

COMSOL Multiphysicsを用いた熱電発電装置の最適化

Optimization of thermo electric energy harvester using COMSOL Multiphysics

竹澤 晃弘

広島大学大学院工学研究院 機械システム・応用力学部門

Akihiro Takezawa

Division of Mechanical System and Applied Mechanics, Faculty of Engineering, Hiroshima University

北村 充

広島大学大学院工学研究院 機械システム・応用力学部門

Mitsuru Kitamura

Division of Mechanical System and Applied Mechanics, Faculty of Engineering, Hiroshima University

Key Words: Thermoelectric generators, Topology optimization, Finite element method, Sensitivity analysis

This paper discusses a geometrical optimization method for thermoelectric generators. Our method provides the optimized geometry in accord with various arbitrary conditions such as types of materials, volume of materials, temperatures of installation position, and shape of installation position. It has the potential to contribute to improving thermoelectric devices in supporting design stages. By establishing the coupled equations of state for the thermoelectric problem, an analytical model subject to these equations is introduced that mimics the closed circuit composed of the thermoelectric materials, electrodes and a resistor. The total electric power lost through the resistor is formulated as an objective function for optimization. The proposed optimization method for thermoelectric generators is implemented as a geometrical optimization method using the solid isotropic material with penalization (SIMP) method used in topology optimizations. Simple relations are formulated between the density function of SIMP method and physical properties of thermoelectric material. Sensitivity analysis for the objective function is formulated with respect to the density function and the adjoint equations required for calculating it. Depending on the sensitivity, the density function is updated using the method of moving asymptotes, which has numerous benefits in various optimization problems by virtue of its combination with topology optimization. Finally, the numerical examples are provided to demonstrate the validity of our method.

1 緒言

近年、温度差を電位差に変換することが可能な熱電素子を利用した、廃熱をエネルギー源とする、熱電ハーベスタと呼ばれる環境発電デバイスが注目を集めている。このような発電デバイスは、本来なら無駄になる廃熱を電気エネルギーに変換することができ、メンテナンスが不用で恒久的に電源を供給可能という利点を有するため、各種大型プラントや輸送機器に含まれる熱源を利用した発電の他にも、外部からの電力の供給が困難な分散型ネットワーク装置や、体内埋め込み型の医療機器等への電力供給手段としての活用が期待されている。現に、様々な用途に応じた、様々な形状の熱電ハーベスタが提案され、その装置の寸法等を設計変数として扱った、簡単な最適化も試みられている。しかし、装置には、長方形や直方体を基準にした単純な形状のみが主に用いられ、根本的な最適形状の検討は未だ行われていない。そこで本研究では、対象構造の形状のみならず位相（穴の数）を含めた最適化が可能で、抜本的な性能の改善が期待できるトポロジー最適化を用いて、熱電ハーベスタの最適設計法を構築する。

2 定式化

2.1 状態方程式

最初に、有限要素解析で用いる、熱電効果を表す状態方程式を考える。ここでは、十分に時間が経過した定常状態を考え、材料は全て熱伝導と電気伝導に関して等方性を有するものとする。このとき、電気伝導と熱伝導に関する状態方程式は以下の

ようになる。

$$\nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{q} = f \quad (2)$$

ここで、 \mathbf{j} と \mathbf{q} はそれぞれ電流密度ベクトルと熱流束密度ベクトルであり、 f は体積熱源である。熱電現象において、 \mathbf{j} と \mathbf{q} は以下の式により関連付けられる [1]。

$$\mathbf{j} = \sigma(\mathbf{E} - \alpha \nabla T) \quad (3)$$

$$\mathbf{q} = \beta \mathbf{j} - \lambda \nabla T \quad (4)$$

ここで、 \mathbf{E} は電場ベクトルであり、 T は温度、 σ と λ はそれぞれ電気伝導率と熱伝導率、 α と $\beta (= T\alpha)$ はそれぞれゼーベック係数とペルチェ係数である。ここで、体積熱源は電気エネルギーによってのみ生じるものとし、すなわち、 $f = \mathbf{j} \cdot \mathbf{E}$ とし、静電ポテンシャル V ($-\nabla V = \mathbf{E}$) を導入し、式 (3) と式 (4) を式 (1) と式 (2) に代入すると、状態変数 V と T に関する以下の二つの状態方程式が得られる。

$$\nabla \cdot (-\sigma \nabla V - \alpha \sigma \nabla T) = 0 \quad (5)$$

$$\nabla \cdot \{-(\alpha^2 \sigma T + \lambda) \nabla T - \alpha \sigma \nabla V T\} = \sigma \{(\nabla V)^2 + \alpha \nabla T \nabla V\}. \quad (6)$$

以下の境界条件を適用することで、式 (5) と式 (6) より V と T が求められる。

$$V = V_0 \text{ on } \Gamma_{DV}, \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{j} = j_0 \text{ on } \Gamma_{Nj} \quad (7)$$

$$T = T_0 \text{ on } \Gamma_{DT}, \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} = q_0 \text{ on } \Gamma_{Nq} \quad (8)$$

ここで、 Γ_{DV} と Γ_{Nj} はそれぞれ状態変数 V に関するディリクレ境界条件とノイマン境界条件を示し、 Γ_{DT} と Γ_{Nq} は状態変数 T について同様である。

2.2 装置のモデリング

ここで、実際の熱電ハーベスタを模した解析モデルを考える。p型とn型の熱電材料と電極、抵抗で構成される最も単純な熱電ハーベスタを図1に示す。

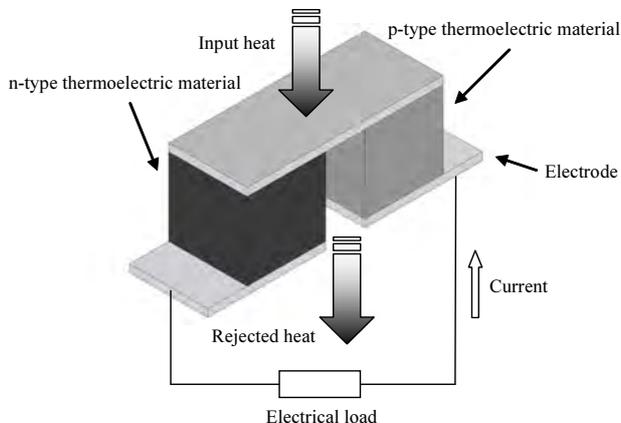


Fig.1 Schematic view of a simple thermoelectric generator

この装置を単純化した二次元の解析領域を図2に示す。領域 Ω は Ω_{TE} と Ω_E , Ω_L より構成され、それぞれ熱電材料と電極、抵抗に対応する。また、 Ω_{TE} はp型材料に対応する Ω_{TE-p} とn型材料に対応する Ω_{TE-n} に分けられる。 Γ_{DT_0} と Γ_{DT_1} は高温部と低温部のそれぞれに対応するディリクレ境界条件を示す。さらに、領域の右端と左端に静電ポテンシャル V と電流密度ベクトル j について周期境界条件を導入することで、閉回路を模す。すなわち、以下の境界条件を適用する。

$$V \text{ is periodic on } \Gamma_{P1} \text{ and } \Gamma_{P2} \quad (9)$$

$$j \text{ is periodic on } \Gamma_{P1} \text{ and } \Gamma_{P2} \quad (10)$$

ここで、 Γ_{P1} と Γ_{P2} は上記周期境界条件を適用する境界を示す。

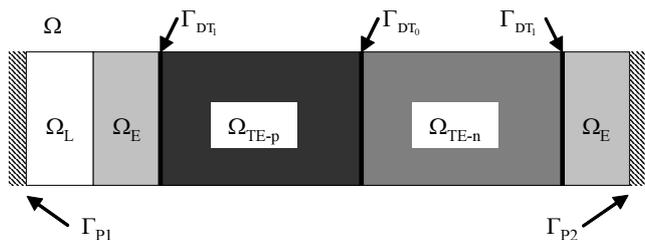


Fig.2 A schematic diagram of a 2D analysis domain for a simple thermoelectric generator

2.3 目標関数

本研究では抵抗に作用する電気エネルギーの最大化を目標としている。そのため、最小化される目標関数は、以下の抵抗領域 Ω_{TE} の総電気エネルギーに -1 を乗じた値とする。

$$J(\Omega_{TE}) = - \int_{\Omega} H j \cdot E dx \quad (11)$$

ここで、 $H \equiv H(\Omega - \Omega_L)$ は領域 Ω_L で1、その他の領域で0の値をとるヘビサイド関数である。

2.4 トポロジー最適化

トポロジー最適化の基本的な考え方は、固定設計領域と次式に示す特性関数 χ_{Ω} の導入にある。すなわち、最適構造となるべき(本来の)設計領域 Ω_d を包括する固定設計領域 D を最初に設け、その固定設計領域と特性関数 χ_{Ω} を用いて、最適化問題を材料分布問題に置き換えることにある。

$$\chi_{\Omega}(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } x \in \Omega_d \\ 0 & \text{if } x \in D \setminus \Omega_d \end{cases} \quad (12)$$

上式の χ_{Ω} を用いれば、固定設計領域 D 内の座標 x の点の、 χ_{Ω} 内での有無を判断することにより、最適構造を決定することができる。しかし、この式に基づいて最適化を行う場合には、固定設計領域 D 内において関数 χ_{Ω} の値について無限個の不連続性を許容することになり、即ち、要素配置が無限個の不連続を含む形態で得られる可能性があり、数学的に最適解が存在しないことが証明されている。この問題を解決して、特性関数に関する最適化問題を、大域的な意味で、連続な密度関数の最適化問題に置き換え、均質化法を用いた緩和法[2]や、それを簡易に定式化したSIMP法[3]が提案されている。これらの方法では、緩和された最適化問題は、空孔を模した非常に弱い材料と母材とで構成される複合材料における、母材の体積含有率の最適化問題と解釈できる。このような最適化問題においては、構造が空孔が判断が困難なグレーの領域がしばしば生じるが、SIMP法はこの複合材料における体積含有率を示す密度関数と物性値との関係の非線形性をパラメータにより調整でき、明確な構造を得易いという利点があるため、多くの研究で用いられている。

本研究でも、SIMP法に基づき、密度関数と複合材料の物性定数の関係式を以下のように表す。

$$\alpha^* = \rho^{p_{\alpha}} \alpha_0 \quad (13)$$

$$\sigma^* = \rho^{p_{\sigma}} \sigma_0 \quad (14)$$

$$\lambda^* = \rho^{p_{\lambda}} \lambda_0 \quad (15)$$

with

$$0 \leq \rho(x) \leq 1, x \in \Omega_{TE} \quad (16)$$

ここで、上添え字*はその値が複合材料の物性定数であることを示し、下添え字 $_0$ は母材の物性定数であることを示す。 p_{α} と p_{σ} , p_{λ} は正のペナライゼーションパラメータである。なお、本研究では熱電材料により構成される部分の構造最適化を目的とするため、密度関数は Ω_{TE} にのみ定義される。

以上に加え体積制約を導入し、トポロジー最適化問題は以下のように定式化される。

$$\underset{\rho}{\text{minimize}} J(\rho, T, V) \quad (17)$$

where

$$\int_{\Omega_{TE}} \rho dx \leq U_V \quad (18)$$

ここで U_V は体積制約の上限値である。

3 数値計算の実装

3.1 アルゴリズム

以上の最適化を以下のアルゴリズムで行う。

1. 密度関数 ρ の初期値を設定する。
2. 収束するまで以下の計算を繰り返す。
 - (a) 状態変数 V と T を、式 (5) と式 (6) の状態方程式を有限要素法で解くことで求める。
 - (b) 式 (11) の目標関数と総体積を求める。
 - (c) 目標関数の密度関数 ρ に関する感度を求める。また、総体積の感度も求める。
 - (d) 得られた感度に基づき、MMA を用いて密度関数 ρ を更新する。

3.2 有限要素法における密度関数の設定

SIMP 法で用いられる密度関数は、有限要素法解析において適切な方法で離散化され、書く有限要素に設定される必要がある。最も一般的な方法は、密度関数を区分的に一定な関数とし、各有限要素中では一定の値を持つとする方法である。このとき、離散化された密度関数の解像度は有限要素メッシュの細かさと同くなる。ただし、式 (5) と式 (6) のような、強い非線形性を持つ状態方程式を解く際に、安定した解の収束を得るには、メッシュの選択が非常に重要になる。例えば、トポロジー最適化においては、密度関数分布をビットマップ画像として抽出することが容易なため、正方形の構造メッシュがしばしば用いられるが、著者らは式 (5) と式 (6) を解く際に正方形の構造メッシュでは解の収束が得られない場合があった。よって、画像抽出の容易さと解析の安定性を両立されるためには、密度関数の離散化と有限要素解析に用いられるメッシュは独立して選択されるべきと考える。ここでは、密度関数のコントロールポイントを格子状に設定し、密度関数をその間の関数を双一次に補間することで設定する。そして、有限要素解析は任意に設定されたメッシュを用いて以上の関数分布を用いて行われる。密度関数の値の更新はコントロールポイントにおける関数の値を更新することで行う。

4 数値例

いくつかの数値例により、本手法の妥当性を検証する。全ての有限要素解析は商用ソフトである COMSOL Multiphysics を用いて行う。全ての有限要素解析では、二次要素が用いられる。式 (13)-(15) で仕様されるペナライゼーションパラメタ p_α と p_σ , p_λ の値は全て 1 とする。

最初に、本数値例で使用する物性定数について述べる。p 型材料として $(\text{Bi}_{0.2}\text{Sb}_{0.8})_2\text{Te}_3$ を用いて、n 型材料として $\text{Bi}_2(\text{Te}_{0.97}\text{Se}_{0.03})$ を用いる。ゼーベック係数 α と電気伝導率 σ 、熱伝導率 λ が温度依存性を持つものとし、それらの値は文献 [4] で計測されたものを使用する。なお、物性定数の温度依存性は熱電材料においてのみ考慮する。電極の材料は銅とし、物性定数は $\alpha = 6.5 \times 10^{-6}(\text{V}/^\circ\text{C})$, $\sigma = 5.9 \times 10^{10}(\text{S}/\text{mm})$, $\lambda =$

$3.5 \times 10^5(\text{W}/\text{mm}/^\circ\text{C})$ と定める。抵抗に使用する材料はゼーベック係数 α が 0 で銅と同じ熱伝導率を有し、電気伝導率を任意に設定する架空の材料とする。熱電装置の出力は外部抵抗値に依存し、熱電材料の抵抗値と外部抵抗の抵抗値が等しい時に最大となる。しかし、本研究においては、最適化過程で熱電材料部の形状が変化する度に抵抗値が変化するため、最適な抵抗値を定めることが困難である。そこで、本研究では外部抵抗値を数値例に応じて一定値に定める。

図 3 に示す逆 L 字型の熱電ハーベスタの最適化を行う。物性定数の違いが最適形状に与える影響について検証するため、 Ω_{TE} にそれぞれ p 型と n 型の熱電材料を用いて最適化を行う。解析領域の厚みは 1mm とする。境界 Γ_{DT_0} と Γ_{DT_1} の温度はそれぞれ 50°C と 300°C とする。体積制約は Ω_{TE} の総体積の 25% と 50%, 75% に設定する。密度関数のコントロールポイントを合計で 7500 個、領域 Ω_{TE} に 0.5mm 間隔で設定する。解析領域は 3042 個の三角形要素で離散化する。密度関数の初期値は、体積制約に応じ、それぞれ 0.75 と 0.5, 0.25 とする。

また、最初に述べたように、領域 Ω_L の抵抗値を領域 Ω_{TE} の抵抗値に合わせる必要がある。しかし、最適化前ではその値は明らかではないため、ここでは、図 4 に用いる基準形状における抵抗値を求め、その値を領域 Ω_L の抵抗値として設定する。

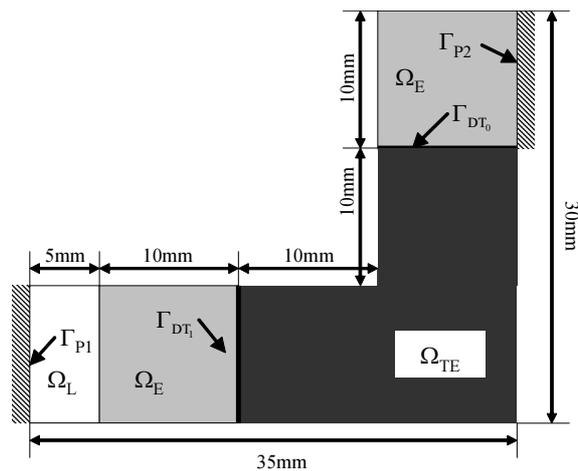


Fig.3 Design domain of example 1

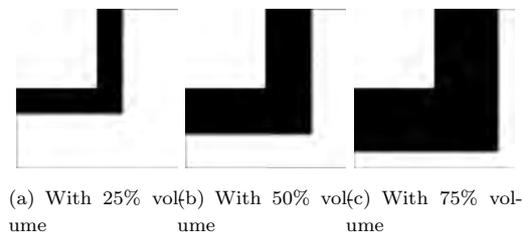


Fig.4 Nominal configurations for example 1

図 5 と図 6 に 50 回の繰り返し計算で得られた最適解をそれぞれ示す。全ての場合について体積制約はアクティブになった。図 7 に目標関数の収束履歴を示す。以上より、本手法で妥当な最適解が得られることがわかった。

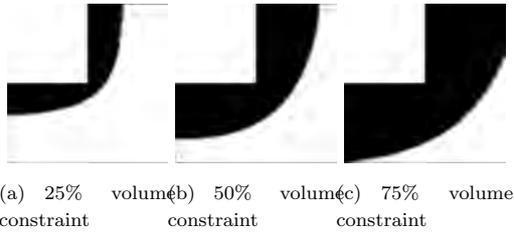


Fig.5 Optimal configurations of example 1 with p-type material

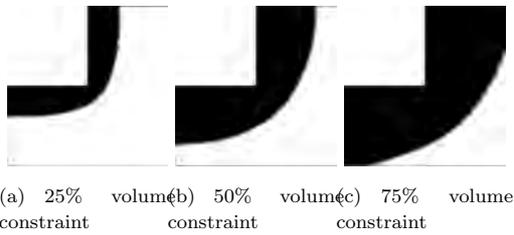


Fig.6 Optimal configurations of example 1 with n-type material

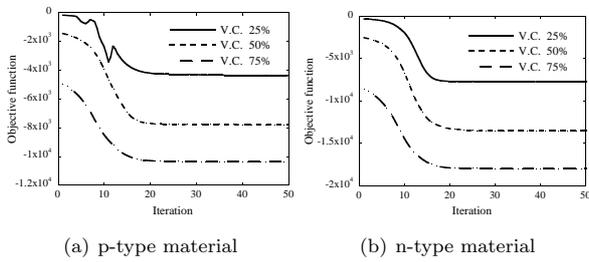


Fig.7 Convergence histories

5 結言

本研究では、COMSOL Multiphysics を用いて熱電ハーベスタのトポロジー最適化法を構築し、数値例によりその妥当性を検証した。

参考文献

- [1] L. D. Landau, L. P. Pitaevskii, and E.M. Lifshitz. *Electrodynamics of Continuous Media, Second Edition*. Butterworth-Heinemann, Oxford, 1984.
- [2] M. P. Bendsøe and N. Kikuchi. Generating optimal topologies in structural design using a homogenization method. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 71(2):197–224, 1988.
- [3] M. P. Bendsøe and O. Sigmund. Material interpolation schemes in topology optimization. *Arch. Appl. Mech.*, 69(9):635–654, 1999.
- [4] D. Ebling, M. Jaegle, M. Bartel, A. Jacquot, and H. Böttner. Multiphysics simulation of thermoelectric systems for comparison with experimental device performance. *J. Electron. Mater.*, 38(7):1456–1461, 2009.