

# 基于简化共轭梯度法的多级热电材料发电系统优化

朱世平 刘志春 葛亚 刘伟

(华中科技大学能源与动力工程学院, 武汉 430074)

**摘要** 本文采用简化的共轭梯度法优化多级热电材料发电模块的效率。研究中考虑到热电材料材料特性会随着温度变化, 为了得到更高的发电效率采取在温度区段采用不同的材料, 比如在高温段采用钴化合物, 低温段采用  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ 。研究中上下两部分材料的总高度一定, 需要优化的参数为下半部分热电材料的高度  $a$ , 优化目标是在不同热边温度下获得最佳效率。优化结果表明效率的提升幅度相比初始值最多增加了 30%。

**关键词** 简化共轭梯度法; 多级热电材料; 效率优化

**中图分类号:** TK123 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-231X(2015)04-0847-05

## Geometry Optimization of Thermoelectric Generators Using Simplified Conjugate-Gradient Method

ZHU Shi-Ping LIU Zhi-Chun GE Ya LIU Wei

(School of Energy and Power Engineering, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China)

**Abstract** This paper is to develop an approach to find the optimal TEG geometry, which integrates a multi-physics TEG model and a SCG (simplified conjugated-gradient) method. Moreover, the optimization of TEG uni-couple is considered with temperature dependent properties of the TE materials since skutterudites works better at high temperature and BiTe better at low temperature. The length of lower stage is the search variable, while the total length of the two stage is fixed. The objective of optimization is efficiency, where the optimum efficiency increases 30% than the initial design.

**Key words** simplified conjugate-gradient method; multi-junction; efficiency optimization

## 0 引言

目前的热电材料主要有两种用途: 一种是热电发电 (TEG), 原理是通过赛贝克效应 (Seebeck Effect)<sup>[1]</sup> 把热能转化为电能。第二种热电制冷 (TEC), 刚好与第一种相反, 热电制冷是通过帕尔贴效应 (Peltier Effect)<sup>[2]</sup> 把电能转化为热能。近年来随着热电材料的制备工艺的提升, 尤其是纳米工艺的加入使得材料的性能有了很大的提升。同时由于热电材料发电过程中没有使用机械传动部件, 这就使得其发电在某些领域变得很有吸引力。

一个热电材料发电模块是由一些半导体连件以电串联热并联的方式连接起来, 并且每一个热电模块由一个 p 型半导体与一个 n 型半导体组成。热电材料发电或者制冷的性能优劣主要和材料的性能因子  $ZT$  值有关, 其中  $\alpha$  是赛贝克系数,  $T$  是绝对温度,  $\sigma$  是电导率,  $k$  是热导率。  $ZT$  值越高, 材料的性能越好, 所以高的  $\alpha$  与值, 低的  $k$  值可以获得一种

性能较好的热电材料<sup>[3,4]</sup>。

目前的研究的另外一个方向是几何结构对于热电材料发电与制冷性能的影响。Chen 等人<sup>[5]</sup> 提出了一种新的多模块化的系统, 他们主要通过对热电系统的几何结构优化来提高系统的性能。Chen<sup>[6]</sup> 通过使用拉格朗日算子的方法研究了太阳能热电发电系统的理论最大效率。对于一个固定了基底面积的热电材料发电模块来说, 影响系统性能的结构参数主要有半导体模块数量, 半导体模块的高度, p 型与 n 型半导体的面积比。这几个参数对热电材料性能影响是存在相互作用的, 但是我们可以固定其他参数来研究单一参数变化时对于热电材料发电系统效率的影响。

Cheng 等<sup>[7]</sup> 人采用遗传算法来优化单级热电材料制冷系统。在他们的研究中, 热电材料的长度, 截面积, 以及模块的数量都是待优化的变量。Wang

收稿日期: 2015-02-02; 修订日期: 2015-03-16

基金项目: 国家自然科学基金 (No.51376069)

作者简介: 朱世平 (1990-), 男, 硕士, 主要从事热电材料发电系统优化方向的研究。通信作者: 刘志春, 教授, zcliu@hust.edu.cn.

等<sup>[8]</sup>人研究出了一种更为普遍的三维热电材料仿真模型。这个模型与之前的模型不太一样,在这个模型中联合了导热方程还有电势方程,同时考虑了赛贝克效应,帕尔贴效应,汤姆森效应,焦耳热效应,傅里叶导热方程,以及向环境中的散热损失。而在之前的模型里一般都是焦耳热或者汤姆森效应作为热源的一维或者三维的导热方程,电势方程则被忽略,同时假设电流密度在整个半导体的截面上是均衡的。

本文主要工作是采取简化后的共轭梯度法来优化多级热电材料发电模块的结构以达到不同工作温度下的最大效率。Cheng<sup>[9]</sup>等人最先提出简化共轭梯度法。本文主要通过研究热电材料模块高度这一参数的变化来获得最佳效率。在仿真模型采用了实际边界条件,同时采用基于温度变化的材料参数特性,并且材料的参数特性都输入到了仿真软件 COMSOL 之中。

## 1 优化方法

### 1.1 优化几何结构参数

图1是两级结构的热电发电模块,上部分的材料选取的是钴化合物,下部分的材料选取的是  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ 。这是因为  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  在低温段 ( $200^\circ\text{C}$ ) 的性能较好,而钴化合物的性能在高温段 ( $500^\circ\text{C}$ ) 较好。每一级都由一个 n 型半导体和 p 型半导体,以及三个铜质的连接体组成。两级中间的材料采用了电绝缘的石英板。n 型与 p 型半导体的高度一样,但是需要注意的是 n 型, p 型材料的赛贝克系数,电导率,热导率都不一样,所以一个在比较好的设计里 n 型与 p 型应该会采用不同的截面积。本文的优化目标主要是上下两级材料的高度,所以假设 n 型与 p 型材料的截面积相同。

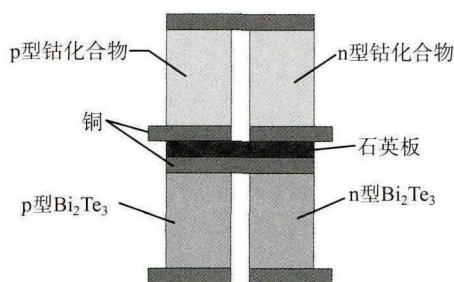


图1 两级热电材料结构图

Fig. 1 Schematic of a TEG uni-couple

### 1.2 模型建立

我们在建立模型的时候提出几点建设,如在仿

真过程中是处于稳态, n 型与 p 型半导体材料特性是随温度变化的;忽略接触热阻与接触电阻;忽略辐射与对流换热;上下两层之间只有热量传递并且电绝缘。

#### 1.2.1 导热方程

$$\nabla \times (\lambda_i \nabla T) + \frac{j^2}{\sigma_i} - \beta_i \vec{j} \times \nabla T = 0 \quad (1)$$

$$\nabla \cdot (\lambda_p \nabla T) + \frac{j^2}{\sigma_p} - \beta_p \vec{j} \cdot \nabla T = 0 \quad (2)$$

$$\nabla \cdot (\lambda_n \nabla T) + \frac{j^2}{\sigma_n} - \beta_n \vec{j} \cdot \nabla T = 0 \quad (3)$$

#### 1.2.2 电势方程

$$\nabla \cdot (\sigma (\nabla \varphi - \alpha \nabla T)) = 0 \quad (4)$$

在上述方程里  $\lambda$  是导热率,  $\sigma$  是电导率,  $\beta$  是汤姆森系数,  $\vec{j}$  是电流密度向量,  $\alpha$  是赛贝克系数,  $\varphi$  是电势。脚标  $i, p, n$  分别指代内连接体, p 型半导体, n 型半导体。汤姆森系数跟赛贝克系数之间的关系如下:

$$\beta = T \frac{d\alpha}{dT} \quad (5)$$

如果电势已知那么电流密度向量就可以用下面的方程计算得出:

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} = \sigma (-\nabla \varphi + \alpha \nabla T) \quad (6)$$

**1.2.3 边界条件** 在热电材料发电模块的两边分别加载固定的边界温度,热边温度  $T_h$  与冷边温度  $T_c$ 。并假设温度与热流在内连接体与半导体之间是连续的,并且其他表面都是绝热面。

**1.2.4 材料特性参数** 材料特性曲线是根据 Bed Poudel<sup>[10]</sup> 与 J. Yang<sup>[11]</sup> 的数据所绘。同时由于铜质的内连接体热电效应非常低,所以我们忽略其随温度的变化。

### 1.3 简化的共轭梯度法模型<sup>[12]</sup>

本文的研究目标是优化热电材料发电模块上下两级的高度以使整个系统达到最大效率。模块的上下两级的总高度是固定的,这是为了方便将来的模块组的制作生产。采用的优化方法为简化共轭梯度法,但是由于简化共轭梯度法是寻找最小值,所以优化目标  $J$  是总效率的倒数,其表达式为:

$$J = 1/[\eta_1 + (1 - \eta_1) \cdot \eta_2] \quad (7)$$

其中,  $\eta_1, \eta_2$  分别为上半部分的效率和下半部分的效率,其表达式为:

$$\eta = \frac{T_h - T_c}{T_h} \cdot \frac{\sqrt{1 + ZT_m} - 1}{\sqrt{1 + ZT_m} + T_c/T_h} \quad (8)$$

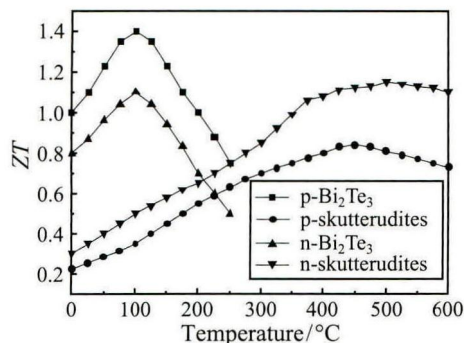


图2 低温段的  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  以及高温段的钴化合物材料的  $ZT$  值  
Fig. 2  $ZT$  of the used TE materials

简化共轭梯度法的优化步骤如下:

1) 给待确定变量  $a$  还有搜索幅度  $\beta$  各一个初始值。

2) 用变量  $a$  建立几何模型并绘制网格, 并设置边界条件, 然后联立方程 (1)~(6) 解方程。

3) 根据解得的方程结果计算目标函数  $J$ 。当目标函数  $J$  达到最小时迭代终止, 否则继续执行步骤 (4)。

4) 采用直接数值敏感性分析来计算梯度方程  $(\partial J/\partial a)^n$ 。计算原理如下: 首先给待确定变量一个扰动  $\Delta a_i$ , 然后计算由扰动  $\Delta a_i$  导致目标方程  $J$  的改变量  $\Delta J$ 。这样梯度方程就可以由直接数值微分计算出来:  $\frac{\partial J}{\partial a} = \frac{\Delta J}{\Delta a}$ 。

5) 计算共轭梯度系数  $\gamma$  与搜索方向  $\pi$

$$\gamma^{(n)} = \left[ \frac{(\partial j/\partial a)^{(n)}}{(\partial j/\partial a)^{(n-1)}} \right]^2 \quad (9)$$

$$\pi^{(n+1)} = \left( \frac{\partial J}{\partial a} \right)^{(n)} + \gamma^{(n)} \pi^{(n-1)} \quad (10)$$

上标  $n$  和  $n-1$  代表计算步数,  $n=1$  时,  $\gamma=0$ 。

6) 更新待搜索变量

$$a^{(n+1)} = a^{(n)} - \beta \times \pi^{(n)} \quad (11)$$

## 2 结果与讨论

### 1.2 初始几何机构下热电材料发电模块性能分析

设置初始几何结构下部分的材料长度  $a=1.5$  mm, 总高度是 3 mm, 所以上部分的材料长度就为  $3-a$  mm。冷端温度  $T_c$  固定为  $20^\circ\text{C}$ 。图 3, 图 4 是关于  $T-\eta$ ,  $T-E$  的走势。总效率随着热边温度  $T_h$  在一定范围内升高, 而到了接近  $600^\circ\text{C}$  后开始下降这是因为  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  的效率随着温度在超过  $500^\circ\text{C}$  后在下降。但是因为钴化合物随着温度升高效率还在升

高, 所以总效率直到  $600^\circ\text{C}$  以后才下降。电压则是随着温度一直升高。

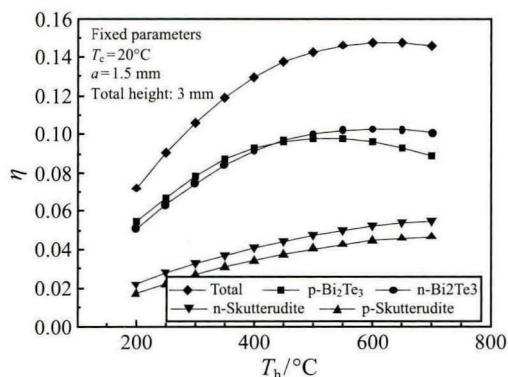


图3 初始几何机构下热电材料发电效率随温度的变化趋势  
Fig. 3 The effect of hot side temperature on TEG performance: Efficiency

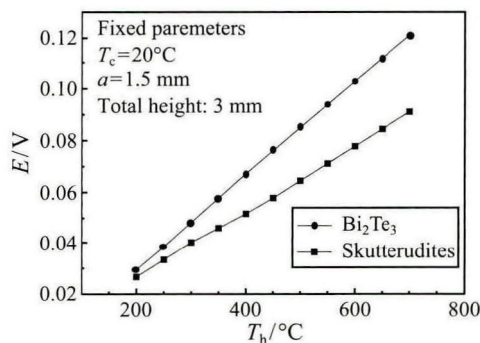


图4 初始几何机构下热电材料发电电势随温度的变化趋势  
Fig. 4 The effect of single parameter on TEG performance: Electric potential

### 2.2 初始几何条件下待搜索变量对系统的影响

如图 5 所示, 优化之前我们要分析  $a$  的变化对于整个系统效率的影响。在计算中我们固定冷边温度  $T_c$  为  $20^\circ\text{C}$ , 总高度 3 mm, 上半部分材料的高度则为  $3-a$  mm。在图 5 中我们看到最大效率随着热边温度  $T_h$  的升高向着高度  $a$  减少的趋势发展, 也就是说热边温度  $T_h$  越高, 最佳效率越偏向于较小的高度  $a$ 。当在高度  $a$  很大同时热边温度  $T_h$  很高的时候系统效率降低的幅度非常大。图 6 选取了热边温度  $T_h$  为  $400^\circ\text{C}$  时上下两级各个材料的效率随着高度  $a$  变化时的情况。随着下半部分材料  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  的高度  $a$  逐渐增加, 效率也随之增加, 而上半部分材料钴化合物的效率则逐渐下降。当  $a$  大约为 1 mm 时系统的总效率达到最大。

### 2.3 优化几何尺寸

图 7 和图 8 显示了总效率和下半部分材料高度  $a$  在优化过程中的变化情, 图 9 对比了优化前后

效率。

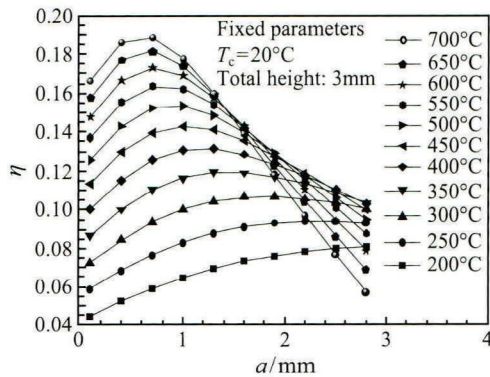


图5 下半部分材料高度  $a$  在不同  $T_h$  下对系统效率的影响  
Fig. 5 The effect of lower stage's length on TEG performance: Efficiency

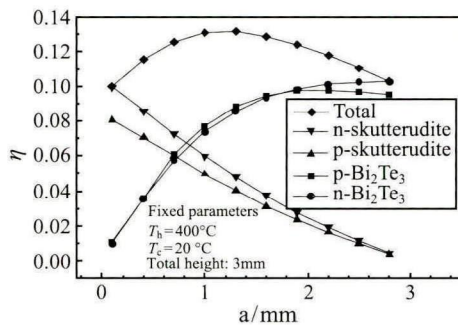


图6  $T_h = 400^\circ\text{C}$  时下半部分材料高度  $a$  对系统效率的影响  
Fig. 6 The effect of lower stage's length on TEG performance when  $T_h = 400^\circ\text{C}$ : Efficiency

图7中效率随着搜索步数的增加而增加,但搜索一定步数后效率基本不变。当热边温度  $T_h = 200^\circ\text{C}$  时,在90步后的效率达到最大值 8.07%,相比未优化前的 7.21%提升了 12%;  $T_h = 450^\circ\text{C}$  时,在60步后效率达到最大值 14.28%,相比未优化前 13.74%提升了 4%;  $T_h = 700^\circ\text{C}$  时同样在70步后效率达到了 18.93%,相比于未优化前的 14.57%提升了 30%。不同的热边温度  $T_h$  优化后提升的幅度不一样主要是因为初始设定的高度  $a = 1.5\text{ mm}$ ,该几何尺寸接近热边温度  $T_h = 400^\circ\text{C}$  下的最优值,所以优化后提升的幅度较小。

图8显示在优化过程中,下半部分的材料高度在  $T_h = 350^\circ\text{C}$  附近优化后基本未有太大变化;在低温区段 ( $T_h < 350^\circ\text{C}$ ),下半部分的材料高度  $a$  的趋势是增加,温度越低优化后增加的幅度越大;在高温区段 ( $T_h > 350^\circ\text{C}$ ),下半部分材料高度  $a$  趋势是减小,温度越高优化后减小的幅度越大。例如当  $T_h = 200^\circ\text{C}$  时,优化后的高度  $a$  为 2.93 mm,相比于未优化前的 1.5 mm 提高了 95%;在  $T_h = 400^\circ\text{C}$  时,优化

后的高度  $a$  为 1.2 mm,相比未优化前减小了 20%;  $T_h = 700^\circ\text{C}$  时,优化后的高度  $a$  为 0.6045 mm,相比未优化前减小了 60%。不同热边温度  $T_h$  优化后增加或者减小的幅度不一样主要是因为热边温度  $T_h = 350^\circ\text{C}$  附近初始几何尺寸  $a = 1.5\text{ mm}$  接近此温度下的最优值,所以优化后改变的幅度较小。

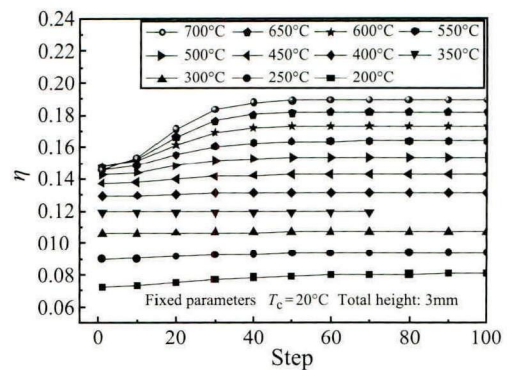


图7 优化过程中效率的变化  
Fig. 7 Variations of Efficiency during optimization

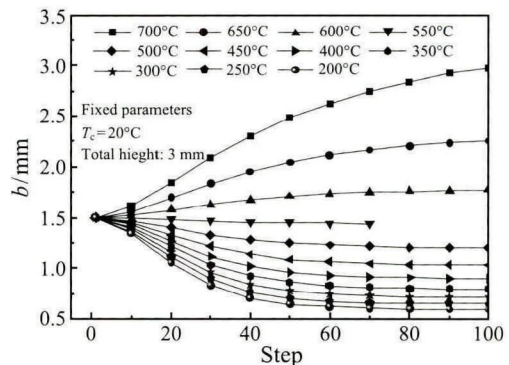


图8 高度  $a$  在优化过程中的变化  
Fig. 8 Variations of lower stage's length during optimization

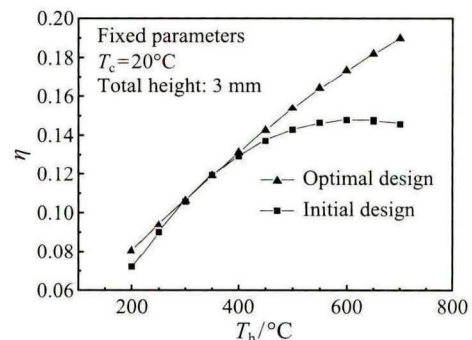


图9 优化前后的效率对比  
Fig. 9 Comparison of the TEG efficiency between the initial and optimal designs

### 3 结论

本文采用简化的共轭梯度法优化三维的二级热

电材料发电模块。该模块上下两级总高度为 3 mm, 下半部分的高度  $a = 1.5$  mm, 上半部分的高度为  $3 - a$  mm。为了优化得到最大的效率, 本文用下半部分  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  的高度  $a$  作为待优化变量, 总效率作为优化目标函数。

在不同的热边温度  $T_h$  下, 优化后的高度  $a$  变化趋势不同, 下半部分的材料高度在  $T_h = 350^\circ\text{C}$  附近优化后基本未有太大变化; 在低温区段 ( $T_h < 350^\circ\text{C}$ ), 下半部分的材料高度  $a$  的变化趋势是增加, 温度越低优化后增加的幅度越大; 在高温区段 ( $T_h > 350^\circ\text{C}$ ), 下半部分材料高度  $a$  变化趋势是减小, 温度越高优化后减小的幅度越大。

尽管目前的优化工作还处于单一模块的热电材料发电系统, 但是该优化方法同样适用于整个模块组的优化工作。

## 参 考 文 献

- [1] Chen W H, Liao C Y, Hung C I, et al. Experimental Study on Thermoelectric Modules for Power Generation at Various Operating Conditions [J]. *Energy*, 2012, 45(1): 874–881
- [2] Martínez A, Astrain D, Rodríguez A. Dynamic Model for Simulation of Thermoelectric Self-Cooling Applications [J]. *Energy*, 2013, 55(8): 1114–1126
- [3] Riffat S B, Ma X. Thermoelectrics: a Review of Present and Potential Applications [J]. *Applied Thermal Engineering*, 2003, 23(8): 913–935
- [4] Minnich A J, Dresselhaus M S, Ren Z F, et al. Bulk Nanostructured Thermoelectric Materials: Current Research and Future Prospects [J]. *Energy & Environmental Science*, 2009, 2(5): 466–479
- [5] Chen J, Lin B, Wang H, et al. Optimal Design of a Multi-Couple Thermoelectric Generator [J]. *Semiconductor Science and Technology*, 2000, 15(2): 184–188
- [6] Chen G. Theoretical Efficiency of Solar Thermoelectric Energy Generators [J]. *Journal of Applied Physics*, 2011, 109(10): 104908
- [7] Cheng Y H, Lin W K. Geometric Optimization of Thermoelectric Coolers in a Confined Volume Using Genetic Algorithms [J]. *Applied Thermal Engineering*, 2005, 25(17/18): 2983–2997
- [8] Wang X D, Huang Y X, Cheng C H, et al. A Three-Dimensional Numerical Modeling of Thermoelectric Device with Consideration of Coupling of Temperature Field and Electric Potential Field [J]. *Energy*, 2012, 47(3): 488–497
- [9] Cheng C H, Chang M H. A Simplified Conjugate-Gradient Method for Shape Identification Based on Thermal Data [J]. *Numerical Heat Transfer*, 2003, 43(5): 489–507
- [10] Poudel B. High-Thermoelectric Performance of Nanostructured Bismuth Antimony Telluride Bulk Alloys [J]. *Science*, 2008, 320(5876): 634–638
- [11] Yang J, Hao Q, Wang H, et al. Solubility Study of Yb in N-Type Skutterudites  $\text{YbxCo}_4\text{Sb}_{12}$  and Their Enhanced Thermoelectric Properties [J]. *Physical Review B*, 2009, 80: 115329
- [12] Huang Y X, Wang X D, Cheng C H, et al. Geometry Optimization of Thermoelectric Coolers Using Simplified Conjugate-Gradient Method [J]. *Energy*, 2013, 59(1): 689–697