisés pour fabriquer des thermo-éléments (pattes); dans la plupart des dispositifs, les fabricants utilisent souvent la même base de matériaux et ajoutent des impuretés par dopage pour donner au matériau des propriétés de type N ou P. Cette technique génère des matériaux avec une compatibilité des propriétés thermique, électrique et mécanique, qui peuvent facilement se combiner dans des modules.

Pour fabriquer un dispositif thermoélectrique générateur performant, il faut chercher des matériaux semi-conducteurs avec une haute performance ZT . En observant un graphique des courbes de performance ZT en fonction de la température, il est possible d'identifier quels sont les matériaux les plus performants pour une plage de température donnée. Dans les figures 2-6 et 2-7 les performances ZT des quelques matériaux semi-conducteurs P et N, respectivement, sont montrées.

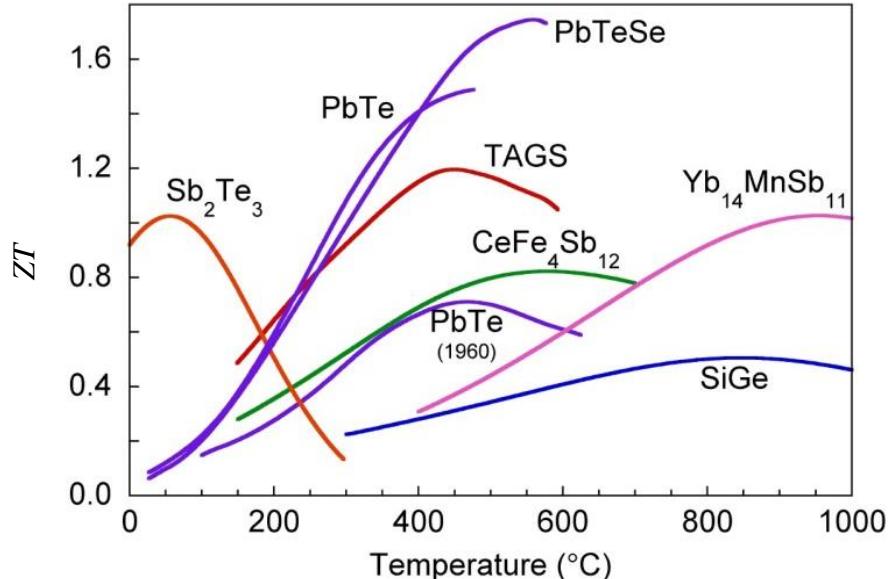


Figure 2-6: Figure de mérite pour des matériaux de type P [16].

On peut observer sur la figure 2-6 que chaque matériaux montre un pic de performance en fonction de la température; pour des températures au-dessous de 200°C, le matériau

thermoélectrique de type P le plus performant est le tellure d'antimoine (Sb_2Te_3), alors que pour les matériaux de type N, sur la figure 2-7, on note que les plus performants sont à base de tellure de bismuth (Bi_2Te_3). Compte tenu que dans le projet on vise des applications à basse température, les matériaux à base de tellure de bismuth sont un bon choix pour le projet.

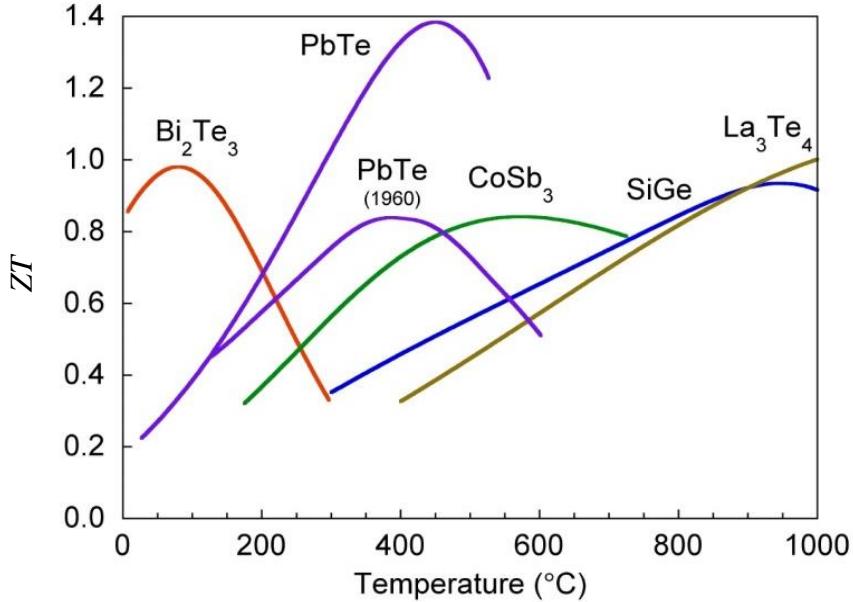


Figure 2-7: Figure de mérite pour des matériaux de type N [16].

2.5 Simulations numériques de dispositifs thermoélectriques

Depuis quelques années, les simulations numériques ont été utilisées pour évaluer la performance thermomécanique et thermoélectrique de différents matériaux ainsi que pour faire des minutieuses analyses des modules TE minces d'une épaisseur totale de moins de 5 mm [20]. Ces types d'analyses sont bien reconnus [21] dus à leur fiabilité, accessibilité et faible coût.

2.5.1 Éléments finis

Dans la méthode des éléments finis, le continuum ou corps de la matière, tel qu'un solide, un liquide ou un gaz, est représenté comme un assemblage de subdivisions appelées éléments finis. Ces éléments sont interconnectés par l'intermédiaire de nœuds ou points nodaux. Les nœuds se trouvent à la frontière où les éléments adjacents sont considérés comme étant connectés. Comme la variation des variables de champ (par exemple : déplacements, contrainte, température, pression ou vitesse) à l'intérieur du continuum n'est pas connue, on assume que la

variation des variables de champ dans un élément fini peut être approximée par une fonction simple.

Les fonctions d'approximation (appelées aussi modèles d'interpolation) sont définies en termes des valeurs des variables de champs dans les nœuds. Quand les équations de champ (équations d'équilibre) pour tout le continuum sont écrites, les nouvelles inconnues seront les valeurs nodales des variables de champ. En résolvant les équations de l'élément fini, lesquelles sont généralement sous la forme matricielle, les valeurs nodales des variables de champs deviennent connues. À partir de ce point, les fonctions d'approximation donnent la variable de champ pour l'ensemble des éléments.

En général, pour les problèmes d'analyses thermique et structurale, ANSYS offre deux méthodes de solution : h-méthode et p-méthode. La h-méthode utilise les éléments basés typiquement sur de fonctions quadratiques, tandis que la p-méthode utilise des polynômes d'ordre supérieur pour définir les éléments. Dû au fait que la h-méthode utilise des éléments quadratiques, il faut faire un raffinement du maillage pour avoir des résultats plus précis, donc une étude de convergence est nécessaire. Par contre, dans la p-méthode, il n'y a pas besoin de manipuler la taille des éléments, ce qui facilite le travail. Cette méthode itérative qui manipule systématiquement les degrés des polynômes à chaque itération pour avoir des résultats plus précis, fait que le calcul devient plus lourd [22]. Donc la h-méthode a été choisie pour notre calcul et une étude de convergence a été faite pour arriver au maillage approprié pour réduire le pourcentage d'erreur relative à moins de 5%.

Une fois choisie la méthode à utiliser, il faut définir les équations qui gouvernent le comportement physique de notre module pour après les assembler dans le modèle aux éléments finis.

2.5.2 Équations qui gouvernent la thermoélectricité

Dans une analyse thermoélectrique [23], les équations de flux de chaleur

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} = \dot{q} \quad 2.20$$

et de continuité de la charge électrique

$$\nabla \cdot \left(\mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \right) = 0 \quad 2.21$$

sont couplées dans un ensemble d'équations thermoélectriques constitutives :

$$\mathbf{q} = T[\alpha] \cdot \mathbf{J} - [\lambda] \cdot \nabla T \quad 2.22$$

$$\mathbf{J} = [\sigma] \cdot (\mathbf{E} - [\alpha] \cdot \nabla T) \quad 2.23$$

Où ρ est la densité (kg/m^3), C es la chaleur spécifique massique $\text{J}/(\text{kg}\cdot\text{K})$, \mathbf{q} est le vecteur associé au flux de chaleur (W/m^2), \dot{q} est le taux de génération de chaleur par unité de volume W/m^3 , $\mathbf{D} = [\varepsilon] \cdot \mathbf{E}$ est le vecteur associé à la densité de flux électrique (C/m^2), \mathbf{E} est le vecteur associé à l'intensité de champ électrique, \mathbf{J} est le vecteur associé à la densité de courant (A/m^2), T est la température absolue, $[\alpha]$ est le tenseur des coefficients Seebeck (V/K), $[\lambda]$ est le tenseur de conductivité thermique ($\text{W}/\text{m}\cdot\text{K}$), $[\sigma]$ est le tenseur de conductivité électrique, $[\varepsilon]$ est le tenseur de permittivité diélectrique, il faut remarquer que tous les tenseurs mentionnés ci-haut varient en fonction de la température.

En l'absence d'un champ magnétique variable, le champ électrique \mathbf{E} est irrotationnel et peut se dériver d'un potentiel scalaire, donc le champ électrique est donné par :

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi \quad 2.24$$

En substituant les équations (2.22) et (2.24) dans les équations (2.20) et (2.21) on obtient le système suivant :

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot ([\Pi] \cdot \mathbf{J}) - \nabla \cdot ([\lambda] \cdot \nabla T) = \dot{q} \quad 2.25$$

$$\nabla \cdot \left([\varepsilon] \cdot \nabla \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right) + \nabla \cdot ([\sigma] \cdot [\alpha] \cdot \nabla T) + ([\sigma] \cdot \nabla \varphi) = 0 \quad 2.26$$

À partir de ces équations, on peut obtenir un système d'équations thermoélectriques en éléments finis en utilisant la méthode Garlekin [3]. Dans cette méthode, on approxime la température T et le potentiel électrique φ comme un élément fini, comme suit

$$T = NT_e \quad 2.27$$

$$\varphi = N\varphi_e \quad 2.28$$

où T_e est le vecteur de températures nodales, φ_e est le vecteur du potentiel électrique nodal et N est le vecteur des fonctions d'interpolation nodales.

Les fonctions d'interpolation dépendent essentiellement du type d'élément choisi pour

l'analyse. Étant donné que l'analyse faite dans ce travail est 3D et due à la simplicité de la géométrie proposée, des éléments de volume (briques) de second degré ont été utilisés afin de produire un maillage régulier. Ce type d'élément a été choisi parce qu'il donne des résultats assez précis avec un coût de calcul raisonnable [22] par rapport aux autres éléments de volume. Dans la figure 2-8, on montre les différents types d'éléments de volume avec le nombre de nœuds dans chacun.

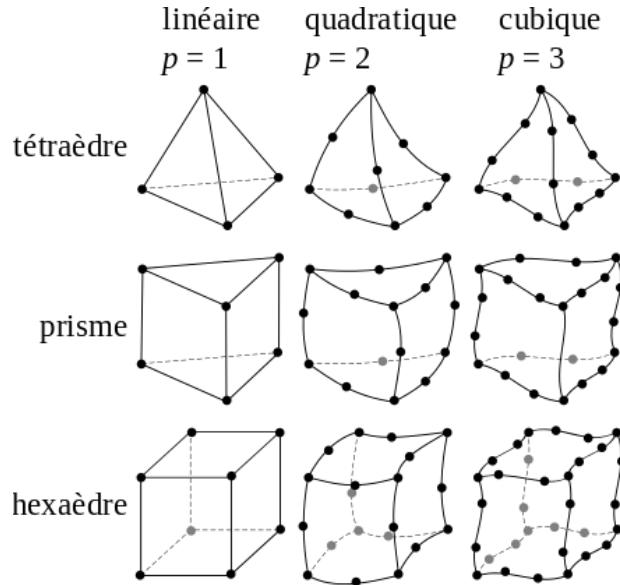


Figure 2-8: Éléments de volume (Solides 3D) [24].

L'hexaèdre du second degré ($p = 2$) est topologiquement défini par 20 nœuds. Chaque nœud possède 5 degrés de liberté; soient les trois déplacements dans les directions x, y et z, la tension et la température.

ANSYS Workbench est le nom commercial d'un logiciel de calcul par éléments finis pour la résolution de problèmes linéaires et non linéaires en utilisant l'algorithme de Newton-Raphson. Ce logiciel est utilisé dans plusieurs applications dont les analyses structurales, thermiques et électriques, sont les plus connues pour les analyses de problèmes dépendant de la température [25]. Sa fiabilité a été déjà validée dans plusieurs travaux dont ceux de [26, 27] et [28]. De plus, il permet de faire des combinaisons d'analyses thermoélectriques et thermomécaniques couplées.

2.6 Revue de littérature sur les simulations par éléments finis

Cette section présente dans un premier temps une revue de littérature générale sur les simulations par éléments finis des MGT et en particulier sur les analyses thermoélectriques et thermomécaniques. Elle commence par présenter les études faites en 1D et 2D, et la comparaison avec les modèles analytiques, et par conséquent la validation des logiciels de simulation par MEF. Par la suite, on présente une description des travaux portant sur les analyses par MEF des modules thermoélectriques en 3D. Pour mieux comprendre l'approche prise dans cette étude, la section présente l'effet de la variation de la géométrie sur la performance du module en général et plus spécifiquement sur sa puissance de sortie, son efficacité et les valeurs des contraintes de Von Mises. À la fin de cette section, la conclusion sur les analyses mets en évidence les éléments pour mener à un projet de recherche.

2.6.1 La méthode des éléments finis

Dans le passé, l'étude des phénomènes thermoélectriques se faisait normalement en utilisant des modèles analytiques conçus en appliquant une série de simplifications aux équations constitutives des matériaux thermoélectriques. Dans les dernières décennies, les chercheurs ont commencé à utiliser des méthodes numériques comme les éléments finis qui permettent de tenir compte de la plupart des simplifications faites dans les modèles analytiques, ce qui a ouvert une nouvelle voie pour l'optimisation des dispositifs thermoélectriques.

Actuellement il existe quelques logiciels de simulation par MEF de bonne qualité avec options spécifiques pour des analyses thermoélectriques. Ces logiciels sont capables d'introduire dans leurs analyses les équations qui gouvernent les analyses thermique et électrique et d'arriver facilement à la solution des systèmes d'équations non linéaires permettant de faire des analyses complexes. Celles de Chu en [29] utilisent le logiciel Nastran pour faire l'analyse des contraintes de Von Mises dues au gradient de température dans des dispositifs thermoélectriques fabriqués par la technologie MOCVD.

Dans le présent travail, on s'intéresse particulièrement aux analyses où la puissance, l'efficacité et les contraintes de Von Mises ont été étudiées.

2.6.2 Performance thermoélectrique

La puissance électrique ainsi que l'efficacité sont des paramètres très importants dans l'évaluation de la performance d'un dispositif thermoélectrique. Pour cette raison, elle est présentée dans presque tous les travaux qui portent sur l'analyse thermoélectrique.

Arenas et coll. [28] ont effectué l'analyse d'un module thermoélectrique en utilisant le logiciel ANSYS APDL, bien que ANSYS permet de faire des analyses en deux ou trois dimensions, ils ont utilisé des modèles en deux dimensions (2D). Dans leur analyse, ils ont utilisé l'hypothèse que les flux thermique et électrique sont présents dans les modules en 2D, ce qui est correct pour tous les éléments du module, soit les thermo-éléments, les plaques de cuivre et la soudure. C'est seulement dans les plaques céramiques où le flux thermique se fait en 3D [28]. Ils ont analysé la distribution de puissance par unité d'aire de chacun des éléments à l'intérieur du module et ils ont comparé ces résultats avec un modèle analytique. Ils ont considéré deux cas; un modèle simple avec un seul élément fait des matériaux isotropiques et des propriétés constantes et un modèle complet d'un thermocouple dont toutes les propriétés des matériaux ont été considérées comme constantes avec la température. Ils ont trouvé pour le cas simple que leurs résultats sont en bon accord avec le calcul analytique, moins de 0.2% d'écart dans la valeur de la puissance thermique et autour de 0.02% dans la mesure de l'efficacité. Par contre, dans le modèle complet, les résultats sont significativement différents du modèle analytique : entre 3% et 17%. Cette différence est attribuée aux matériaux intermédiaires entre deux thermo-éléments. Bien que leur modèle ne représente pas tout à fait la réalité, cela ouvrent la porte à des analyses plus complexes en utilisant ce logiciel.

Comme il a été déjà mentionné ANSYS est un excellent logiciel de calcul par MEF avec des outils spécifiques pour les analyses thermoélectriques, Antonova et coll. [23] ont démontré sa fiabilité pour les analyses thermoélectriques de MGT et de réfrigérateurs en créant un modèle de MGT qui tient compte de la variation des paramètres physiques du modèle (résistivité électrique, conductivité thermique et coefficient de Seebeck) avec la température. Les résultats sont comparés avec ceux du modèle analytique de Angrist et coll. [5] et Gao et coll. [12] qui utilisent ce logiciel pour créer le modèle de thermocouple montré dans la figure 2-9.

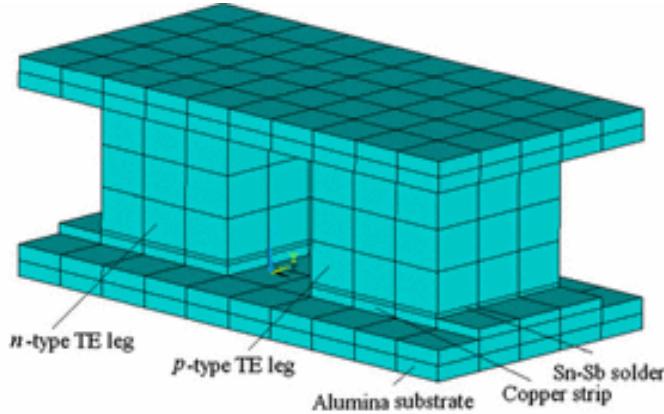


Figure 2-9: Modèle de thermocouple modélisé en ANSYS [12].

Il est possible d'observer dans leur modèle un maillage hexaédrique grossier avec la même taille d'éléments dans tous les composants du thermocouple, ce qui peut avoir une influence sur les résultats. Néanmoins, aucune étude de convergence pour déterminer le maillage optimal n'a été rapportée dans l'article. Gao et coll. [12] ont centré leur recherche plutôt vers l'influence de la longueur totale et de la section des pattes dans la puissance de sortie et l'efficacité pour vérifier la dépendance de la performance thermoélectrique des modules avec leur structure. Ils ont trouvé que les MGT expérimentent une perte dans la puissance de sortie lorsque la longueur de pattes augmente mais un gain dans la puissance lorsque la section carrée augmente, tandis que pour l'efficacité, il y a un gain lorsque la longueur des pattes augmente. Ils ont combiné cette analyse avec un analyse thermomécanique pour proposer un modèle optimal d'un MGT avec une longueur de pattes de $L = 2.5$ mm et un section de $s = 4 \text{ mm}^2$, capable de résister aux contraintes mécaniques induites lors de la mise en opération. Chen et coll. [11] ont généré deux modèles de thermocouples avec l'objectif d'analyser les méthodes de refroidissement. Dans leur article, ils sont arrivés à d'autres conclusions aussi importantes. Dans leur travail, ils ont exploré la segmentation des pattes dans un MGT et ont construit un modèle multi-étage de thermocouple ainsi qu'un modèle à un seul étage; ces modèles sont montrés dans la figure 2-10. Malheureusement, les auteurs ne donnent pas d'information sur le modèle par éléments finis (le type d'éléments utilisés, le maillage) et ils ne semblent pas avoir simulé une couche de soudure à l'interface entre les segments de pattes dans le thermocouple à deux étages.

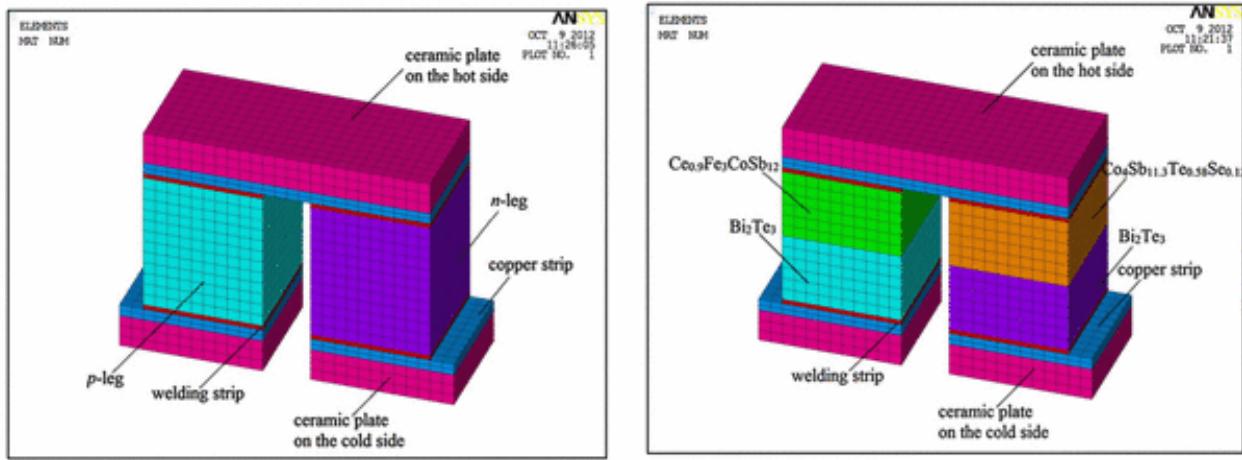


Figure 2-10: Modèles de thermocouples modélisés par ANSYS [11]. À gauche, le modèle à un seul étage où les deux pattes sont composées d'un alliage à base de skuttérudite et à droite, le modèle à deux étages dont les matériaux sont décrits dans la figure.

Ils ont trouvé que la distribution de températures est similaire pour les deux modèles et tel qu'il est espéré, la température diminue graduellement du côté chaud jusqu'au côté froid. Ils ont analysé aussi la puissance de sortie dans le deux modèles ainsi que l'efficacité dans la conversion d'énergie et ils ont trouvé que le modèle multi-étage est plus performant que le modèle à un seul étage [11] avec un gain en efficacité de 0.9% et un gain dans la puissance de sortie de 21%. Ces résultats, même s'ils n'ont pas été validés, peuvent être utilisés comme référence pour des recherches plus avancées sur l'influence de la segmentation dans la performance des modules. Picard et coll. [4] ont aussi travaillé sur la segmentation. Ils ont simulé un modèle de module générateur thermoélectrique à deux étages à partir du modèle d'un quart de module en utilisant des conditions de symétrie. Ces modèles ont été conçus avec des alliages à base de tellurure de bismuth; un matériel très reconnu pour sa performance thermoélectrique à basse température. Tel qu'espéré, ils ont trouvé que la segmentation augmente la performance thermoélectrique des modules en comparaison avec le modèle traditionnel à un seule étage, mais pour obtenir une performance optimale du module, il est peut être nécessaire d'avoir différentes longueurs dans les segments des pattes P et N [4]. Cette hypothèse lancée antérieurement par Gao et coll. [12] n'a pas été étudiée dans cet article. Erturun et coll. [26] ont étudié l'effet de la variation de la géométrie des pattes sur la performance des modules. Ils ont créé des modèles à quatre pattes avec quatre géométries différentes dans la section des pattes telle que montré dans la figure 2-11.

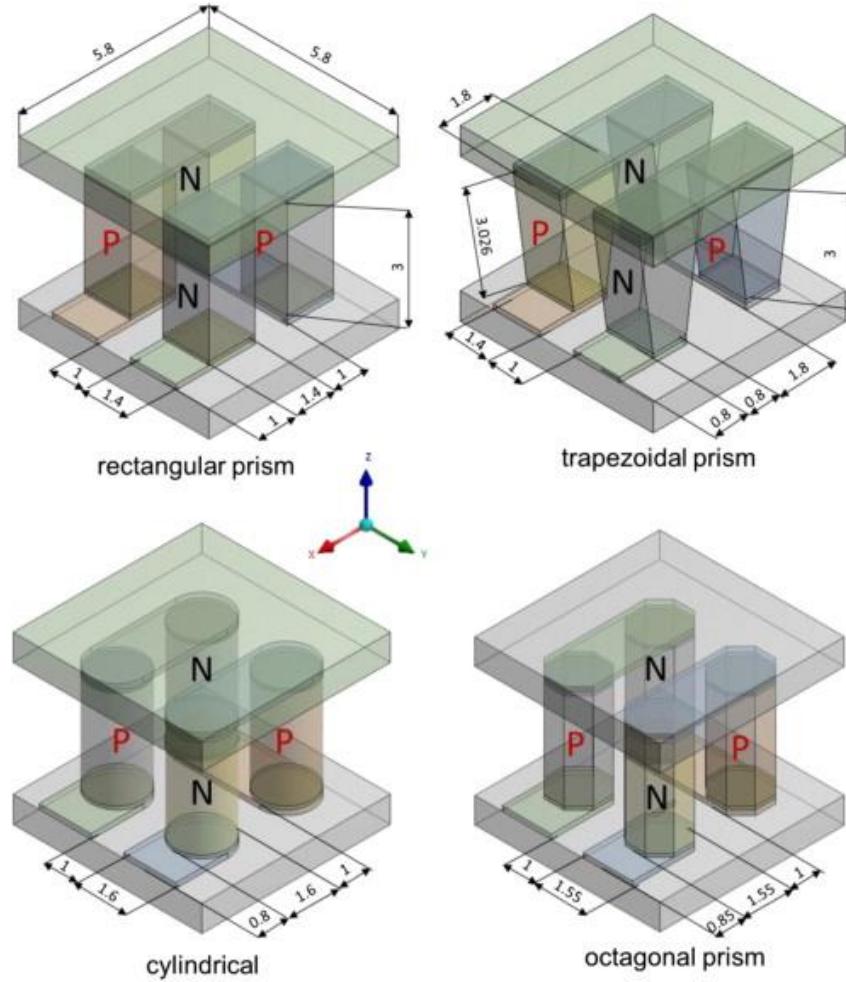


Figure 2-11: Modèle des MGT par Erturun et coll. [26] en ANSYS. Toutes les dimensions montrées sont en millimètres.

Dans leur travail, ils ont utilisé un modèle stationnaire dans ANSYS Workbench où le gradient de température, la puissance de sortie et les contraintes thermomécaniques ont été analysées. Pour valider leurs modèles, ils ont comparé leurs résultats avec des mesures expérimentales effectuées sur un module commercial.

Des différences pas très significatives dans la puissance de sortie et dans l'efficacité ont été rapportées dans les quatre modèles, ce qui était à prévoir compte tenu que les coefficients Seebeck, le gradient de température et la longueur des pattes ont été les mêmes pour tous les modèles [26]. Une version à deux étages des modèles montrés dans la figure 2-11 a été explorée, mais n'a pas été approfondie parce que l'optimisation thermoélectrique des modules n'était pas l'objectif visé. Ils ont utilisé du tellurure de bismuth pour le premier étage et du CoSb (skutterudite) pour le deuxième étage dû à son coefficient de Seebeck optimal pour les hautes

températures. Jia et coll. [13] analysent un modèle 3D en EF d'un module thermoélectrique segmentée en utilisant les mêmes matériaux que [11] et [26]. Leur modèle est montré dans la figure 2-12.

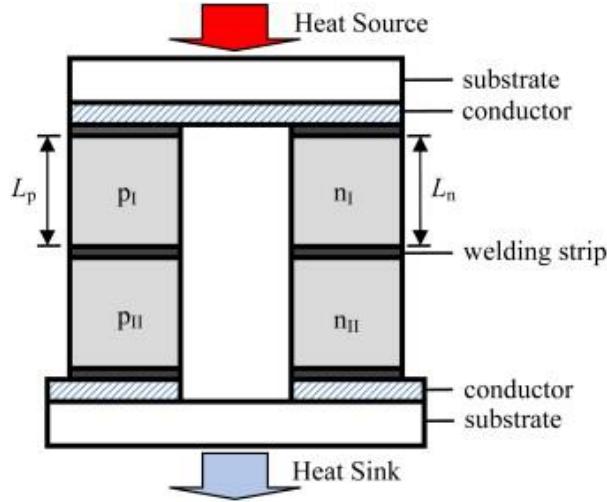


Figure 2-12: Modèle des MGT en ANSYS par Jia et coll. [13].

Leurs résultats montrent que pour des valeurs différentes de L_p et L_n , l'efficacité atteint sa valeur maximale, cela veut dire un gain d'environ 40% par rapport au module standard fait de skuttérudite et un gain d'environ 37% par rapport au module standard fait de tellurure de bismuth pour une plage de température de $\Delta T = 325^\circ\text{C}$. Néanmoins, ce modèle n'a pas satisfait les exigences de résistance pour ces types de matériaux. Ils ont alors opté pour recommander un modèle avec $L_p = L_n$ dans leur conclusion.

2.6.3 Résistance thermomécanique

Les contraintes induites dans le module dues au gradient de température ainsi que l'expansion thermique des matériaux peuvent mener à la fissuration ou à la fracture qui affecte le bon fonctionnement et la performance du module [13]. Pour cette raison il faut évaluer la résistance mécanique des modules aux contraintes induites lors de la mise en opération. Clin et coll. [3] ont simulé et analysé le comportement thermomécanique d'un MGT fait d'un alliage à base de tellurure de bismuth. Ils ont analysé les contraintes de Von Mises dans les modules. Leurs résultats montrent que la valeur maximale de la contrainte se trouve dans le côté chaud à la jonction entre les thermo-éléments et la soudure. La contrainte maximal est toujours située dans les coins de pattes [12, 14]. De plus, ils ont montré que la contrainte dans les thermo-éléments

augmente lorsque leur longueur diminue. Leur travail a été continué par Turenne et coll. [27] qui ont simulé le comportement thermomécanique du module et ont trouvé que la soudure subit une déformation plastique pendant la mise en opération, ce qui a pour effet d'amoindrir la contrainte sur les thermo-éléments. Ce résultat a été confirmé par Chen et coll. [11] qui ont en plus simulé et mesuré expérimentalement la déformation du module due au gradient de température imposé. Cette déformation a été aussi objet d'analyse dans [20]. Gao et coll. [12] avec son modèle de la figure 2-9, ont trouvé que la contrainte de Von Mises diminue lors que la longueur de pattes augmente, tandis qu'avec l'augmentation de la section des pattes, la contrainte de Von Mises change significativement. Picard et coll. [4] ont introduit dans leur analyse une couche de soudure entre les segments de pattes et ont analysé sa déformation. Les résultats montrent que la déformation plastique de cette couche de soudure génère une réduction sur la contrainte de Von Mises dans le thermo-élément sans aucun impact sur la performance du module. Erturun et coll. [26] dans leur analyses sur l'influence de la géométrie des pattes dans la performance du module, ont montré que la valeur maximum de la contrainte de Von Mises se trouve du côté chaud dans les coins de pattes ou dans le bord des pattes pour le cas cylindrique. De plus, ils ont trouvé qu'un changement dans la géométrie des pattes peut réduire significativement les contraintes thermiques induites dans le modèle jusqu'à un 20%. Ils ont trouvé aussi la déformation plastique dans la couche de soudure et les conducteurs de cuivre du côté chaud. Pour valider leurs résultats, ils ont mesuré la déformation entre le centre d'un module commercial et un de ses coins, quand le module est soumis à un $\Delta T = 100^\circ\text{C}$, et ils ont comparé ces mesures avec le résultat de la simulation d'un quart de module quasi symétrique. Leurs valeurs de simulation ont une bonne corrélation avec les valeurs expérimentales. La maximum déformation observé a été de 73,74 μm , très proche de ce qui a été observé par [27]. Jia et coll. [13] ont trouvé, en plus des résultats déjà discutés pour des autres articles, que dans le processus d'optimisation des MGT il faut toujours avoir un équilibre entre la performance thermoélectrique et la résistance mécanique du module pour avoir un modèle optimal.

En conclusion, la fabrication des modules générateurs thermoélectriques à pattes segmentées est une stratégie effective pour atteindre une haute performance thermoélectrique. Les simulations par éléments finis permettent de créer des modèles optimaux et de les soumettre à différents types d'analyses pour trouver les forces et les faiblesses de chaque modèle et corriger leurs problèmes. La MEF permet de faire des analyses précises à faible coût ce qui ouvre une

infinité de possibilités pour la recherche du modèle optimal pour chaque type de matériau et pour chaque application.

Même si tous les travaux dont on a parlé traitent de la fiabilité et des propriétés mécaniques des MGT, ils n'ont pas considéré en profondeur la segmentation asymétrique pour les applications à faible température comme une possibilité d'améliorer la performance thermoélectrique des modules tout en gardant une résistance mécanique acceptable. La création d'un modèle optimal par EF de MGT en utilisant la segmentation asymétrique est l'objectif de ce travail.

CHAPITRE 3 DESIGN ET SIMULATION DU MODÈLE

3.1 Conception du modèle

Dans cette section, on présentera d'abord les détails techniques sur le premier module générateur simulé, en incluant un parallèle avec un module commercial fabriqué par Kryotherm dans le but de valider notre modèle par éléments finis. Ensuite, des explications concernant l'obtention et la caractérisation du quart de module sont données en plus d'une comparaison entre le module complet et le quart de module afin d'étudier la relation entre les puissances de sortie des deux modules. À la fin, le modèle mathématique utilisé dans la simulation est décrit sommairement.

3.1.1 Détails techniques

Le module *design modeler* du logiciel ANSYS Workbench a été utilisé pour modéliser la géométrie de chacun des modules créés dans le projet. Chacun des modèles a été créé sur la base du circuit électrique-thermique montré dans la figure 2-1. Au total, cinq modèles ont été créés. Le premier modèle a été conçu à partir de la géométrie d'un MGT typique qu'on peut trouver facilement sur le marché. Il s'agit d'un module mince de $40 \times 40 \text{ mm}^2$ d'aire et 254 pattes, chacune avec une section de $1.4 \times 1.4 \text{ mm}^2$, avec une séparation entre les pattes de 1 mm. Toutes les dimensions ont été résumées dans le tableau 3-1 et quelques-unes sont montrées sur la figure 3-1.

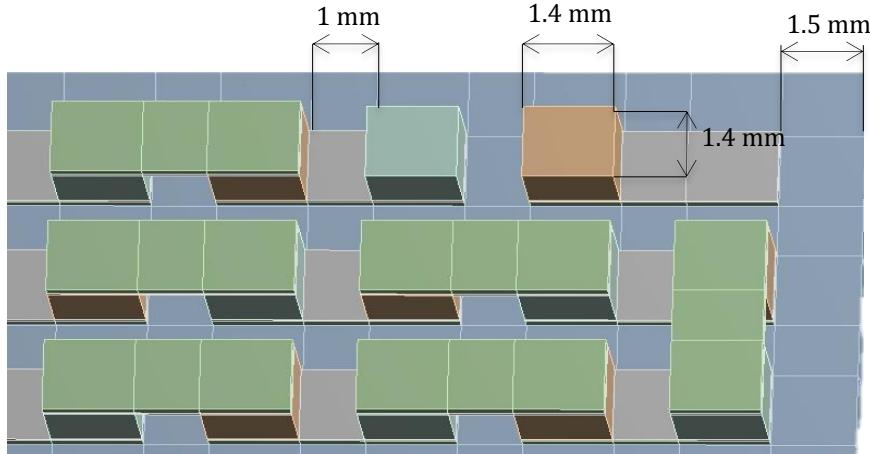


Figure 3-1: Dimensions générales du premier modèle montrées sur une portion du module; la plaque supérieure de céramique et un conducteur de cuivre ont été retirés pour faciliter la visualisation.

Tableau 3-1: Dimensions des éléments dans le premier module

| Dimensions | Plaques de céramique | Conducteurs de cuivre | Soudure | Pattes |
|------------|-------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|
| Section | 40 x 40 mm ² | 1.4 x 3.8 mm ² | 1.4 x 3.8 mm ² | 1.4 x 1.4 mm ² |
| Épaisseur | 0.75 mm | 0.25 mm | 0.09 mm | — |
| Longueur | | | | 1.5 mm |
| Quantité | 2 | 127 | 127 | 254 |

Ce premier modèle a été créé afin d'être en mesure de vérifier certains résultats de la simulation de la performance thermoélectrique (puissance de sortie et efficacité) en les comparant avec ceux d'un module commercial. Le modèle de module TGM-127-1.4-1.5 fabriqué par Kryotherm a été choisi pour faire le parallèle dû à ses similitudes avec notre module; dans les systèmes de notation de Kryotherm [30] *TGM* est l'abréviation pour le produit *thermoelectric generating module*, *127* indique le nombre de thermocouples dans le module, *1.4* indique les dimensions du côté de chaque thermo-élément (patte) en millimètres, cela veut dire que chaque patte a une section transversale de 1.4 mm × 1.4 mm, et la valeur 1.5 indique la longueur de la patte en millimètres. Les résultats du comportement de notre module sont montrés dans la figure 3-2. Ensuite dans le tableau 3-2, une comparaison est effectuée entre les maxima atteints pour notre module (résultats prédicts par ANSYS dans les mêmes conditions spécifiées par Kryotherm) et ceux montrés dans le catalogue de Kryotherm.

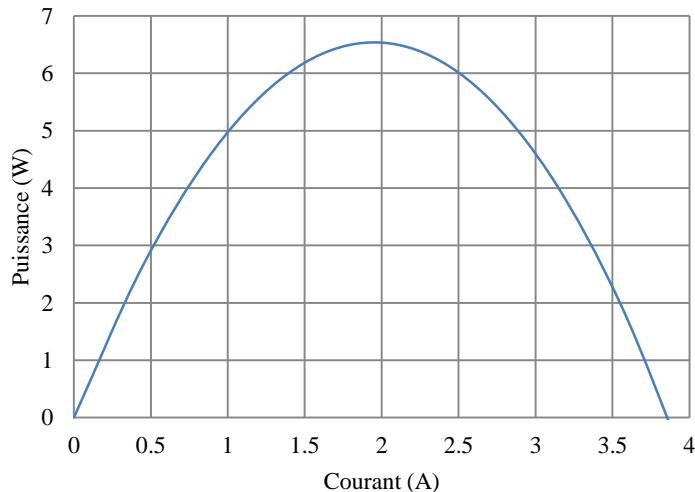


Figure 3-2: Courbe de performance thermoélectrique pour le premier module, $T_f = 30^\circ\text{C}$, $T_c = 200^\circ\text{C}$.

Tableau 3-2: Comparaison entre les données du module de Kryotherm et notre module standard pour une plage de température de 170°C avec $T_f = 30^\circ\text{C}$. R_{ac} – résistance électrique dans le conditions d'opération; R_t – résistance thermique; V_{oc} – tension a circuit ouvert; I_{cc} – courant en cc; V – tension maximale; P – puissance maximale; I – courant à puissance maximale; η – efficacité [30].

| Type de module | R_{ac}, Ohm | $R_t, \text{K/W}$ | V_{oc}, V | I_{cc}, A | V, V | P, W | I, A | $\eta, \%$ |
|------------------------|----------------------|-------------------|--------------------|--------------------|---------------|---------------|---------------|------------|
| TGM-127-1.4-1.5 | 1.89 | 1.69 | 7.2 | 3.5 | 3.4 | 6.2 | 1.81 | 5.1 |
| Module Standard | 1.96 | 1.91 | 6.6 | 3.6 | 3.55 | 6.43 | 1.81 | 6.36 |

Sur le tableau 3-2, il est possible d'observer que même si on n'a pas utilisé pour notre module exactement les mêmes matériaux que Kryotherm (dû à des différences dans le dopage), nos résultats sont comparables à ceux-ci si les modules sont soumis aux mêmes conditions d'opération. On peut dire que ces résultats confirment la validité de notre modèle du point de vue des ordres de grandeurs thermoélectriques.

Une fois que notre module a été validé, un nouveau modèle a été créé. En utilisant deux plans pour découper le modèle original, le deuxième modèle a été créé à partir d'un quart du premier; en visant un allègement du calcul sans perdre l'option de faire un analyse thermomécanique; ce modèle a été appelé module standard. La figure 3-3 montre un schéma de la relation entre le module complet (première modèle) et le quart de module (deuxième modèle). Comme conséquence de la réduction du modèle, du côté où le premier plan de symétrie a été défini, le circuit électrique a été divisé en 5 circuits indépendants. Des conditions de couplage ont été ajoutées sur les segments découpés par le plan de coupe, de façon à assurer une continuité au circuit électrique dans le module. Ces couplages sont montrés en rouge sur la figure 3-3 (droite). Du côté où le deuxième plan de coupe a été ajouté, une mise à terre (flèche bleue à gauche) est appliquée afin d'obtenir en sortie une valeur absolue du potentiel électrique dans le module. Une autre flèche bleue à droite montre l'entrée du courant. Bien que dans la pratique normalement on utilise une résistance de charge R_0 pour fermer le circuit, dans la simulation en ANSYS Workbench on a deux options équivalentes pour simuler le passage du courant à travers

le module. Une option consiste à rédiger un commande pour simuler une résistance externe, l'autre option est tout simplement d'imposer une condition de courant électrique quelconque à l'extrémité du circuit, puis résoudre le circuit pour déterminer quels sont les conditions aux rives appropriées pour avoir un résultat valable; cette dernière option a été conservée dans notre travail pour des raisons de simplicité.

Un calcul analytique a été effectué pour trouver le facteur de relation entre la puissance de sortie de chacun d'entre eux en prenant compte de la relation entre le nombre de thermocouples de chaque modèle.

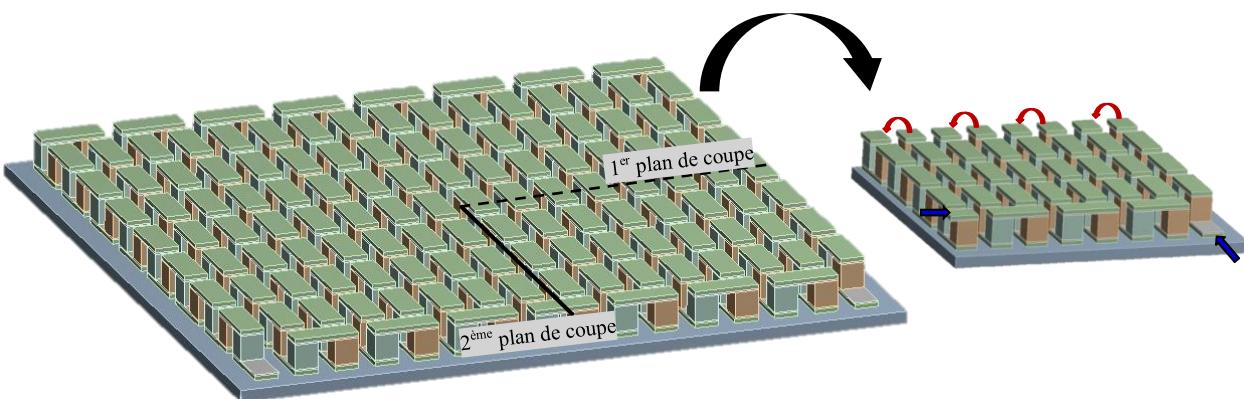


Figure 3-3: Schéma de la relation entre le premier modèle (127 thermocouples) et le module standard (31.5 thermocouples). Les flèches en rouge indiquent les couplages électriques qui ont été ajoutés pour fermer le circuit. Les flèches en bleu indiquent l'entrée de courant (flèche à droite) et la mise à terre (flèche à gauche).

Après les vérifications, on obtient que le facteur de relation entre les puissances de sortie des deux modèles ne devrait pas être exactement 4, sinon qu'il devrait être plutôt de 4.03. Ceci peut s'expliquer de deux façons; d'une part, le quart de module ne recrée pas tout à fait le circuit électrique, ni les matériaux d'un module complet. Par exemple, si l'on met un miroir sur le quart de module à l'endroit où le premier plan de coupe a été appliqué, on verra la géométrie recréée, mais les pattes reflétées dans le miroir auraient le même type de matériau semi-conducteur que les pattes en face d'elles. Cela veut dire qu'on aurait des couples dans lesquels les deux pattes auraient le même type de matériau semi-conducteur soit P où N, ce qui ne s'applique pas à la réalité où il faut avoir toujours des couples de matériaux semi-conducteurs de deux types différents pour que l'effet Seebeck soit présent. De plus, comme il a déjà été mentionné, ce plan de coupe divise le circuit électrique en 5 circuits indépendants qui ne permettent pas de

reproduire exactement le circuit à l'intérieur du module. Pour corriger les deux problèmes, des connexions complémentaires (conditions de couplage) ont été créées aux extrémités où le plan a découpé le module. Ces connexions, en plus de reconnecter le circuit électrique, ont permis de recréer les thermocouples avec une patte de chaque type de matériau semi-conducteur.

D'autre part, dans le quart de module, on a enlevé une patte pour connecter l'entrée de courant, cela veut dire que si on reproduit quatre fois la même géométrie pour avoir le module complet on arriverait à un module avec quatre pattes de moins, ce qui ne représente pas la réalité d'un module complet.

Une autre variation qui a été introduite dans le quart de module et qui ne représente pas exactement la réalité sont les entrées et sorties du courant du module qui ont été mises dans le même quart de module.

Dans la figure 3-4, les conditions de couplage étiquetées avec les lettres A-D, ainsi que les connexions de courant à l'entrée et à la sortie du quart de module sont montrées.

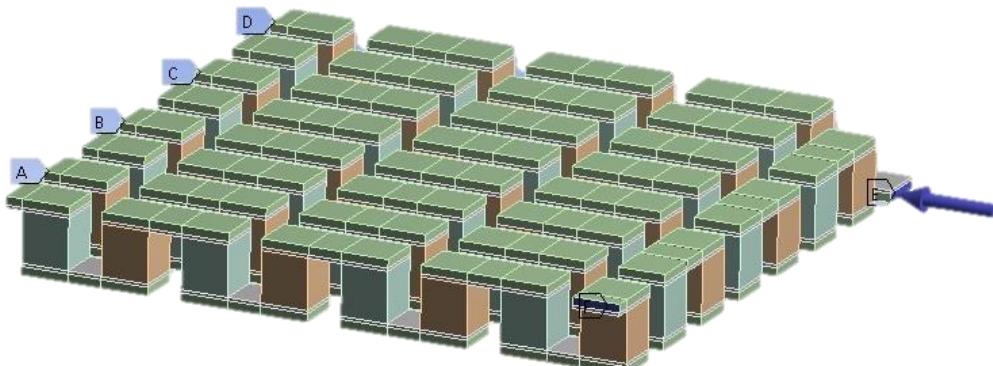


Figure 3-4: Conditions de couplages A-D et connexions à l'entrée et à la sortie de courant créées sur le quart de module. En bleu les pattes de type P et en brun les pattes de type N. Les plaques céramiques ont été masquées pour faciliter la visualisation.

L'ensemble des couplages et connexions ont permis de simuler assez bien le circuit réel du module complet; néanmoins il a fallu calculer le facteur de relation entre les puissances de sortie du module complet et du quart de module et introduire la valeur de 4.03 dans nos calculs pour arriver à avoir un quart de module standard qui soit une excellente source d'information avec une grande précision sur le comportement du module complet.

3.1.2 Modèle en éléments finis

Une fois que la géométrie a été générée et que le modèle en éléments finis a été créé, une étude de convergence a été développée afin d'établir le maillage le plus approprié pour le modèle. Cependant, étant donné que les thermo-éléments (pattes), les soudures et les plaques de cuivre supportent des contraintes mécaniques plus élevées que les plaques céramiques et qu'on s'intéresse à évaluer la résistance du module aux contraintes générées lors de la mise en opération, deux tailles d'éléments ont été choisies; une pour les thermo-éléments, les soudures et les plaque de cuivre et une autre pour les plaques céramiques. Cette différence de taille nous a mené à un problème, les nœuds aux coins des plaques de cuivre ne coïncidaient pas avec les nœuds de la plaque céramique, ce qui pouvait engendrer des erreurs ou des manques de précision dans le calcul. Pour résoudre ce problème, un pré-maillage a été fait manuellement en utilisant des plans de coupe, pour assurer que les nœuds au coin des plaques de cuivre soient en contact avec des noeuds de la plaque céramique.

Une fois que le pré-maillage a été créé, un premier maillage hexaédrique automatique a été lancé, puis la taille des éléments a été modifiée (diminuée) de façon à augmenter le nombre de nœuds dans le module par tranches de 100 000 nœuds, jusqu'au moment d'arriver à la convergence.

L'étude a démontré qu'une fois que le maillage total dépasse les 490 000 nœuds, la précision des résultats varie de moins de 5% pour chaque 100 000 nœuds ajoutés tandis que le temps de calcul augmente de 20%. Alors une fois qu'on a dépassé les 490 000 nœuds on s'est arrêté parce que le gain en précision au-delà de cette valeur ne justifie pas l'augmentation dans le temps de calcul. Finalement, un maillage hexaédrique avec 80 252 éléments et 497 000 nœuds a été retenu pour le modèle standard (quart de module). En respectant les résultats de l'étude de convergence, la taille plus petite de 0.18 mm a été choisie pour les thermo-éléments et les soudures, tandis qu'une taille maximale de 0.7 mm a été choisie pour les plaques céramiques. La figure 3-5 montre un exemple du pré-maillage fait manuellement et aussi du maillage retenu.

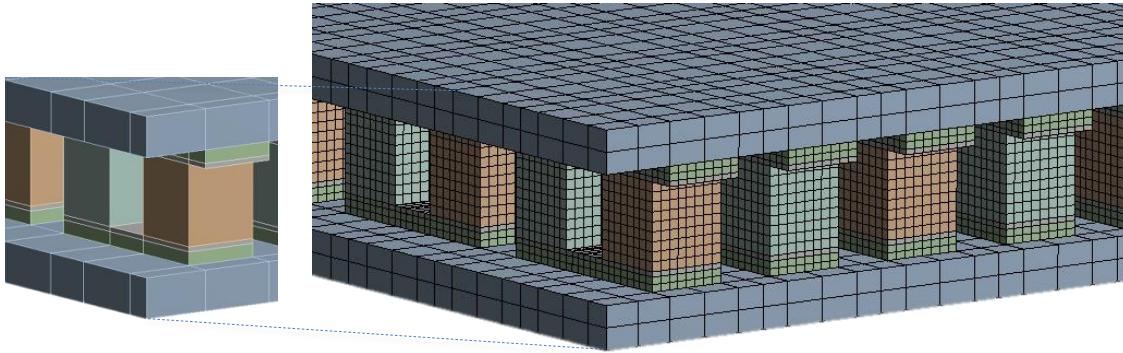


Figure 3-5: Illustration du pré-maillage et du maillage hexaédrique appliqués au modèle. Une taille de 0.18 mm a été choisie pour les thermo-éléments, les conducteurs de cuivre et les soudures, tandis qu'une taille de 0.7 mm a été choisie pour les plaques céramiques pour avoir un total de 497 000 nœuds dans le modèle.

3.1.3 Modèle proposé

Les conditions initiales qui seront expliquées dans la section 4.3.1 ont été imposées de façon à lancer le premier calcul pour vérifier que le module fonctionne et que les valeurs d'efficacité et de puissance correspondent bien à celles du module complet.

Après avoir finalisé et résolu le modèle du module standard, la conception des autres modèles a pu être débutée. Deux autres géométries ont été développées en cherchant à créer un modèle plus performant que ceux qu'il est possible de trouver sur le marché. Les évaluations de performance ont été basées sur l'efficacité du module ainsi que sur la puissance de sortie. La modification sur la géométrie, plus spécifiquement une segmentation des pattes, a été faite afin de varier la longueur relative des segments et de combiner différents matériaux pour essayer de développer un module plus efficace, ainsi que pour tirer le plus de puissance possible.

Pour donner suite à cette idée, le module segmenté symétrique (SS) a été développé. Initialement, pour se plonger dans l'univers des modules segmentés, on a reproduit le travail de [4] pour avoir une base de comparaison de nos résultats après avoir défini le modèle. Pour générer le module SS, le point de départ a été d'utiliser la même géométrie que celle du module standard à laquelle on a ajouté un plan de coupe, parallèle aux plaques céramiques. Ce plan avait pour fonction de segmenter toutes les pattes à la même hauteur puis un autre plan de coupe, parallèle au premier, a été créé pour ajouter une couche de soudure entre les segments de pattes.

Une fois que les pattes sont segmentées, il est possible de combiner deux matériaux P ou deux matériaux N (selon le cas) dans chaque patte. L'ensemble est montré à la figure 3-6.

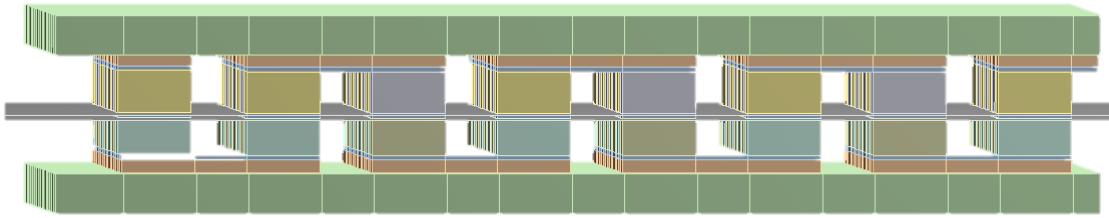


Figure 3-6: Création du module segmenté symétrique. En gris les deux plans de coupe utilisés pour segmenter les pattes à deux points différents de façon à simuler une couche de soudure entre les deux segments de pattes. Chaque couleur indique un matériau différent.

Les conditions initiales (plage de température et courant) ont été imposées et le premier calcul est lancé pour vérifier que le module fonctionne et que nos résultats sont comparables à ceux de [4]. Après avoir finalisé et vérifié la cohérence des résultats du module symétrique (SS), un nouveau modèle a été créé. Le développement de ce dernier modèle est l'objectif principal de ce travail, dans lequel se trouve l'originalité de ce projet. Ce modèle, appelé module segmenté asymétrique ASS, permet de combiner quatre matériaux semi-conducteurs différents pour profiter au maximum du profil thermoélectrique de chaque matériau. Pour concevoir le modèle, on a utilisé le même principe que pour le module SS, sauf que cette fois-ci, quatre plans de coupe différents ont été utilisés, deux pour les pattes de type P et deux pour les pattes de type N. De cette façon, la longueur relative de chaque type de patte peut varier de façon indépendante, cette variation par rapport au module SS donnant de la souplesse et de l'adaptabilité au modèle, permettant ainsi d'utiliser différentes portions de matériau dans chaque patte en fonction de la performance thermoélectrique des matériaux. Un aperçu du module ASS est montré dans la figure 3-7.

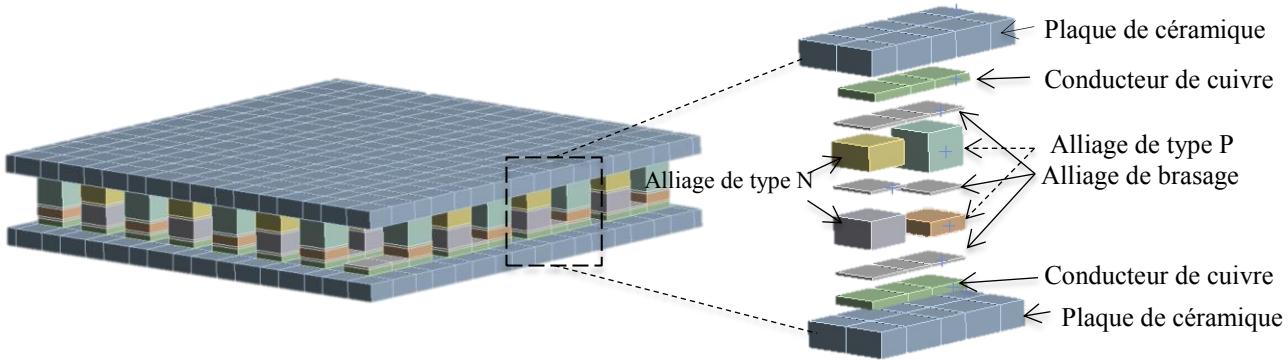


Figure 3-7: Représentation de la géométrie et les matériaux constituant le modèle du module segmenté asymétrique (ASS).

3.2 Choix des matériaux

Comme il a été vu dans la première partie de ce document (section 2.4), les matériaux visant à constituer les modules jouent un rôle très important dans la performance d'un module thermoélectrique; pour cette raison les matériaux doivent être choisis en fonction des caractéristiques d'opération du module à construire. Dans la présente étude, on prévoit concevoir un module qui soit fonctionnel pour des températures entre 20°C et 170°C. Comme il a été expliqué aussi dans la section 2.4, les matériaux ayant une meilleure performance autour de la température de la pièce sont des alliages à base de tellurure de bismuth. Étant donné que dans le groupe de recherche sur la thermoélectricité à Polytechnique Montréal il y a une longue histoire de recherche autour de ce type d'alliages, une minutieuse sélection des matériaux a été effectuée en utilisant les bases de données du groupe.

Les courbes ZT de plusieurs matériaux ont été tracées afin de trouver l'alliage le plus performant dans la plage de température choisie. Tous les alliages montrés ici appartiennent à la famille du tellurure de bismuth dont la composition est montrée dans le tableau suivante. Les différences entre leur performance ZT est le résultat du pourcentage de dopant utilisé ainsi que des autres facteurs qui peuvent affecter l'extrusion. Néanmoins, un numéro est assigné à chaque matériau en fonction de l'ordre d'extrusion.

Tableau 3-3: Composition des alliages utilisés pour le projet.

| Type d'alliage | Composition de base | Composition du Dopant / pourcentage |
|--------------------|--|-------------------------------------|
| Matériaux P | $(Bi_{0.2}Sb_{0.8})_2Te_3$ | $Sb / 0.04\% \sim 0.064\%$ |
| Matériaux N | $(Bi_{0.95}Sb_{0.05})_2(Se_{0.95}Te_{0.05})_3$ | $SbI_3 / 0.04\% \sim 0.064\%$ |

Les figures 3-8 et 3-9 montrent respectivement, les courbes pour les matériaux de type P et de type N. Dans ces figures les symboles correspondent aux résultats de mesures expérimentales et les lignes correspondent à un lissage par un polynôme.

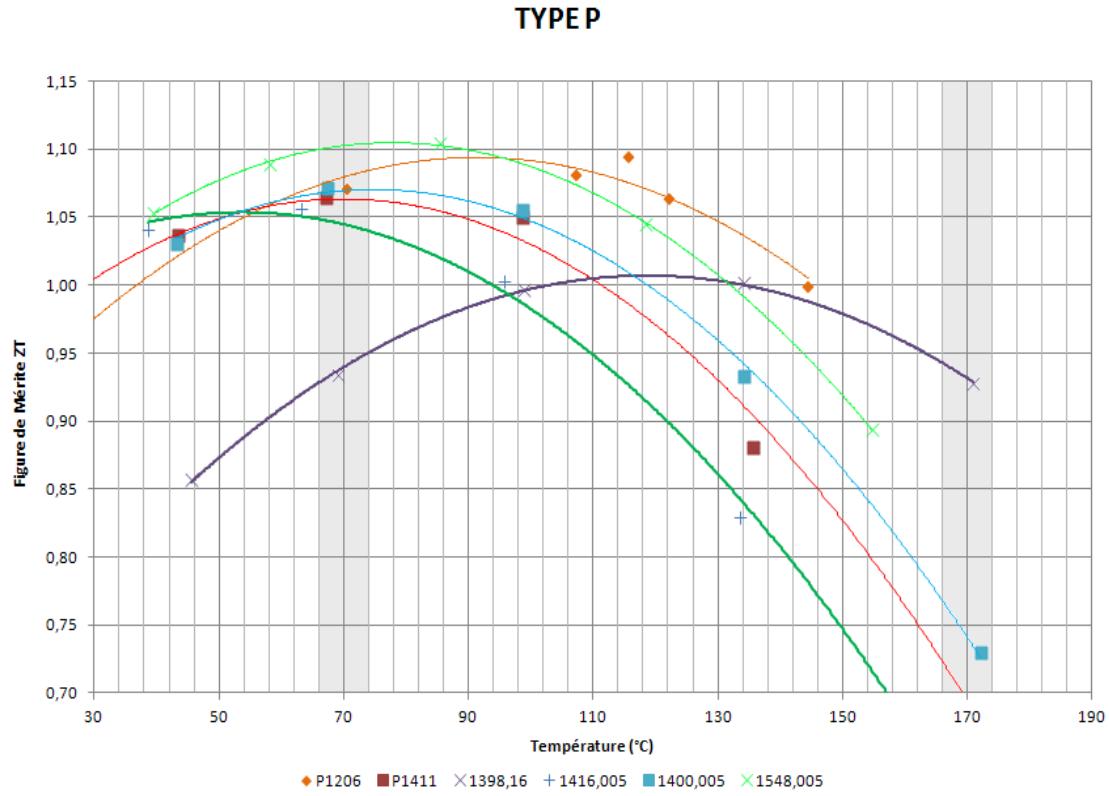


Figure 3-8: Figure de mérite pour une sélection d'échantillons de type P ayant le maximum de performance TE dans la plage de températures entre 50°C et 170°C. Dans la figure les points correspondent à des valeurs expérimentales tandis que les lignes correspondent à des courbes de tendance.

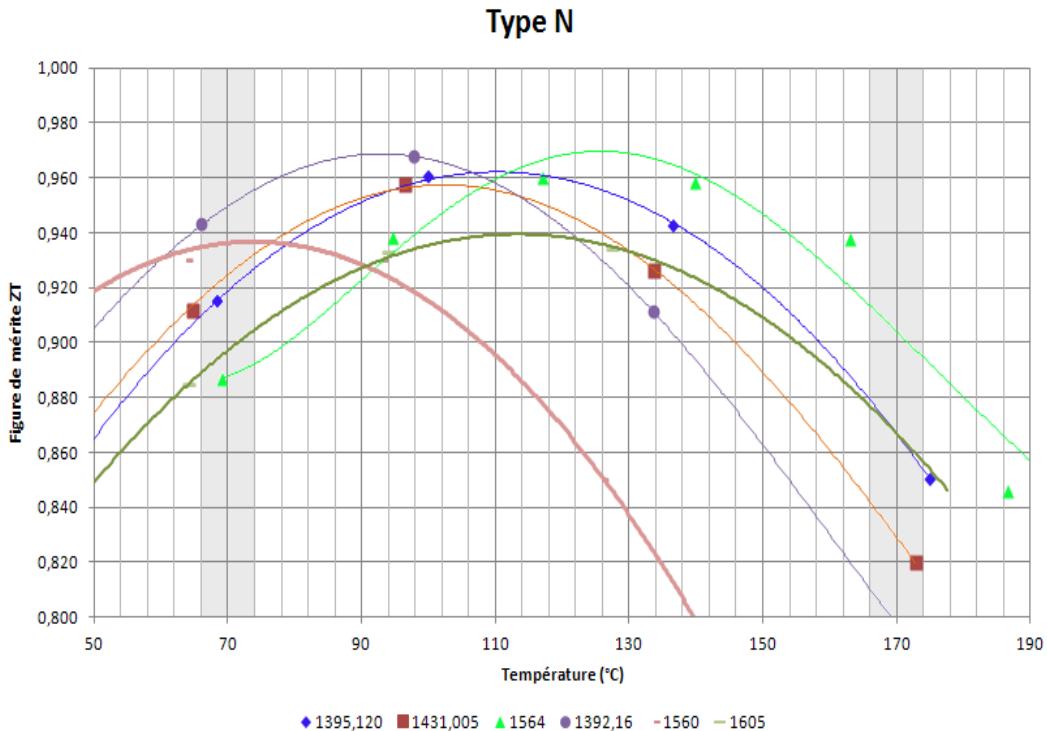


Figure 3-9: Figure de mérite pour une sélection d'échantillons de type N ayant le maximum de performance TE dans la plage de températures entre 50°C et 170°C.

Comme on peut l'observer dans les courbes, il y a des matériaux qui ont leur valeur maximale de performance à des températures inférieures à 90°C; ces matériaux avec basse résistivité seront appelés matériaux froids dans le reste de ce document. De la même façon, les matériaux qui ont leur valeur maximale de performance à des températures supérieures à 90°C, seront appelés matériaux chauds, comme on avait déjà mentionné ces différences dans la performance ZT des matériaux obéi à des différences dans le pourcentage du dopant ainsi que à d'autres facteurs associés aux conditions dans lesquelles l'extrusion a été faite.

Compte tenu la géométrie proposée, on a besoin de deux matériaux froids (un de type N et un de type P) et deux matériaux chauds. Après avoir comparé les performances de plusieurs échantillons produits à Polytechnique, on a choisi les matériaux en fonction de deux critères. D'abord on a cherché des matériaux assez performants, après on a cherché aussi que les maxima de performance pour les matériaux froids et chauds dans chaque type de matériau ne se chevauchent pas entre eux. Cela veut dire qu'on a cherché des matériaux performants mais avec de pics de performance bien séparés, de façon à ce qu'on puisse vérifier si la combinaison dans une segmentation asymétrique est vraiment avantageuse. La figure de mérite pour les quatre

matériaux qui ont été choisis est montrée à la figure 3-10.

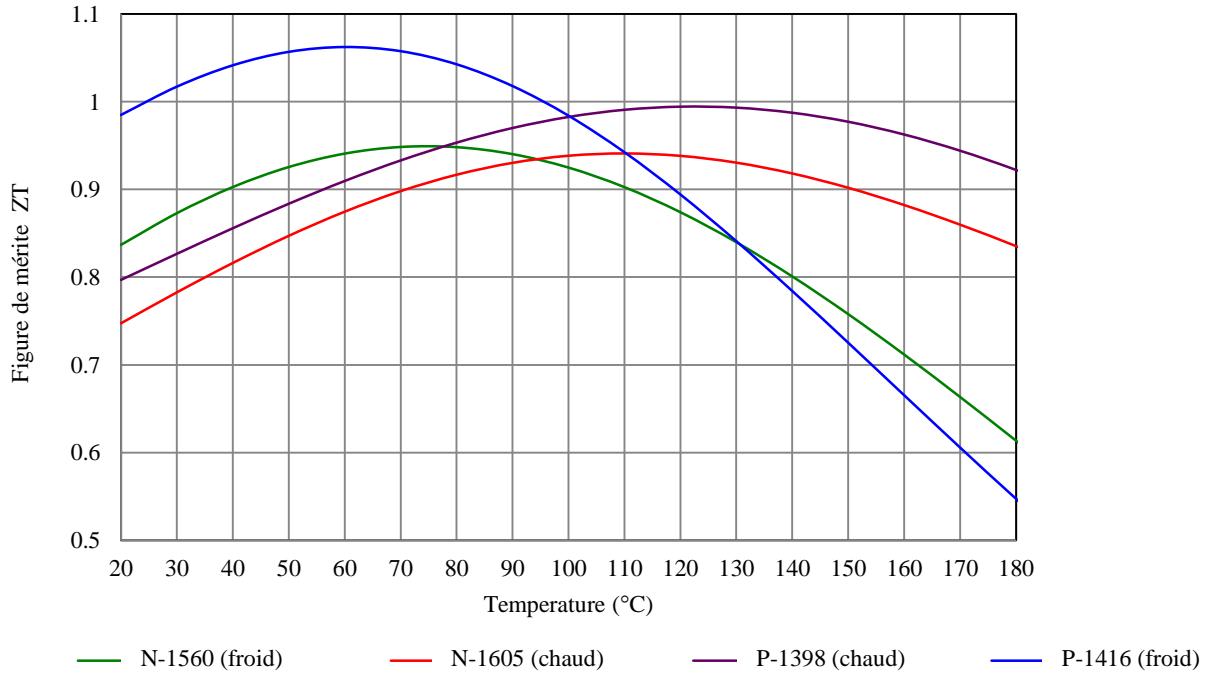


Figure 3-10: Figure de mérite pour les matériaux choisis, construite à partir de donnés de polynômes tirés des mesures expérimentales.

Les matériaux montrés dans les figures 3-7 à 3-10 ont été extrudés et complètement caractérisés au laboratoire de thermoélectricité de Polytechnique. Les caractéristiques physiques et thermoélectriques des matériaux choisis pour les pattes, ainsi que les matériaux choisis pour les autres composants du module (plaques, conducteurs et alliage de brasage) ont été extraits de la base de données du groupe, déjà utilisés par Picard et coll. [4], puis ont été introduites dans la bibliothèque des matériaux du logiciel ANSYS pour la simulation numérique. Le tableau suivant regroupe l'ensemble des propriétés nécessaires à la simulation du module.

Tableau 3-4 : Propriétés des matériaux [4]

| Propriété | Plaques de céramique | Conducteurs de cuivre | Alliage de brasage (95%Sn-5%Sb) | Pattes | |
|--|-------------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|-----------------------|------------------------------|
| | | | | P-Type | N-Type |
| CTE (10^{-6} K^{-1}) | 4.89 – 6.03 Entre -50°C et 190°C | 16.7 – 17.3 Entre -50°C et 190°C | 19.2 – 27.7 Entre -50°C et 190°C | Axial Radial | 14.0 18.6 13.9 16.8 |
| Conductivité thermique (W/m·K) | 37.7 – 25.8 Entre 20°C et 150°C | 398 - 391 Entre 20°C et 150°C | 55 Entre 20°C et 150°C | 1.22 – 1.37 | 1.78 – 1.98 |
| | | | | Entre 20°C et 120°C | |
| Résistivité (Ohm m) | | 1.74 E08 | 1.45 E07 | 1.28 E-05 – 2.12 E-05 | 9.56 E-06 – 1.35 E-05 |
| | | | | Entre 20°C et 120°C | |
| Module d'Young | 380 | 115 | 50 | 45* | 48* |
| Coefficient de Poisson | 0.26 | 0.31 | 0.34 | 0.28 | |
| Contrainte limite (MPa) | - | 70 | 15 | | |
| Densité (kg/m³) | 3970 | 8940 | 7260 | 6858 | 7858 |

3.3 Résolution et optimisation

Le logiciel ANSYS a été choisi parce qu'il est capable de combiner une analyse thermoélectrique et une analyse thermomécanique dans le même projet, tout en permettant de combiner les paramètres d'entrée et de sortie des deux analyses dans un module d'optimisation pour atteindre un objectif précis, dans notre cas, maximiser la puissance de sortie ainsi que l'efficacité du module complet. Dans la figure 3-11, le schéma du projet est montré..

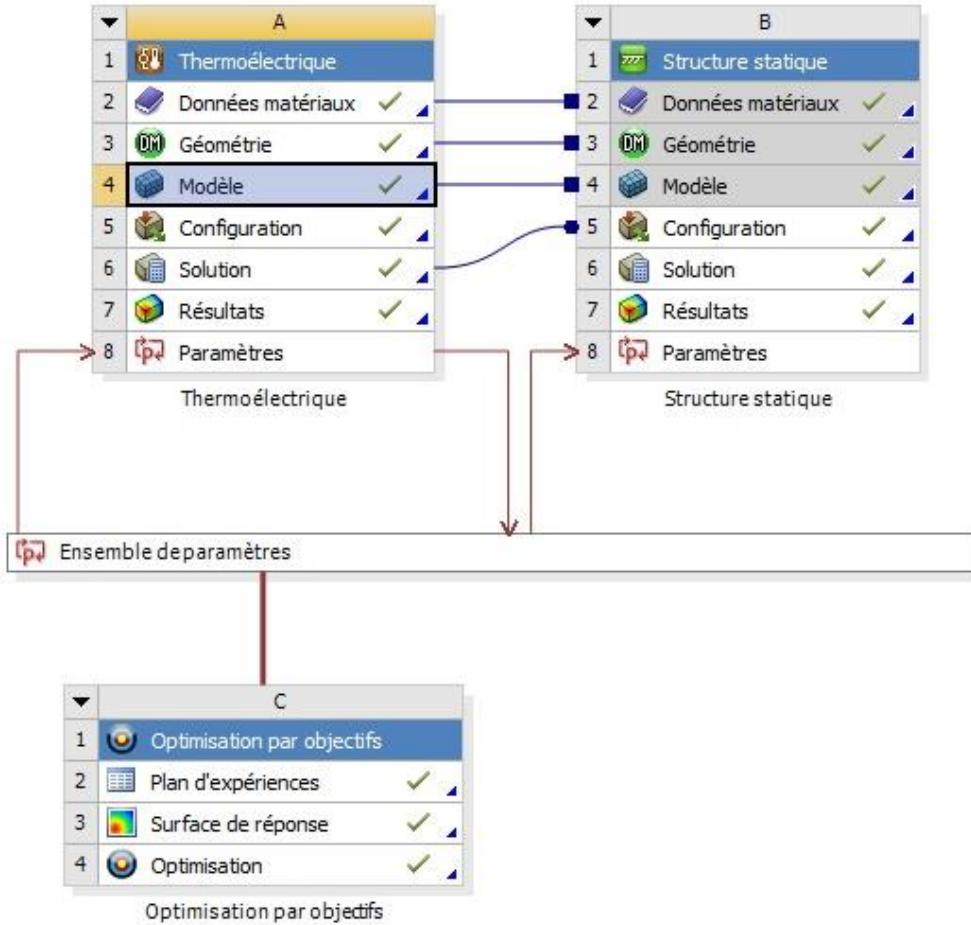


Figure 3-11: Modules d’analyse du projet, combinés dans ANSYS Workbench.

Dans la suite du document, chaque partie du projet sera expliquée séparément afin de donner au lecteur une idée claire du processus de résolution et d’optimisation dans le logiciel.

3.3.1 Analyse thermoélectrique (A)

Dans cette partie du projet on introduit les matériaux, on construit la géométrie telle qu'il a été expliqué au début du chapitre et une fois que la modélisation des modules est terminée, une différence de température de 150°C est imposée pour la mise en opération. Le côté froid de chaque module a été mis à la température de la pièce (20°C) et le côté chaud a été mis à 170°C. Une patte de type N à l'extrémité du module a été mise à la terre, comme voltage de référence, un courant initial a été imposé à travers l'autre extrémité et quatre couplages ont été créés pour fermer le circuit électrique du côté où le plan de coupe a coupé les conducteurs de cuivre (voir figure 3-5). À cette étape, la valeur du courant a été choisie de façon arbitraire en suivant les

valeurs rapportées dans la littérature [3, 4, 27], puis la valeur optimale du courant pour notre modèle a été trouvée et ajustée dans la partie d'optimisation. Toutes les grandeurs imposées à cette étape (courant et température) ont été considérées comme constantes et uniformes pour le calcul.

Pour les paramètres de sortie, on s'est intéressé à la tension de sortie, pour le calcul de puissance, et à la chaleur maximale traversant le module pour le calcul de l'efficacité du module.

3.3.2 Analyse thermomécanique (B)

Pour cette partie, le logiciel permet de partager les données de matériaux, la géométrie et le modèle physique de l'analyse thermoélectrique (Fig. 3-11 liens en bleu). De plus, le gradient de température à travers le module obtenu lors de l'analyse thermoélectrique est importé et est utilisé pour évaluer les déformations dues à l'expansion thermique et les contraintes induites par les coefficients d'expansion différents de chaque matériau. Par la suite, un support rigide a été fixé à l'extrémité du module correspondant au centre du module complet, pour restreindre le déplacement vertical du module. Bien qu'on ait utilisé des conditions de symétrie, elles n'ont pas suffi pour contraindre tous les degrés de liberté. Effectivement, le premier plan de symétrie a limité le déplacement en X et les rotations en Y et en Z, tandis que le deuxième plan a limité le déplacement en Y et les rotations en X et Z. Cela veut dire que le déplacement dans la direction verticale est le seul degré de liberté n'ayant pas été restreint par les plans de symétrie imposés au début. Le support fixe a donc été ajouté, pour limiter le déplacement dans cette direction, au nœud qui se trouve dans le coin du quart de module à l'endroit où le centre du module complet se trouvait.

Le sommet où le support a été fixé, ainsi que l'axe central du module, ont été utilisés après comme point de référence pour mesurer la déformation du module.

Comme paramètres de sortie, on s'est intéressé principalement aux contraintes thermiques en termes de la contrainte équivalente σ_v ou contrainte de Von Mises, parce que elle nous permette d'avoir une estimation du niveau de contrainte moyen dans chaque composant du module et de cette façon vérifier leur résistance mécanique; compte tenu qu'il a été rapporté dans la littérature [14, 26] que les contraintes mécaniques induites pour le gradient de température peuvent provoquer des fissures et même des fractures dans les thermo-éléments.

De plus, on s'intéresse aussi au phénomène de plasticité dans les conducteurs de cuivre et la soudure [27]. Un critère de Von Mises supérieur ou égale à la limite élastique, permettrait de considérer qu'il y a plastification. La contrainte de Von Mises est obtenue à partir du second invariant du déviateur du tenseur des contraintes comme suit [31] :

$$\sigma_v = \sqrt{\frac{(\sigma_{11}-\sigma_{22})^2 + (\sigma_{22}-\sigma_{33})^2 + (\sigma_{33}-\sigma_{11})^2 + 6(\sigma_{12}^2 + \sigma_{23}^2 + \sigma_{31}^2)}{2}} \quad 3.1$$

où les composants σ_{ij} sont les éléments du tenseur de contrainte.

On doit aussi à considérer dans ce travail, la déformation verticale du module rapportée par [26, 27], laquelle est due à la différence de température entre les côtés du module. Compte tenu que les côtés froid et chaud du module sont faits du même matériau, et que l'expansion thermique d'un matériau dépend de leurs caractéristiques propres, ainsi que de l'incrément de température, on peut déduire que du côté froid il n'y a pas d'expansion thermique, tandis que du côté chaud, il y en a une. Cette différence dans les dimensions des plaques de céramique exposées à des températures différentes génère la déformation.

3.3.3 Optimisation (C)

Dans cette partie de l'analyse, le logiciel permet de construire un plan d'expérience avec un objectif fixe, puis de choisir les variables à fixer et celles à faire varier, jusqu'à l'obtention des conditions qui peuvent permettre d'atteindre l'objectif fixé. Dans cette étape, compte tenu que notre objectif est de trouver les conditions pour avoir un maximum d'efficacité et un maximum de puissance en même temps; le courant et la longueur relative des segments de pattes ont été variés; tandis que la plage de température a été fixée parce que les matériaux thermoélectriques utilisés dans la conception du module ont été choisis en fonction de cette plage.

À l'intérieur du plan d'expérience, le logiciel permet aussi de choisir le nombre de fois où on veut faire le calcul (points de conception); à chaque fois, il y a une valeur de courant et une valeur de la longueur du premier segment de chaque type de patte différents. Alors chaque fois que le calcul est lancé il y a trois variables à considérer (le courant, la longueur du premier segment de patte P et la longueur du premier segment de patte N), les valeurs des variables peuvent être remplies à la main ou peuvent être générées automatiquement par le logiciel de

façon aléatoire à partir d'un intervalle défini par l'utilisateur pour chaque variable. Dans ce dernier cas, on doit alors définir une valeur minimale et une valeur maximale pour chaque variable, ensuite le logiciel choisit aléatoirement à l'intérieur de l'intervalle, autant de valeurs que définies précédemment. Ainsi, par exemple dans le cas du courant on a défini $I_0 = 0$ et $I_{max} = 3.5$ A, puis le logiciel a trouvé de façon aleatoire 15 valeurs de courant entre 0 et 3.5 A. La figure 3.12 illustre la formation du plan d'expériences.

| Arborescence de Schéma C2: Plan d'expériences | | |
|---|--|-------------------------------------|
| | A | B |
| 1 | | Activé(e) |
| 2 | <input checked="" type="checkbox"/> Plan d'expériences | |
| 3 | <input type="checkbox"/> Paramètres d'entrée | |
| 4 | <input type="checkbox"/> Thermoelectrique (A1) | |
| 5 | <input type="checkbox"/> P1 - Longueur_total_patte | |
| 6 | <input type="checkbox"/> P13 - Patte_P | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 7 | <input type="checkbox"/> P14 - Patte_N | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 8 | <input type="checkbox"/> P15 - Courant Intensité | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 9 | <input type="checkbox"/> Paramètres de sortie | |
| 10 | <input type="checkbox"/> Thermoelectrique (A1) | |
| 11 | <input type="checkbox"/> P3 - Sonde de réaction Chaleur maximale | |
| 12 | <input type="checkbox"/> P4 - Sonde de tension Tension maximale | |
| 13 | <input type="checkbox"/> P10 - Puissance 1/4 | |
| 14 | <input type="checkbox"/> P11 - Puissance total | |
| 15 | <input type="checkbox"/> P12 - Efficacité | |
| 16 | <input type="checkbox"/> Graphiques | |
| 17 | <input checked="" type="checkbox"/> Paramètres en parallèle | |
| 18 | <input checked="" type="checkbox"/> Points de conception et Paramètres | |

| Table de Schéma C2: Plan d'expériences (Personnalisé + remplissage : Nombre total de points = 15) | | | | | | | | | | |
|---|-----------------------------|---------------|---------------|-----------------------------|---|--|---------------|---------------------------|------------------|--|
| | A | B | C | D | E | F | G | H | I | |
| 1 | Nom | P13 - Patte_P | P14 - Patte_N | P15 - Courant Intensité (A) | P3 - Sonde de réaction Chaleur maximale (W) | P4 - Sonde de tension Tension maximale (V) | P10 - 1/4 (W) | P11 - Puissance total (W) | P12 - Efficacité | |
| 2 | 1 | 0.53 | 0.2 | 1.8 | 25.24 | -0.84694 | 1.5245 | 5.4119 | 6.0399 | |
| 3 | 2 | 0.79 | 0.3 | 1.69 | 24.933 | -0.90816 | 1.5348 | 5.4485 | 6.1558 | |
| 4 | 3 | 1.073 | 0.38 | 1.63 | 24.927 | -0.93729 | 1.5278 | 5.4237 | 6.1291 | |
| 5 | 4 | 0.16684 | 1.3987 | 0.049055 | 16.621 | -1.7227 | 0.084506 | 0.3 | 0.50843 | |
| 6 | 5 | 0.47311 | 1.3802 | 3.4698 | 31.213 | 0.16089 | -0.55824 | -1.9817 | -1.7885 | |
| 7 | 6 | 1.3926 | 1.3674 | 0.035841 | 16.863 | -1.945 | 0.06971 | 0.24747 | 0.4134 | |
| 8 | 7 | 1.3734 | 1.021 | 3.48 | 32.655 | 0.31943 | -1.116 | -3.9462 | -3.4041 | |
| 9 | 8 | 0.11734 | 0.55042 | 0.013508 | 16.82 | -1.6844 | 0.022752 | 0.08077 | 0.13527 | |
| 10 | 9 | 0.77544 | 1.1466 | 1.3714 | 23.306 | -1.0708 | 1.4685 | 5.2132 | 6.301 | |
| 11 | 10 | 0.1035 | 0.66164 | 3.4738 | 31.078 | -0.0021246 | 0.0073805 | 0.026201 | 0.023748 | |
| 12 | 11 | 1.3773 | 0.16339 | 3.4319 | 32.559 | 0.18492 | -0.63462 | -2.2529 | -1.9492 | |
| 13 | 12 | 1.3867 | 0.13157 | 0.067564 | 17.675 | -1.8384 | 0.12421 | 0.44094 | 0.70273 | |
| 14 | 13 | 0.11415 | 1.0102 | 1.8338 | 24.973 | -0.79523 | 1.4583 | 5.1769 | 5.8394 | |
| 15 | 14 | 0.80813 | 0.57824 | 3.4038 | 31.717 | 0.033611 | -0.11441 | -0.40615 | -0.36071 | |
| 16 | 15 | 1.3921 | 1.3907 | 1.9112 | 26.397 | -0.68204 | 1.3035 | 4.6276 | 4.9382 | |
| * | Nouveau point de conception | | | | | | | | | |

| Propriétés de l'Arborescence A2: Design of Experiment | | |
|---|--|-------------------------------------|
| | A | B |
| 1 | Propriété | Valeur |
| 2 | <input type="checkbox"/> Points de conception | |
| 3 | Stocker les points de conception dans l'ensemble de paramètres | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 4 | <input type="checkbox"/> Plan d'expériences | |
| 5 | Type de plan d'expériences | Person... |
| 6 | Nombre total de points | 15 |

Figure 3-12: Plan d'expériences avec 15 points de conception. À gauche, il est possible de voir les paramètres d'entrée et de sortie de notre projet. Les variables choisies pour l'optimisation sont cochées, à gauche en bas le nombre de points de conception est montré. À droite, les colonnes en blanc montrent les valeurs d'entrée (les variables) et les colonnes en gris montrent les valeurs de sortie une fois que le calcul est terminé.

Chaque fois que le calcul est lancé pour un groupe de variables données (un point de conception), un groupe de valeurs de sortie est donné par le logiciel dont la tension, le flux de chaleur traversant le module et les contraintes de Von Mises dans chaque composant du module sont les plus intéressantes. Les valeurs des variables, ainsi que les valeurs de puissance et d'efficacité sont utilisées ensuite dans la surface de réponse, c.-à-d. qu'elles sont utilisées dans le logiciel pour tracer des fonctions de prédition des valeurs optimales de chaque magnitude qu'on veut maximiser en accord à l'objectif fixé, dans notre cas la puissance et l'efficacité.

Une étude a été faite pour vérifier quel est le nombre de points de conception optimal, afin d'obtenir le plan d'expérience le plus approprié; cela veut dire le nombre de valeurs de puissance et efficacité dont on a besoin pour que le logiciel trace des fonctions le plus proche de la réalité, de façon à ce que les prédictions effectuées à partir de ces fonctions soient les plus fiables possible.

Il a été trouvé que les résultats de l'optimisation ne varient pas significativement, si le nombre de points de conception dans le calcul est supérieur à 15, tandis que le temps de calcul est augmenté considérablement, pour cette raison on a travaillé avec 15 points de conception pour chacune des analyses faites dans notre projet. Après la formation du plan d'expérience et à l'intérieur de la surface de réponse, une méthode d'estimation doit être choisie, parmi cinq options différentes imposées par le logiciel. L'objectif de cette méthode est de prendre les données obtenues dans le plan d'expérience et de tracer des fonctions d'interpolation pour pouvoir après prédire les conditions pour atteindre notre objectif d'optimisation.

Au début du projet, la méthode des polynômes du second degré a été choisie, mais plus tard cette méthode a été abandonnée due à l'imprécision de ses résultats. Après l'évaluation de chacune des méthodes et une consultation de la littérature, la méthode de krigeage a été adoptée pour tout le reste du projet parce que c'est la méthode d'interpolation et d'extrapolation plus précise dans un sens statistique [32], due à la qualité des approximations et à la cohérence de ses résultats. En plus, la méthode de krigeage a la qualité d'être exacte dans un point de conception, plus grande est la quantité de points calculés, plus exacte sera la fonction extrapolée [33].

CHAPITRE 4 RÉSULTATS ET DISCUSSION

Dans ce chapitre, on présentera les résultats des simulations numériques obtenus tout au long du projet. D'abord on fera l'analyse de la performance thermoélectrique des quatre modules simulés, en comparant la puissance de sortie de chacun d'entre eux ainsi que leur efficacité, ensuite on parlera brièvement de leur comportement thermomécanique ainsi que de leur résistance aux contraintes de Von Mises et finalement on évaluera la déformation du module complet à partir de notre quart de module. Quelques-uns de ces résultats (section 4.1.1) ont déjà été présentés dans le cadre de la conférence « Materials Science & Technology 2013 Conference and Exhibition » et font partie d'un article publié (en DVD) dans le compte rendu de la conférence.

4.1 Résultats de la simulation

4.1.1 Analyse de la performance thermoélectrique

Dans des conditions normales d'opération, un MGT est capable d'utiliser une différence de température pour produire une f.e.m. La magnitude de la f.e.m. est utilisée pour déterminer la puissance de sortie du module qui après est utilisée pour déterminer son efficacité. Dans ce projet, comme on l'a déjà mentionné à la section 3.3.1, la performance thermoélectrique de chaque module a été établie en fonction de leur efficacité. Comme on avait aussi mentionné, trois géométries ont été développées pour comparer leurs performances et quatre matériaux différents, deux de type P et deux de type N, ont été choisis pour constituer les pattes dans chaque modèle.

Étant donné que dans le modèle standard seulement deux matériaux, un de type P et un de type N, peuvent être combinés à la fois, deux modèles de module standard ont été développés afin d'évaluer les quatre matériaux: soit un module standard fait à partir des matériaux P et N, qui ont été appelés chauds, et un autre fait avec des matériaux qui ont été appelés froid dans le chapitre 3. L'objectif visé par la simulation de ces deux modèles a été de trouver celui qui est le plus performant lorsqu'on veut concevoir un module avec un seul matériau dans chaque patte. Tel qu'il a été déjà mentionné dans la section 2.4, il existe une dépendance directe entre la performance de chaque modèle et la performance thermoélectrique des matériaux, dans la plage de température choisie. La simulation a donc été orientée de telle sorte à profiter au maximum

des matériaux pour avoir le module standard le plus performant, cela veut dire celui dans lequel on peut avoir le maximum de puissance de sortie pour une différence de température imposée. Les figures 4-1 et 4-2 montrent une comparaison entre la performance thermoélectrique du module standard chaud et celle du module standard froid en termes de leur efficacité et de leur puissance de sortie. Dans tous les graphiques, les points correspondent à des données tirées de la simulation et les lignes à des courbes de lissage. Les intervalles de courant et de puissance et efficacité ont été réduits pour faire ressortir les différences entre la performance thermoélectrique des modules.

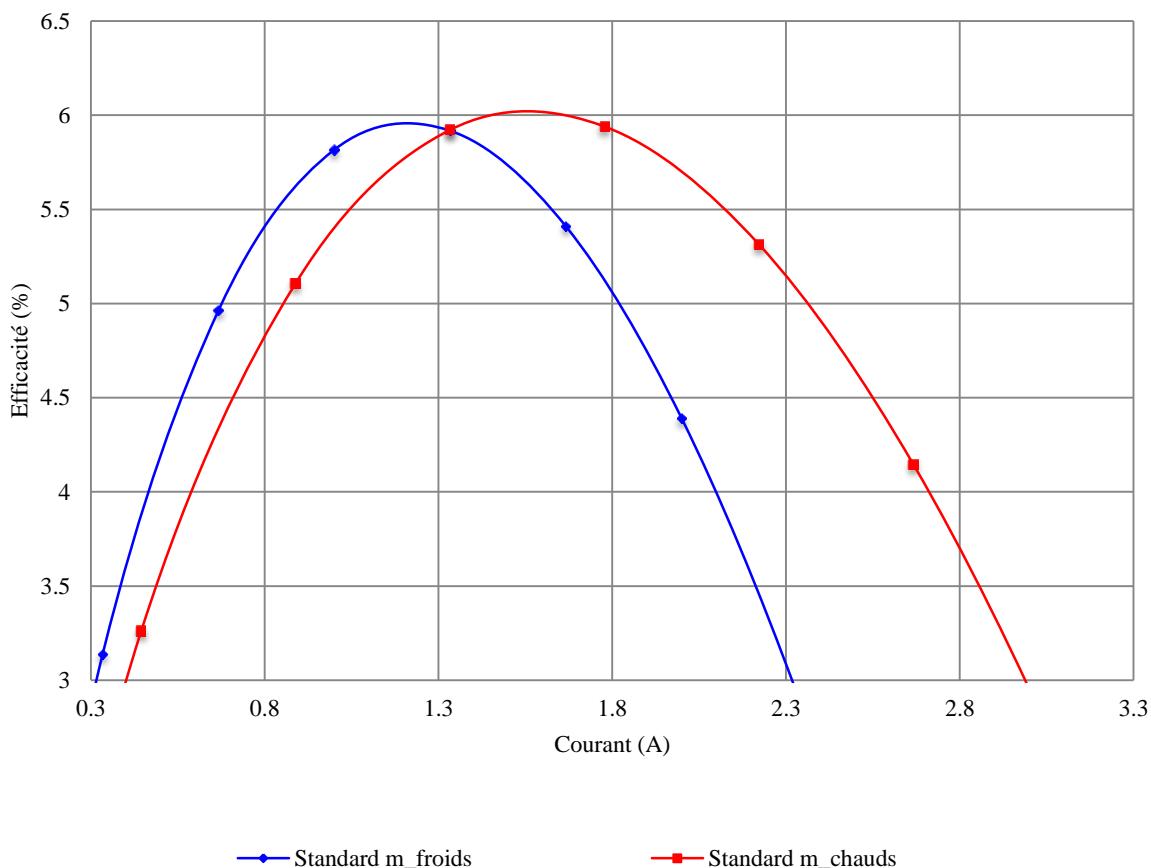


Figure 4-1: Comparaison de l'efficacité des modules standards. $\Delta T = 150^\circ\text{C}$ avec $T_f = 20^\circ\text{C}$, $I_0 = 0 \text{ A}$ et $I_{max} = 3.5 \text{ A}$.

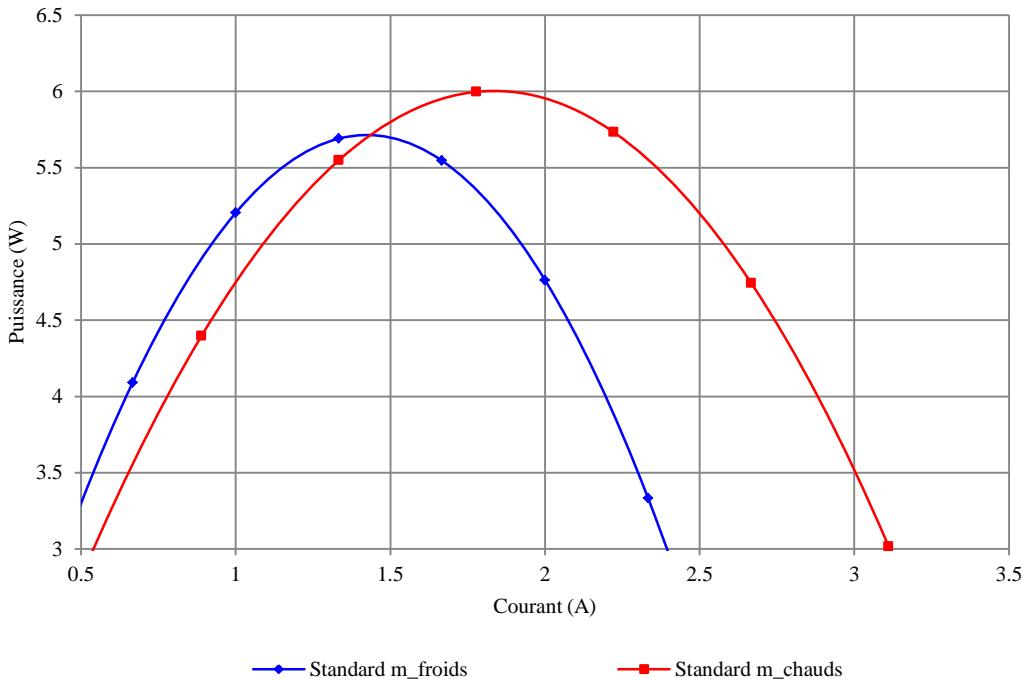


Figure 4-2: Comparaison de la puissance de sortie des modules standards avec $\Delta T = 150^\circ\text{C}$ avec $T_f = 20^\circ\text{C}$ et $I_0 = 0 \text{ A}$ et $I_{max} = 3.5 \text{ A}$.

La première remarque que l'on peut faire à partir de ces deux graphiques est que le maximum de l'efficacité et de la puissance ne se trouvent pas à la même valeur du courant, ce qui est normal compte tenu que le flux de chaleur qui traverse le module est fonction du courant, alors même si le ΔT est constant, le flux de chaleur ne l'est pas.

D'autre part, comme il est possible d'observer sur les deux graphiques, le module fait avec des matériaux chauds est un peu plus performant que celui fait avec des matériaux froids quand le module opère entre 20°C et 170°C ; cela veut dire que mis en opération dans la même plage de température, un module fabriqué avec des matériaux chauds sera de 0.4% plus efficace dans la transformation de chaleur en puissance électrique et produira environ 5% plus de puissance que le module fait à partir des matériaux froids. Étant donné que la géométrie des modules et leurs conditions d'opération sont exactement les mêmes, le seul facteur par lequel il est possible d'expliquer cette différence est la performance des matériaux. Effectivement, si on revient à la figure 3-10 il est clair que les matériaux qui ont été appelés froids ont des valeurs maximales de performance ZT plus élevées que celles des matériaux chauds. Néanmoins, si on observe le comportement des courbes tout au long de l'intervalle de température ($20^\circ\text{C} - 170^\circ\text{C}$), il est possible de trouver l'explication de la différence entre les performances des deux modules. Bien

que les matériaux froids présentent des pics de performance plus élevés que ceux des matériaux chauds, ils décroissent aussi plus rapidement et atteignent, dans l'intervalle de température choisi, des valeurs plus faibles.

Ainsi, le matériau P froid par exemple atteint une excellente valeur maximale de ZT de 1.05 à 60°C, mais à partir de 100°C cette valeur diminue rapidement pour finir avec une valeur de ZT de 0.65 à 170°C; tandis que, le matériau P chaud, bien qu'il ne soit pas aussi performant que le P froid, voit ses valeur de performance ZT dans l'intervalle choisi varier entre (0.8 et 0.98) signifiant qu'il présente une meilleure réponse face à la différence de température qui se traduit en une meilleure performance du MGT.

Afin de confirmer ces hypothèses pour expliquer les différences entre les performances des modules, la valeur moyenne de ZT a été calculée pour chacun des matériaux à partir des données de la courbe expérimentale, les résultats sont montrés ci-dessous.

$$\text{moyenne}(ZT)_{P-1416 \text{ (froid)}} = \frac{1}{150} \int_{20}^{170} ZT_{P-1416} dT = 0.92$$

$$\text{moyenne}(ZT)_{P-1398 \text{ (chaud)}} = \frac{1}{150} \int_{20}^{170} ZT_{P-1398} dT = 0.94$$

$$\text{moyenne}(ZT)_{N-1560 \text{ (froid)}} = \frac{1}{150} \int_{20}^{170} ZT_{N-1560} dT = 0.87$$

$$\text{moyenne}(ZT)_{N-1605 \text{ (chaud)}} = \frac{1}{150} \int_{20}^{170} ZT_{N-1605} dT = 0.89$$

Si on compare les valeurs moyennes des matériaux, on trouve qu'effectivement, tel qu'on l'avait prédit, le matériau de type P chaud est 2.2% plus performant que le matériau de type P froid, de même le matériau de type N chaud est 2.3% plus performant que le matériau de type N froid. Ces différences entre la performance moyenne des matériaux combinées à l'intérieur du module peuvent expliquer les différences entre les performances des deux modules standards (froid et chaud).

Pour surmonter la restriction que présentent certains matériaux quand on travaille avec des basses températures (entre 20°C et 170°C), une segmentation a été introduite dans le modèle standard afin de combiner deux matériaux différents dans chaque type de patte. Le modèle

segmenté symétrique a été créé selon les spécifications déjà montrées dans le chapitre 3, puis une boucle d'optimisation a été lancée, pour chercher la longueur idéale à laquelle les pattes devraient être segmentées. Comme la longueur totale de pattes (1.5 mm) ne varie pas, on fait varier la longueur du premier segment des pattes entre 0.1 mm et 1.4 mm. D'autre part, étant donné que la puissance maximale et l'efficacité maximale ne se trouvent pas à la même valeur de courant, on fixe un intervalle pour faire varier le courant en cherchant à avoir une valeur qui montre un compromis entre la meilleure valeur de puissance et celle d'efficacité. Pour ce faire, on fixe deux objectifs simultanément dans le module d'optimisation, soit la maximisation de la puissance de sortie et la maximisation de l'efficacité. Les résultats de l'optimisation sont montrés dans le tableau 4-1. Ici on montre les trois candidats (A, B et C) que le logiciel choisit comme les meilleurs résultats parmi lesquels nous devons choisir le plus approprié pour nos besoins. Chaque candidat correspond à un point de conception avec deux variables d'entrée (longueur du premier étage de patte et courant).

Tableau 4-1 : Résultats de l'optimisation du module SS avec $\Delta T = 150^\circ\text{C}$ à partir de la température de la pièce et $I_0 = 0 \text{ A}$ et $I_{max} = 3.5 \text{ A}$

| | 1 ^{er} segment de patte (mm) | Courant à puissance max. (A) | Chaleur à la surface chaude (W) | Tension à puissance max. (V) | Puissance max. (W) | Efficacité (%) |
|-------------------|---------------------------------------|------------------------------|---------------------------------|------------------------------|--------------------|----------------|
| Candidat A | 0.72 | 1.69 | 99.86 | 3.65 | 6.17 | 6.18 |
| Candidat B | 0.91 | 1.62 | 99.13 | 3.79 | 6.14 | 6.19 |
| Candidat C | 0.31 | 1.82 | 101.21 | 3.34 | 6.08 | 6.01 |

Pour ce travail, le candidat A a été choisi et la longueur du premier segment des pattes a été fixée à 0.7 mm, parce que cette segmentation montre la valeur de puissance la plus élevée avec l'une des meilleures valeurs d'efficacité. Une fois le candidat choisi, le calcul est lancé de nouveau en modifiant sur le module la longueur du premier segment de pattes selon les valeurs suggérées par le logiciel dans les résultats de l'optimisation (candidat A). Les résultats de son comportement thermoélectrique en comparaison avec celui du module standard sont montrés dans les figures 4-3 et 4-4.

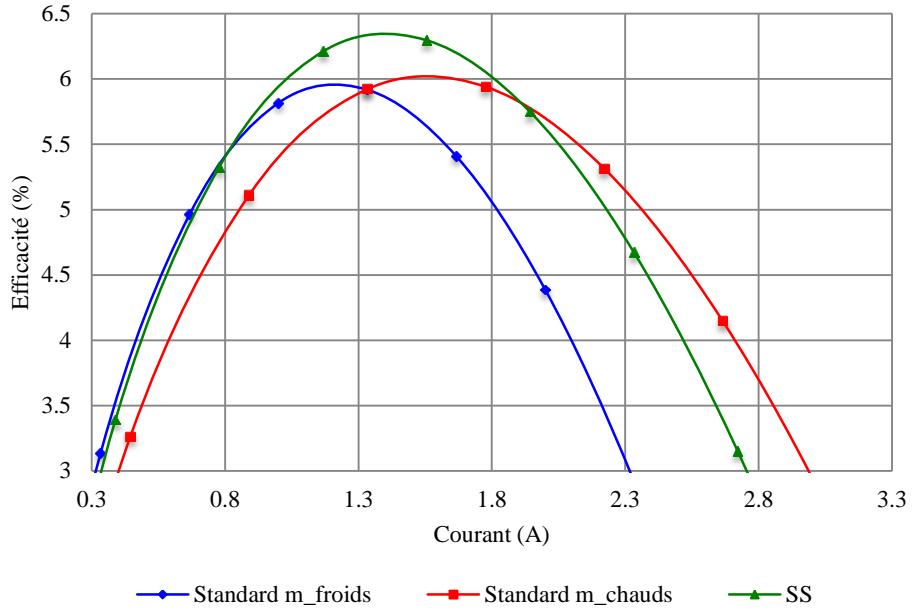


Figure 4-3 : Comparaison de l'efficacité en fonction du courant pour les trois modules thermoélectriques simulés, $\Delta T = 150^\circ\text{C}$ avec $T_f = 20^\circ\text{C}$, $I_0 = 0 \text{ A}$ et $I_{max} = 3.5 \text{ A}$. Longueur du premier segment de pattes pour le module SS, 0.7 mm. Les intervalles de courant et d'efficacité ont été réduits dans le graphique pour mieux mettre en évidence la différence entre les performances des trois modules.

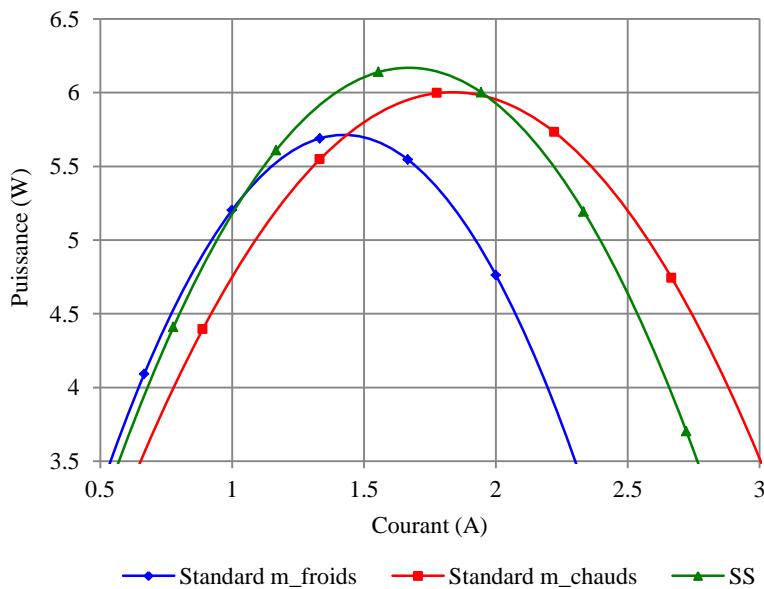


Figure 4-4 : Comparaison de la puissance thermoélectrique générée en fonction du courant pour les trois modules simulés, $\Delta T = 150^\circ\text{C}$ avec $T_f = 20^\circ\text{C}$, $I_0 = 0 \text{ A}$ et $I_{max} = 3.5 \text{ A}$.

Comme il est possible de l'observer sur les figures 4-3 et 4-4, la segmentation symétrique avec des longueurs de pattes de 0.7 mm pour le segment froid, augmente la performance thermoélectrique du module, soit son efficacité et sa puissance de sortie. D'une part, si on compare les valeurs maximales de puissance de sortie de tous les modules, il est possible d'observer que le module SS montre une augmentation de la puissance de sortie maximale de 8% par rapport au module standard fait des matériaux froids [4] et de 3% par rapport au module fait des matériaux chauds. D'autre part, si on compare les efficacités, on peut observer que la segmentation génère une augmentation de l'efficacité maximale du module SS de 6.4% par rapport au module standard fait des matériaux froids et de 6% par rapport au module fait de matériaux chauds.

Tel que mentionné dans le cas des modules standard, l'explication de ce fait peut se trouver dans la figure 3–10. Quand le module SS est observé en opération, il est possible de mesurer la valeur de la température aux extrémités de chacun des segments constituant les pattes (figure 4–5) et d'établir la plage de température dans laquelle chacun des deux alliages thermoélectriques travaille.

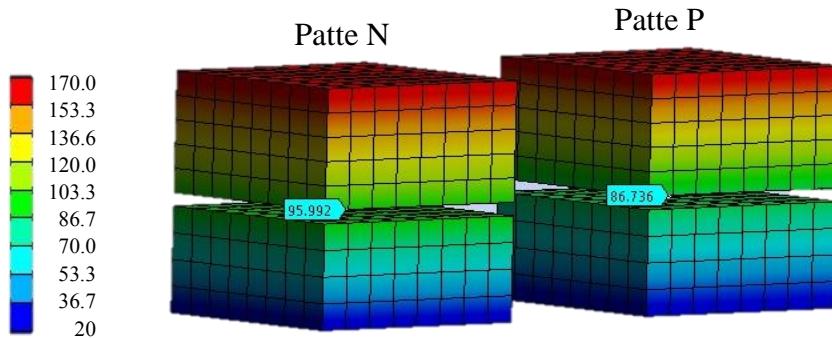


Figure 4-5 : Distribution de température dans deux pattes du module SS mis en opération avec $T_f = 20^\circ\text{C}$ et $T_c = 170^\circ\text{C}$. Segmentation avec une longueur de 0.7 mm du côté froid.

Ainsi, la jonction entre les deux segments de la patte P se trouve à une température d'environ 87°C tandis que la jonction de la patte N se trouve à 96°C .

Ces valeurs de températures ont été utilisées pour calculer la valeur moyenne de ZT de chaque matériau dans la nouvelle plage de température d'opération. Les résultats sont montrés ci-dessous.

$$\text{moyenne}(ZT)_{P-1416 \text{ (froid)}} = \frac{1}{67} \int_{20}^{87} ZT_{P-1416} dT = 1.04$$

$$\text{moyenne}(ZT)_{P-1398 \text{ (chaud)}} = \frac{1}{83} \int_{87}^{170} ZT_{P-1398} dT = 0.98$$

$$\text{moyenne}(ZT)_{N-1560 \text{ (froid)}} = \frac{1}{76} \int_{20}^{96} ZT_{N-1560} dT = 0.92$$

$$\text{moyenne}(ZT)_{N-1605 \text{ (chaud)}} = \frac{1}{74} \int_{96}^{170} ZT_{N-1605} dT = 0.91$$

Ce calcul nous permet d'observer que la segmentation améliore la performance thermoélectrique des modules parce qu'elle génère des plages de températures plus appropriées pour profiter au maximum de la performance des matériaux. Le matériau de type P froid, par exemple, montre une amélioration de sa performance moyenne du 13% grâce à la réduction de la plage de température d'opération résultant de la segmentation.

Si ces températures sont identifiées dans la figure 3-10, elles correspondent, dans le cas de la patte N, au point où le matériau N chaud dépasse en performance le matériau N froid. Ceci signifie que la segmentation génère deux plages de température qui correspondent exactement aux portions du spectre de température dans lesquelles chacun des matériaux froid et chaud ont leur meilleure performance. Pour la patte N la segmentation se trouve au point précis où le module peut profiter le plus du comportement thermoélectrique de chaque matériau N. Cependant il n'en est pas de même pour les pattes P du fait que la segmentation génère une plage de température étroite pour le matériau P froid et large pour le matériau P chaud. La segmentation n'est donc pas tout à fait optimale, étant donné que le matériau P froid est beaucoup plus performant que le matériau P chaud dans la gamme de températures de 100°C et moins. Alors, bien que la segmentation symétrique produise une amélioration de la performance du module, le fait d'avoir la même segmentation dans chaque type de patte ne permet pas de profiter du maximum de performance des matériaux, parce que les deux types de matériaux ont des profils différents et atteignent des performances maximales à différentes températures. Pour cette raison, la possibilité d'avoir une segmentation indépendante pour chaque type de patte a été considérée. De cette façon, on aurait un module dans lequel les quatre matériaux semi-conducteurs (N froid et chaud; P froid et chaud) pourraient être combinés en proportions

différentes. En utilisant le design de module segmenté asymétrique décrit dans le chapitre 3 et montré dans la figure 3-7, une boucle d'optimisation a été lancée pour chercher la hauteur idéale à laquelle chaque type de patte devrait être segmentée. De la même façon que dans le module SS la valeur totale de la longueur des pattes est constante (1.5 mm), alors que l'on introduit une plage de variation pour le premier segment de chaque type de patte entre 0.1 mm et 1.4 mm. Encore une fois, on établit pour le courant un intervalle entre 0 et 3.5 A permettant, la maximisation de la puissance de sortie et de l'efficacité en même temps. Les résultats de l'optimisation sont montrés dans le tableau 4-2. De la même façon que pour le cas de segmentation symétrique, on montre ici les trois candidats (A, B et C) que le logiciel choisit comme les meilleurs résultats parmi lesquels nous devons choisir le plus approprié pour nos besoins. Dans ce cas, chaque candidat correspond à un point de conception avec trois variables d'entrée (longueur du premier étage de la patte P, longueur du premier étage de la patte N et courant).

Tableau 4-2 : Résultats de l'optimisation du module ASS pour une plage de température de 150°C à partir de la température de la pièce et une plage de courant de 3.5 A avec $I_0 = 0$.

| | 1 ^{er} segment de patte P (mm) | 1 ^{er} segment de patte N (mm) | Courant à puissance max. (A) | Chaleur à la surface chaude (W) | Tension à puissance max. (V) | Puissance max. (W) | Efficacité (%) |
|------------|---|---|------------------------------|---------------------------------|------------------------------|--------------------|----------------|
| Candidat A | 0.53 | 0.20 | 1.80 | 102.60 | 3.50 | 6.30 | 6.14 |
| Candidat B | 0.79 | 0.31 | 1.69 | 101.14 | 3.72 | 6.29 | 6.22 |
| Candidat C | 1.07 | 0.38 | 1.63 | 100.90 | 3.80 | 6.21 | 6.15 |

En suivant le tableau d'optimisation, l'intensité de courant a été fixée à 1.7 A, puis le calcul a été relancé, donnant finalement la surface de réponse montrée dans la figure 4-6 illustrant la dépendance de la puissance de sortie avec la variation de la longueur du premier segment de chaque type de patte. On peut voir que quand la longueur du segment de patte P a une valeur Patte_P = 0.5 mm et la longueur du segment de patte N a une valeur Patte_N = 0.2 mm, la puissance de sortie atteint sa valeur maximale 6.2 W.

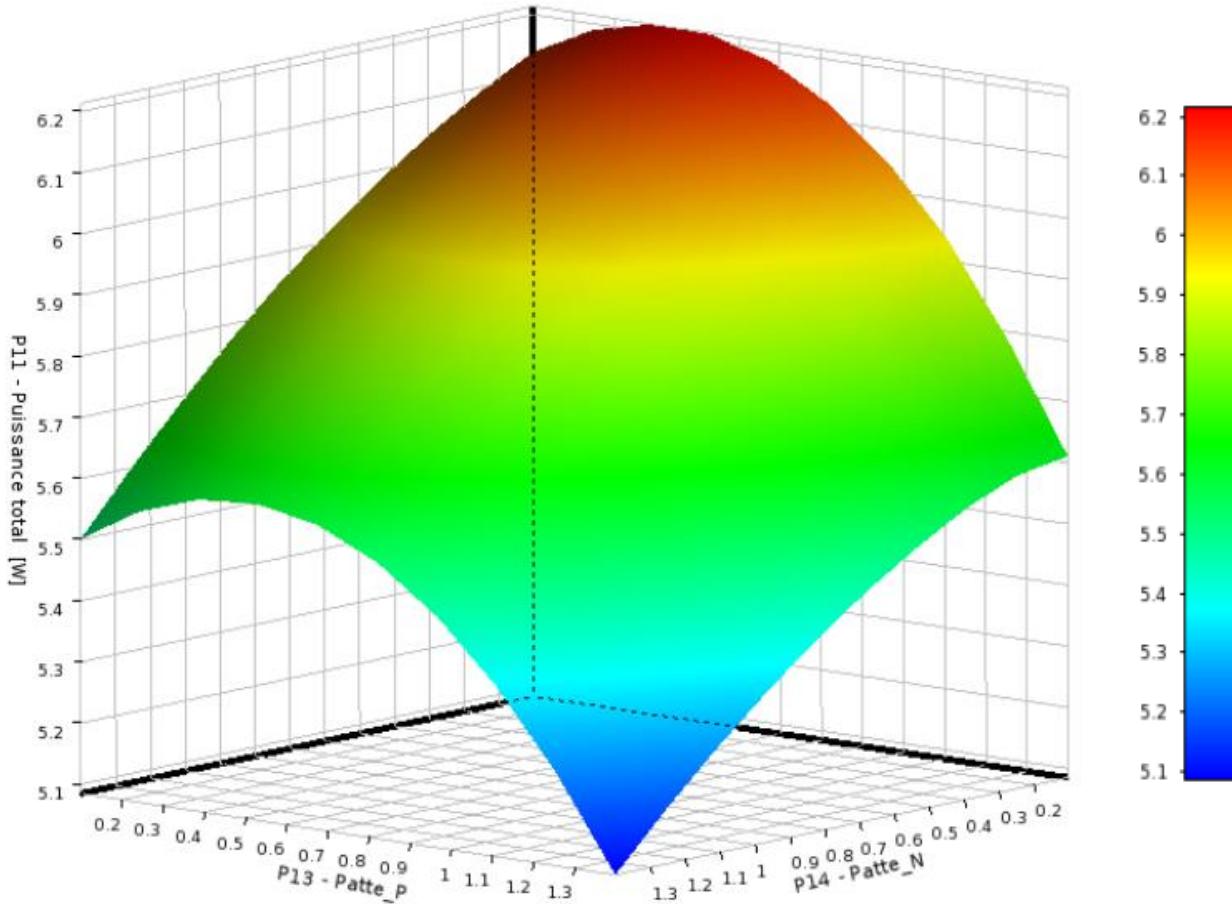


Figure 4-6 : Puissance de sortie (W) en fonction de la longueur du premier étage de chaque type de patte pour un $\Delta T = 150^\circ\text{C}$ avec $T_f = 20^\circ\text{C}$, et une intensité de courant de 1.7 A. L'échelle de couleur donne la valeur de la puissance en W.

Cette fois-ci le candidat B a été choisi et une fois que les valeurs de longueur de pattes et de courant ont été introduites dans le module ASS, le calcul a été relancé pour obtenir les courbes de puissance et d'efficacité. La performance thermoélectrique du module segmenté asymétrique (ASS) mis en opération est montrée dans les figures 4-7 et 4-8 et comparée à celles des modules standards et SS.

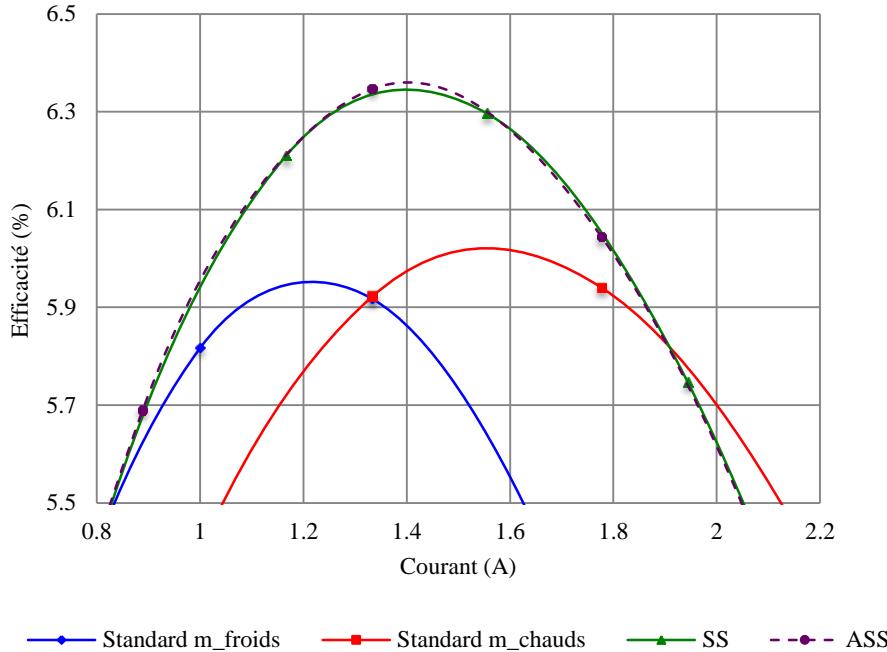


Figure 4-7 : Comparaison entre l'efficacité des quatre modèles créés, $\Delta T = 150^\circ\text{C}$ à partir de la température de la pièce, $I_0 = 0 \text{ A}$ et $I_{max} = 3.5 \text{ A}$.

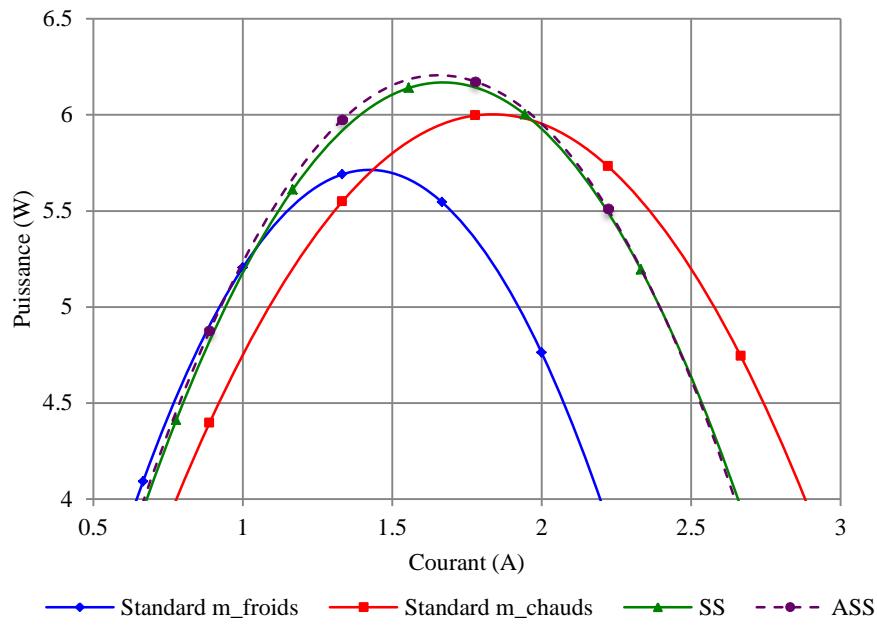


Figure 4-8 : Comparaison de la puissance générée des quatre modules simulés, $\Delta T = 150^\circ\text{C}$, avec $T_f = 20^\circ\text{C}$, $I_0 = 0 \text{ A}$ et $I_{max} = 3.5 \text{ A}$.

Comme on peut observer sur les graphiques, la segmentation asymétrique génère une

légère augmentation de la puissance de sortie ainsi qu'une légère augmentation de l'efficacité. Les gains ne sont pas aussi avantageux par rapport à la segmentation symétrique, comme on aurait voulu, mais ils ne sont pas négligeables non plus si on prend en compte que pour fabriquer un générateur thermoélectrique on utilise un assemblage de plusieurs modules. Le gain en puissance est dans ce cas multiplié par le nombre de modules utilisés dans le générateur. C'est le cas du générateur développé par Alphabet Energy à Hayward en Californie, où on utilise 32 rangées de MGT et de l'air chaud pour produire 25 kW de puissance de sortie [34]. Pour un générateur de telle magnitude, la différence entre l'utilisation des modules ASS au lieu des modules SS permettrait un gain de 250 W.

En plus, si on compare le module ASS avec les modules standards, la différence devient plus importante. La segmentation asymétrique dans le module ASS génère un gain en puissance d'environ 4% ainsi qu'une augmentation de l'efficacité de 6.9% par rapport au module standard fait avec des matériaux chauds et un gain en puissance d'environ 9% ainsi qu'une augmentation de l'efficacité de 7.3% par rapport au module standard fait avec des matériaux froids. Dans ce cas-là, la différence entre l'utilisation de modules ASS au lieu de modules standards dans le générateur d'Alphabet Energy impliquerait un gain en puissance de 2.3 kW.

4.1.2 Analyse du comportement thermomécanique

L'analyse thermomécanique n'a été effectuée que pour le modèle correspondant au module segmenté asymétrique (ASS). Tel qu'il a été expliqué dans la section 3.3.2, le chargement utilisé a été le gradient de température calculé dans l'analyse thermoélectrique puis importé dans l'analyse thermomécanique. Comme conditions aux rives, deux conditions de symétrie plus un support fixe ont été ajoutés au module afin de reproduire les dégrées de liberté du module réel en opération, normalement encastré dans de plaques avec tous les déplacements et toutes les rotations restreintes. Comme il a été déjà mentionné on s'est intéressé principalement à la contrainte de Von Mises dans les pattes du module ainsi qu'à la déformation du module, quand il est soumis à une différence de température de 150 °C à partir de la température de la pièce et au courant résultant de l'optimisation, 1.69 A.

4.1.2.1 Contrainte de Von Mises

Les contraintes de Von Mises ont été analysées pour l'ensemble du module. On s'intéresse

spécialement aux valeurs sur le côté chaud du module où les contraintes sont les plus élevées. L'analyse cherche à déterminer la résistance du module aux bris et aux fractures. Étant donné que notre matériau semi-conducteur est fragile et qu'il est soumis à des contraintes importantes induites par la différence de température, on s'intéresse à la résistance du matériau pour éviter la rupture dans les pattes ainsi qu'à la déformation totale du module, pour être certain que le modèle soit capable de résister aux contraintes induites lors de la mise en opération. Tel qu'il est déjà rapporté dans la littérature, il est possible d'observer que les contraintes maximales se concentrent sur le côté chaud, dans les coins des pattes qui se situent dans le bord extérieur du module [3] et leur valeur maximale atteint les 44 MPa. La figure 4-9 montre les contraintes induites dans les pattes lors de la mise en opération.

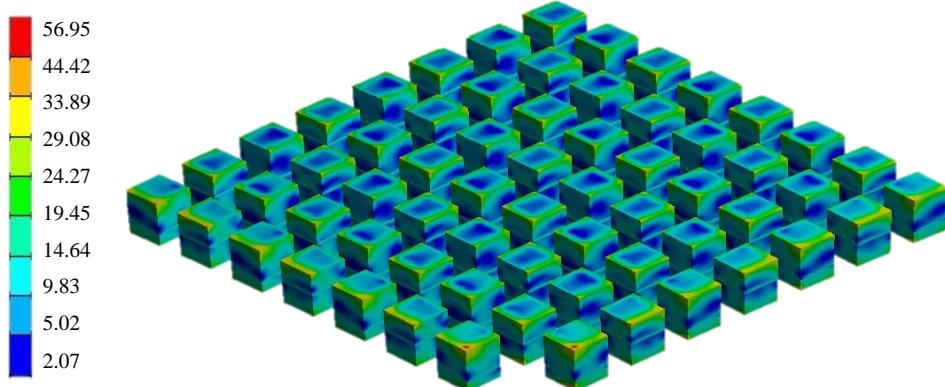


Figure 4-9 : Contrainte de Von Mises sur les pattes quand le module ASS est soumis à une $\Delta T = 150^{\circ}\text{C}$ avec $T_f = 20^{\circ}\text{C}$ et à un courant $I = 1.69 \text{ A}$. L'échelle de couleur donne le niveau de contrainte en MPa.

D'autre part, une contrainte de 73.9 MPa au niveau des conducteurs de cuivre du côté chaud a été calculée. Étant donné que la limite d'élasticité du cuivre est de 70 MPa, on peut affirmer que le cuivre est près de subir une déformation plastique dans de telles conditions. La figure 4-10 montre la distribution de contrainte sur les conducteurs de cuivre.

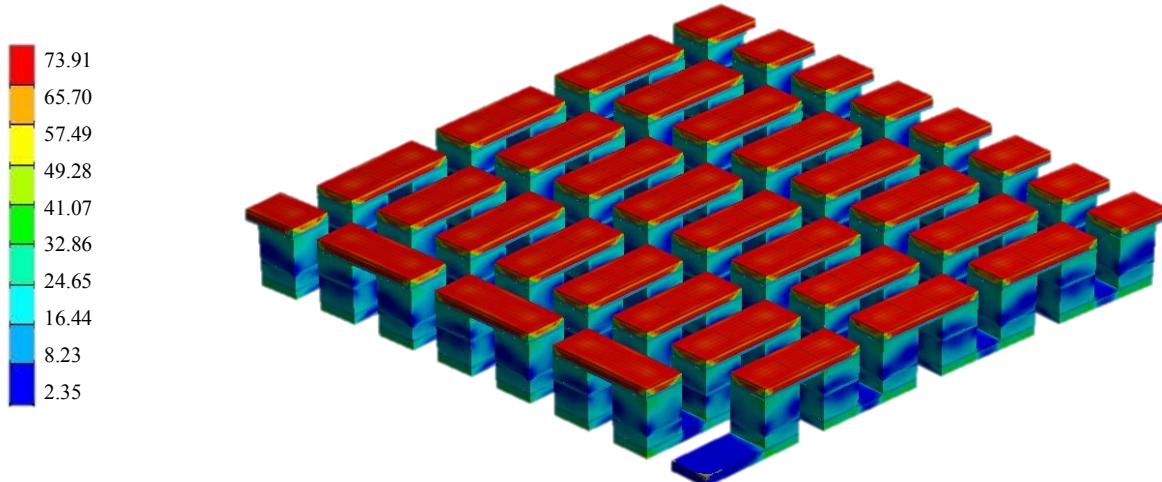


Figure 4-10 : Distribution de contrainte de Von Mises (MPa) dans le cuivre quand il est soumis à une $\Delta T = 150^\circ\text{C}$ avec $T_f = 20^\circ\text{C}$ et un courant $I = 1.69 \text{ A}$. L'échelle de couleur donne le niveau de contrainte en MPa.

Dans la soudure, les contraintes de Von Mises atteignent des valeurs de 15.3 MPa du côté chaud et 15.0 MPa à la jonction entre les deux segments. Étant donné que la limite élastique de la soudure est de 15 MPa, il est possible d'affirmer que la soudure subit aussi une déformation plastique ce qui aurait un effet amortisseur pour le reste du module [27, 35]. Les figures 4-11 et 4-12 montrent la distribution de contrainte sur la soudure du côté chaud et à la jonction entre les pattes du module respectivement.

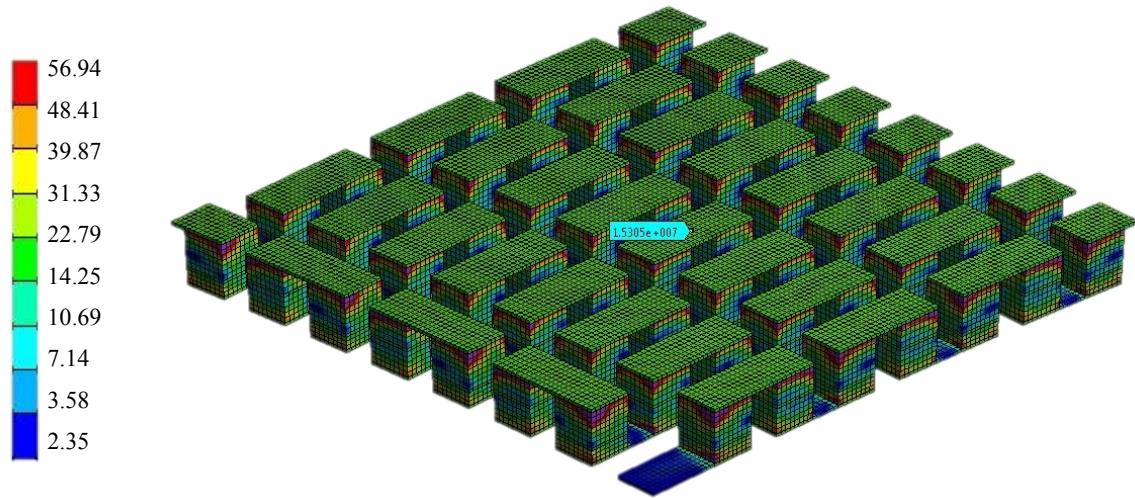


Figure 4-11 : Contrainte de Von Mises sur la soudure (côté chaud) quand il est soumis à une $\Delta T = 150^\circ\text{C}$ à partir de la température de la pièce et un courant $I = 1.69 \text{ A}$. L'échelle de couleur donne le niveau de contrainte en MPa.

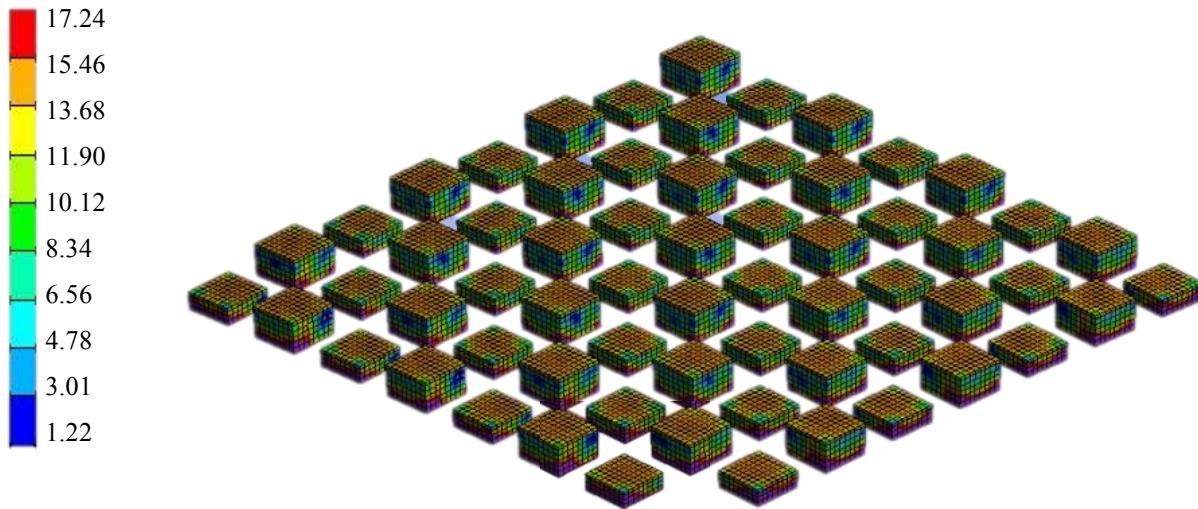


Figure 4-12: Contrainte de Von Mises sur la soudure à la jonction entre les deux segments de pattes pour un quart de module ASS. Le premier étage (côté froid) de la patte N à une longueur de 0.4 mm et le premier étage (côté froid) de la patte P à une longueur de 0.8 mm. Le module est soumis à une différence de température entre 20°C et 170°C et un courant de 1.69 A à travers le module. L'échelle de couleur donne le niveau de contrainte en MPa.

4.1.2.2 Déformation du module

Comme il avait été décrit dans la section 3.3.2, un support fixe a été ajouté à notre modèle afin d'évaluer la déformation en état libre d'un module complet à partir de celle de notre quart de module simulé. Cette déformation a déjà été rapportée dans la littérature, pour des modules non segmentés (standard) modélisés avec ANSYS et après mesure expérimentales pour valider la simulation. Turenne et coll. [27] ont simulé la déformation d'un module Kryotherm TB-127-1.4-1.5 et ont prédit un déplacement de 73 µm avec un $\Delta T = 100^\circ\text{C}$. Ils ont ensuite mesuré expérimentalement une déformation de 63 µm à l'aide un montage avec un profilomètre laser. Erturun et ses collaborateurs [26] pour leur part ont adapté leur modèle avec des conditions de symétrie pour simuler la déformation du même module commercial et ils ont prédit une déformation de 73.74 µm avec $\Delta T = 100^\circ\text{C}$, puis ils ont validé leurs résultats à l'aide d'un profilomètre Ambios XP-1 stylus. La figure 4-13 illustre la façon avec laquelle la déformation du module Kryotherm TB-127-1.4-1.5 a été mesurée.

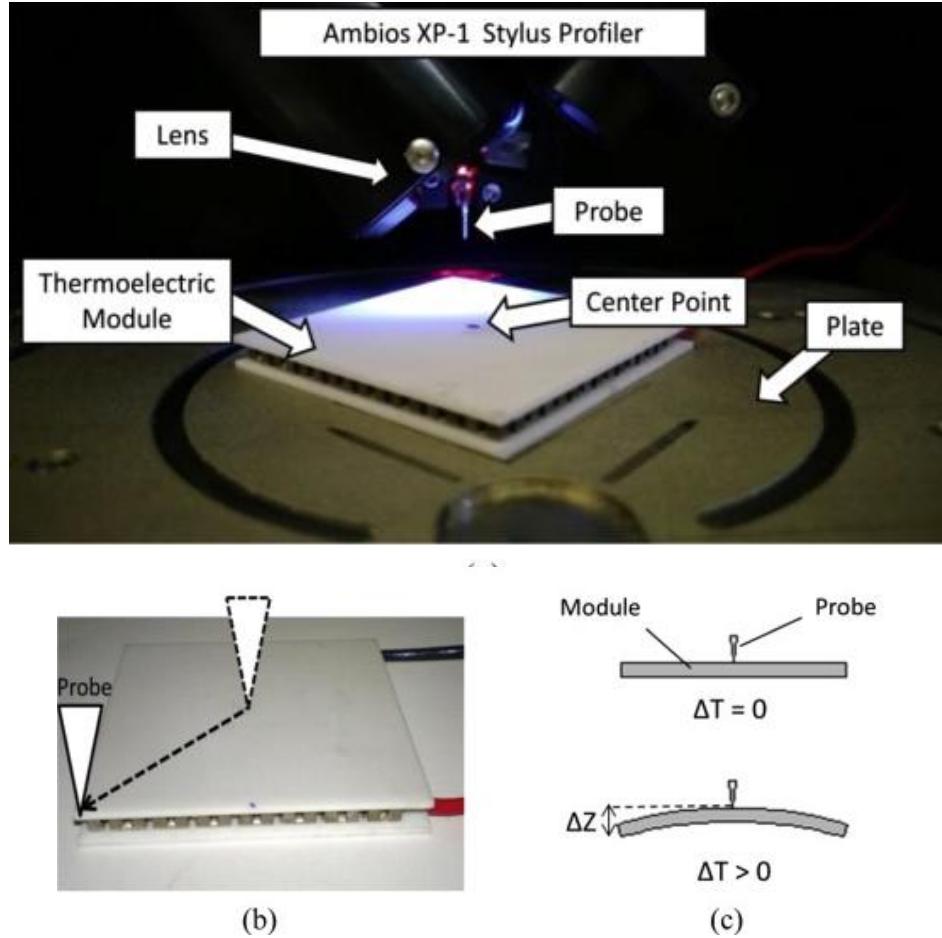


Figure 4-13 : Déformation du module TB-127-1.4-1.5 avec $\Delta T = 100^\circ\text{C}$ par [26], (a) intérieur du profilomètre, (b) direction de la sonde et (c) mesure de la déformation ΔZ .

Dans ce travail, on a simulé la déformation du module ASS, mis en opération avec une $\Delta T = 150^\circ\text{C}$ à partir de la température de la pièce et à un courant $I = 1.69 \text{ A}$. Tel qu'il est montré dans la figure 4-14, dans ces conditions le module subit une déformation de $113 \mu\text{m}$ dans une direction perpendiculaire à la diagonale principale. Si on compare ce résultat avec celui de [26, 27] on peut dire que notre valeur se trouve dans le même ordre de grandeur et que les différences peuvent être attribuées à la différence dans la plage de température utilisée. Dans la figure, un trait parallèle à la diagonale principale du module a été tracé afin de faciliter l'observation de la déformation.

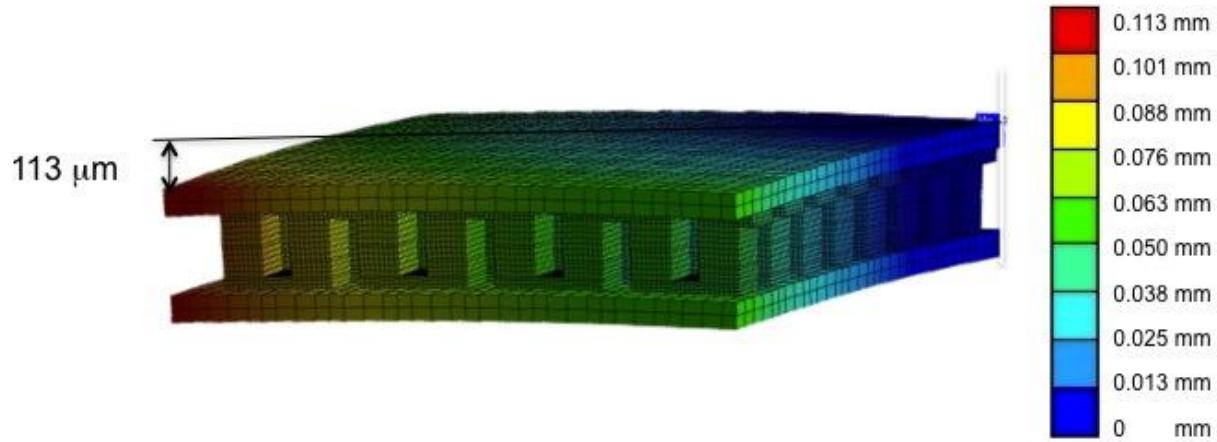


Figure 4-14 : Déformation du quart de module ASS simulé, quand il est soumis à une $\Delta T = 150^\circ\text{C}$ avec $T_f = 20^\circ\text{C}$ et à un courant $I = 1.69 \text{ A}$. La flexion du module a été exagérée pour faciliter la visualisation. L'échelle de couleur donne le niveau de déformation en mm.

CHAPITRE 5 CONCLUSIONS ET RECOMMANDATIONS

En résumé, le présent projet visant le design et la modélisation par éléments finis d'un module générateur thermoélectrique a mis en évidence les avantages d'utiliser la segmentation des pattes dans des MGT qui sont opérés dans un intervalle de basses températures.

5.1 Outil développé

Le modèle final par éléments finis, tel qu'il a été conçu, peut devenir un outil intéressant pour vérifier le comportement thermoélectrique et thermomécanique des groupes de matériaux constituant les modules dans différentes plages de températures, ainsi que pour vérifier l'effet des modifications géométriques appliquées aux thermo-éléments (changements de dimensions ainsi que segmentations symétrique et asymétrique) sur la performance des modules.

La conception du modèle final de module asymétrique à pattes segmentées (ASS) peut être divisée en trois grandes étapes; le design du modèle, le choix des matériaux et l'optimisation.

Dans la première étape il a été possible d'observer que le logiciel ANSYS Workbench permet de construire un modèle assez fiable d'un MGT. Avec ce logiciel, il a été possible de reproduire le modèle d'un MGT commercial Kryotherm avec un bon accord dans les résultats de performances thermoélectriques. De plus, il a été constaté qu'avec les conditions aux rives appropriées, l'utilisation des symétries est une option viable pour simplifier le modèle et alléger le calcul.

Dans la deuxième étape du choix des matériaux, il a été possible d'observer que les alliages à base de tellure de bismuth présentent une très bonne performance quand ils sont utilisés dans des MGT opérant à basse température. Néanmoins, de faibles différences dans le dopage de ces matériaux amènent d'importantes variations dans leur figure de mérite ZT . Ceci permet de créer des matériaux performants dans les basses températures avec des profils ZT optimisés pour des intervalles de température précis et complémentaires exploités dans la segmentation. Dans notre cas, le modèle proposé (ASS) ne montre pas une performance significativement plus élevée que celle du module symétrique (SS) due aux similarités entre les profiles ZT des matériaux du type N utilisés.

Néanmoins, l'optimisation par simulations numériques a montré que le modèle proposé pour le module asymétrique, opérant dans un $\Delta T = 150^\circ\text{C}$ à partir de la température de la pièce, peut atteindre une puissance de sortie de 5.45 W, ce qui représente une gain en puissance de 9% par rapport au module standard fait avec des matériaux froids et un gain de 4% par rapport au module standard fait avec des matériaux chauds. De plus, l'analyse thermoélectrique a montré que le modèle proposé est plus efficace dans la conversion de chaleur en énergie électrique que les modules standard, à savoir, une augmentation de l'efficacité de 6.9% par rapport au module standard fait avec des matériaux chauds et une augmentation de l'efficacité de 7.3% par rapport au module standard fait avec des matériaux froids.

D'autre part, l'analyse thermomécanique faite sur le module ASS a montré, tel que prévu, que les contraintes les plus élevées apparaissent sur le bord du module, du côté plus chaud, dans les coins des pattes. Néanmoins, il n'y a pas de risque de rupture parce que le niveau de contrainte ne dépasse pas la résistance mécanique des alliages thermoélectriques. Dans cette analyse, on a aussi observé que le cuivre ainsi que l'alliage de soudure subissent une déformation plastique du côté chaud du fait que le niveau de contrainte dépasse la limite d'élasticité de ces alliages. Le niveau de contrainte est de 73.9 MPa dans le cas du cuivre et de 15.3 MPa dans le cas de l'alliage de soudure (95%Sn-5%Sb). Une déformation élastique du module résulte de la différence de température entre les deux côtés. Cette déformation a été estimée à 113 μm .

5.2 Limitations

Des facteurs importants ont affecté l'objectif original de ce projet. Dans un premier temps, la viabilité du modèle standard initial a été vérifiée en comparant les résultats simulés numériquement à ceux d'un MGT trouvé sur le marché. Cependant, comme les propriétés exactes des matériaux constituant les modules commerciaux n'étaient pas connues, cette comparaison n'a pu que confirmer la validité de notre modèle que sur la base de valeurs typiques des performances pour des modules de même géométrie.

De plus, aucun des matériaux originalement utilisés pour constituer la banque de données du logiciel n'était disponible pour la fabrication de modules physiques pour pouvoir valider expérimentalement les résultats de la simulation.

Finalement, on n'a pas considéré la résistance de contact dans nos simulations, dû au fait que la dernière version de ANSYS qu'on a utilisé pour les simulations ne permettait pas d'inclure des résistances dans le circuit directement. L'exactitude des résultats obtenus dans ce projet peut donc être légèrement affectée si on prend en compte la valeur de ces résistances de contact et leur variation avec la température.

Les résultats de ce projet ouvrent la voie à la fabrication de modules segmentés asymétriques pour des applications à basse température, ainsi qu'à d'autres travaux de recherche visant à confirmer les contraintes supportées par le module dans des conditions d'opération données.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] S. B. Riffat et X. Ma, "Thermoelectrics: a review of present and potential applications," *Applied Thermal Engineering*, vol. 23, pp. 913-935, 2003.
- [2] C. B. Vining, "Semiconductors are cool," *Nature*, vol. 413, pp. 577-578, 2001.
- [3] T. E. Clin, "Simulations numériques du comportement thermomécanique de modules thermoélectriques ", Ecole Polytechnique, 2010.
- [4] M. Picard, S. Turenne, D. Vasilevskiy, et R. Masut, "Numerical Simulation of Performance and Thermomechanical Behavior of Thermoelectric Modules with Segmented Bismuth-Telluride-Based Legs," *Journal of Electronic Materials*, pp. 1-7, 2013.
- [5] S. W. Angrist, *Direct energy conversion*. Boston: Allyn and Bacon, 1976.
- [6] S. Dalola, M. Ferrari, V. Ferrari, M. Guizzetti, D. Marioli, et A. Taroni, "Characterization of thermoelectric modules for powering autonomous sensors," *Instrumentation and Measurement, IEEE Transactions on*, vol. 58, pp. 99-107, 2009.
- [7] G. Min et D. Rowe, "Recent concepts in thermoelectric power generation," in *Thermoelectrics, 2002. Proceedings ICT'02. Twenty-First International Conference on*, 2002, pp. 365-374.
- [8] W. C. Ltd. (2005). *Direct Conversion of Heat Energy to Electrical Energy* <http://www.mpoweruk.com/thermoelectricity.htm>
- [9] F. Henry. (2011). *Inventaire des énergies renouvelables*. <http://energiein.emonsite.com/pages/p1-et-moi.html>
- [10] L. Anatychuk, L. Vikhor, L. Strutynska, et I. Termena, "Segmented Generator Modules Using Bi₂Te₃-Based Materials," *Journal of electronic materials*, vol. 40, pp. 957-961, 2011.
- [11] M. Chen, J. Zhang, L. Peng, Z. Dechang, Z. Lili, L. Rosendahl, *et al.*, "Numerical and Experimental Optimization of Thermoelectric Modules for Power Generation," in *6th European Conference Thermoelectrics*, 2008, pp. 1-22.
- [12] J.-L. Gao, Q.-G. Du, X.-D. Zhang et X.-Q. Jiang, "Thermal stress analysis and structure parameter selection for a Bi₂Te₃-based thermoelectric module," *Journal of electronic materials*, vol. 40, pp. 884-888, 2011.
- [13] X. Jia et Y. Gao, "Estimation of thermoelectric and mechanical performances of segmented thermoelectric generators under optimal operating conditions," *Applied Thermal Engineering*, vol. 73, pp. 335-342, 2014.
- [14] S.-L. Li, C.-K. Liu, C.-Y. Hsu, M.-C. Hsieh, M.-J. Dai et S.-T. Wu, "Thermo-mechanical analysis of thermoelectric modules," in *Microsystems Packaging Assembly and Circuits Technology Conference (IMPACT), 2010 5th International*, 2010, pp. 1-4.
- [15] D. Bérardan, "Etude de skutterudites de terres-rares (R) et de métaux d (M) du type RM₄Sb₁₂: de nouveaux matériaux thermoélectriques pour la génération d'électricité," Université Paris XII Val de Marne, 2004.

- [16] D. M. Rowe, *Thermoelectrics handbook: macro to nano*: CRC press, 2006.
- [17] I. Cadoff et E. Miller, *Thermoelectric materials and devices*. New York Reinhold Publishing Corporation, 1960.
- [18] A. Bulusu et D. Walker, "Review of electronic transport models for thermoelectric materials," *Superlattices and Microstructures*, vol. 44, pp. 1-36, 2008.
- [19] B. E. White, "Energy-harvesting devices: Beyond the battery," *Nature nanotechnology*, vol. 3, pp. 71-72, 2008.
- [20] A. Ziabari, E. Suhir et A. Shakouri, "Minimizing thermally induced interfacial shearing stress in a thermoelectric module with low fractional area coverage," *Microelectronics Journal*, vol. 45, pp. 547-553, 2014.
- [21] E. Sandoz-Rosado et R. J. Stevens, "Experimental characterization of thermoelectric modules and comparison with theoretical models for power generation," *Journal of electronic materials*, vol. 38, pp. 1239-1244, 2009.
- [22] L. Marchand, M. G et M. Lévesque, *Éléments finis en mécanique du solide*, 7 ed., 2008.
- [23] E. E. Antonova et D. C. Looman, "Finite elements for thermoelectric device analysis in ANSYS," in *Thermoelectrics, 2005. ICT 2005. 24th International Conference on*, 2005, pp. 215-218.
- [24] C. C. A.-S. I. License, "Maillage," ed, 2015.
- [25] ANSYS. (2013). *Workbench User's Guide*. <http://148.204.81.206/Ansys/150/Workbench%20Users%20Guide.pdf>
- [26] U. Erturun, K. Erermis et K. Mossi, "Effect of various leg geometries on thermo-mechanical and power generation performance of thermoelectric devices," *Applied Thermal Engineering*, vol. 73, pp. 128-141, 2014.
- [27] S. Turenne, T. Clin, D. Vasilevskiy et R. Masut, "Finite element thermomechanical modeling of large area thermoelectric generators based on bismuth telluride alloys," *Journal of electronic materials*, vol. 39, pp. 1926-1933, 2010.
- [28] A. Arenas, J. Vázquez, R. Palacios et A. Aguilera, "Bidimensional analysis of a thermoelectric module using finite element techniques," *sign*, vol. 1, p. 3, 2000.
- [29] C. Chu, "Robust thin film thermoelectric devices," in *Thermoelectrics, 1996., Fifteenth International Conference on*, 1996, pp. 274-278.
- [30] KRYOTHERM. (2015). *Production of thermoelectric modules (kreazone ed.)*. <http://kryothermtec.com/low-temperature-generating-modules.html>
- [31] J.-Y. Jang, Y.-C. Tsai et Y.-C. Huang, "Optimal design of the heat spreader applied thermoelectric module for waste heat recovery," *Advanced Science Letters*, vol. 14, pp. 253-257, 2012.
- [32] Y. Gratton, "Le krigeage: la méthode optimale d'interpolation spatiale," *Les articles de l'Institut d'Analyse Géographique*, vol. 1, 2002.

- [33] G. Biron, A. Vadean et L. Tudose, "Optimal design of interference fit assemblies subjected to fatigue loads," *Structural and Multidisciplinary Optimization*, vol. 47, pp. 441-451, 2013.
- [34] M. LaMonica. (2014) A Thermoelectric Generator That Runs on Exhaust Fumes. *IEEE SPECTRUM*.<http://spectrum.ieee.org/energywise/green-tech/conservation/a-thermoelectric-generator-that-runs-on-exhaust-fumes>
- [35] G. Zeng, S. McDONALD et K. Nogita, "Development of high-temperature solders: Review," *Microelectronics Reliability*, vol. 52, pp. 1306-1322, 2012.