

شیوه‌سازی الکتروشیمیایی-حرارتی سلول باتری لیتیوم-یون خودروی الکتریکی*

مقاله علمی - پژوهشی

محمد امیر بیاتی نژاد^(۱) آرش محمدی^(۲)

چکیده امروزه مشکلاتی مانند تولید آلاینده‌ها و کاهش منابع فسیلی از جمله مشکلات اصلی جهانی شده است. تعداد زیاد خودروهایی که از سوخت‌های هیدروکربنی استفاده می‌کنند اصلی‌ترین عامل بروز این مشکلات است. استفاده از خودروهای الکتریکی یک راه حل مناسب محسوب می‌شود. یکی از مهم‌ترین مؤلفه‌ها برای باتری خودروهای الکتریکی محاسبه میزان سطح شارژ آن است. در این مقاله یک تک‌سلول باتری لیتیومی منتشری حین چرخه تخلیه به روش الکتروشیمیایی-حرارتی با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی سه‌بعدی شیوه‌سازی شده است. ابتدا نتایج شیوه‌سازی با نتایج آزمایشگاهی ولتاژ و دما اعتبار سنجی شده است. سپس نتایج توزیع پتانسیل سلول الکتریکی در جمع‌کننده جریان، سطح شارژ، غلظت یون لیتیوم در الکترود، توزیع دما و حرارت‌های تولید شده در باتری آورده شده است.

واژه‌های کلیدی باتری لیتیومی، سطح شارژ، غلظت یون لیتیوم.

Electrochemical-Thermal Simulation of Cell Lithium-Ion Battery of Electrical Vehicle

M. A. Bayati Nezhad

A. Mohammadi

Abstract Nowadays, pollution and reduction in fossil resources are major problems for world. The large number of cars which use hydrocarbons fuels is the main factor of this problem. Using of electric vehicles is a suitable solution. One of the most important parameters to calculate for electric vehicles battery is its state of charge. In this paper, a single prismatic cell of lithium ion battery in discharge cycle with electrochemical-thermal has been simulated with 3D CFD. First, numerical results are validated with experimental results of voltage and temperature. Then, the results of the electrical potential distribution in the current collector, state of charge, the lithium ion concentration in electrode, the temperature distribution and generated heat in battery are presented.

Key Words Lithium Ion Battery, State of Charge, Lithium Ion Concentration.

DOI: 10.22067/fum-mech.v31i2.85936

* تاریخ دریافت مقاله ۹۸/۱۲/۱۹ و تاریخ پذیرش آن ۹۹/۴/۱۹ می‌باشد.

(۱) نویسنده مسئول، دانشجوی کارشناسی ارشد دانشکده مهندسی مکانیک دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی.

Email: a.bayatinezhad@sru.ac.ir

(۲) استادیار، دانشکده مهندسی مکانیک دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی.

وارد و یا از آن خارج می‌شود. واکنش‌های انجام شده در فرآیند شارژ و تخلیه به صورت معادلات (۱) تا (۳) است [۲]. در شکل (۱) فرآیند الکتروشیمیایی در باتری لیتیومی طی چرخه تخلیه نشان داده شده است.

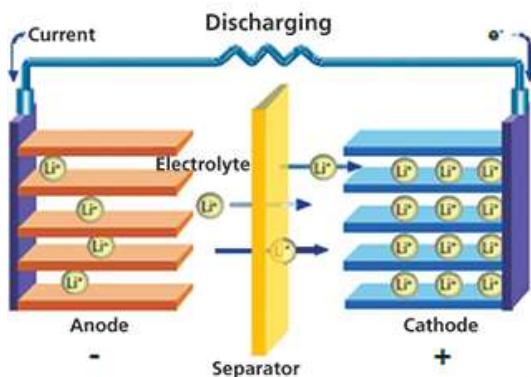
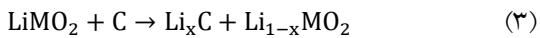
واکنش الکترود مثبت در فرآیند شارژ (تخلیه بالعکس است) [۲]:



واکنش الکترود منفی در فرآیند شارژ (تخلیه بالعکس است) [۲]:



واکنش کلی [۲]:



شکل (۱): فرآیند الکتروشیمیایی در تخلیه باتری لیتیومی [۳]

چالش‌های استفاده از باتری‌های لیتیومی شامل افزایش کارایی، ایمنی و طول عمر باتری است. استفاده از باتری‌های لیتیومی به دلیل ترکیب مواد پرانرژی و حلال‌های الکترولیت ممکن است باعث بروز اشتعال و انفجار باتری شود [۴]. همچنین افزایش حداکثر دما و توزیع غیریکنواخت دما در باتری منجر به عدم تعادل الکتریکی و درنتیجه اختلاف سطح شارژ در سلول‌ها می‌شود؛ بنابراین به یک سیستم مدیریت باتری دقیق نیاز است تا باتری به صورت مناسب ایفای نقش کند. سیستم مدیریت باتری عواملی چون دمای باتری (به‌منظور جلوگیری از افزایش بیش از حد دمای باتری و خطر

مقدمه

خودروهای تمام الکتریکی در آینده جایگزین خودروهای احتراق داخلی خواهد شد. باتری به عنوان بخش تأمین انرژی قوای محرکه این خودروهای الکتریکی است. در بین باتری‌های قابل شارژ باتری‌های لیتیومی به دلیل چگالی انرژی بالا (تقریباً ۲ برابر باتری نیکل کادمیوم)، وزن و حجم سبک‌تر (حدود ۳ تا ۵ برابر دیگر باتری‌ها)، قابلیت شارژ سریع، نرخ پایین خود تخلیه بودن (کمتر از ۱۰ درصد در هر ماه) و عمر طولانی (< ۵۰۰ چرخه)، انتخاب مناسبی برای استفاده در وسایل الکتریکی است [۱]. باتری‌های لیتیومی که اساس کار آن‌ها بر جابجایی یون لیتیوم بین الکترودهای مثبت و منفی است، دارای اجزای جمع‌کننده جریان مثبت (آلومینیوم)، جمع‌کننده جریان منفی (مس)، زبانه مثبت، زبانه منفی، الکترود مثبت (کاتد)، الکترود منفی (آند)، جداساز و محلول الکترولیت است که فضای بین دو الکترود را اشغال می‌کند. عملکرد باتری‌های لیتیومی بدین گونه است که در فرآیند تخلیه (تبديل انرژی شیمیایی به الکتریکی)، یون‌های لیتیوم از ذرات موجود در ساختار الکترود منفی جدا شده و به طرف الکترود مثبت حرکت می‌کنند و درنهایت در ساختار الکترود مثبت قرار می‌گیرند. در فرآیند شارژ (تبديل انرژی الکتریکی به شیمیایی)، بالعکس است و یون‌های لیتیوم از الکترود مثبت جدا شده وارد ساختار لایه‌ای الکترود منفی می‌شوند. در اثر فرآیندهای لیتیوم‌دهی و لیتیوم‌گیری، بار الکتریکی منفی (الکترون) ایجاد شده و توسط جمع‌کننده‌های جریان که ورقه‌هایی با رسانایی الکتریکی بسیار بالایی هستند دریافت می‌شود و بنابراین جریان الکتریکی در مدار بیرونی باتری به حرکت درمی‌آید. این عمل منجر به تولید حرارت نیز خواهد شد. زبانه‌های مثبت و منفی (پایانه‌های مثبت و منفی) به عنوان ورودی و خروجی جریان الکتریکی به صفحات جمع‌کننده جریان متصل شده‌اند. جریان الکتریکی از طریق زبانه‌ها به درون صفحات جمع‌کننده‌های جریان مثبت و منفی

تخمین زد.

پیشنهاد تحقیق

در سال ۲۰۰۲، چانگ و همکاران عملکرد باتری لیتیومی LiFePO_4 را با افزایش هدایت مواد (۸ الی ۱۰ برابر) و استفاده از آلمینیوم، نایوبیوم و زیرکونیوم بهبود بخشیدند [7]. در سال ۲۰۰۶ کنته و همکاران بر روی دستگاه‌های مختلف ذخیره انرژی، مطالعهٔ تطبیقی انجام دادند. آن‌ها به‌وضوح دریافتند که باتری لیتیومی دارای قدرت و چگالی انرژی بیشتری نسبت به سایر دستگاه‌های ذخیره‌سازی انرژی است. علاوه بر این، برخی ویژگی‌ها مانند راندمان بالا، چرخه عمر طولانی، نرخ تخلیه کم و ولتاژ بالا را دارد [8]. در سال ۲۰۰۸، شرکت-های نیسان و ایمارا از تکنولوژی لیتیوم نیکل منگنز کبالت اکسید ($\text{LiNi}_x\text{Mn}_y\text{Co}_z\text{O}_2$) استفاده کردند که منجر به چگالی انرژی بالایی شد [9]. در سال ۲۰۰۸ مدل توینین شامل یک یا دو شبکه‌مدار معادل برای پیش-بینی پاسخ باتری در وضعیت خاصی از شارژ و ولتاژ مدار باز توسط کروز و کرین ارائه شد. این مدل قادر به پیش-بینی پاسخ گذرا از ولتاژ باتری با تغییر جریان است و بنابراین می‌توان آن را در شرایط مختلف دینامیکی بکار برد. مزیت این مدل آسانی و سادگی اجرای آن است و عیب آن است که واحدهای مقاومت و خازن ثابت فرض شده و قادر به پیش‌بینی کاهش ظرفیت نیست [10]. در سال ۲۰۱۱، چن و رینک مدل ترکیبی الکتریکی را پیشنهاد کردند که ترکیبی از شبکه‌های مدار معادل و مدل توینین و مدل زمان اجرا بود و در آن، ولتاژ پایانه باتری توسط یک شبکه‌مدار معادل تحت شرایط بارگذاری دینامیکی مختلف شیوه‌سازی شد. مزیت این روش دقّت بالا در شرایط بارگذاری دینامیکی است و عیب آن این است که پارامترهای مدل به‌خوبی به روزرسانی نمی‌شود [11]. در سال ۲۰۱۱ ژینگ و همکاران سیستم مدیریت باتری را به دو دیدگاه ساختار سخت‌افزاری و نرم‌افزاری طبقه‌بندی کردند. در بخش

انفجار)، توزیع دما در سلول باتری (یکنواخت‌سازی دما در سلول باتری)، توزیع غلظت یون لیتیوم در الکترودها و الکتروولیت (جلوگیری از کاهش ظرفیت باتری)، جریان باتری و تعیین محدوده بھینه، ولتاژ باتری و تعیین محدوده بھینه، تخمین سطح شارژ باتری (جلوگیری از افزایش بیش از حد شارژ/تخلیه) و تخمین سطح سلامت باتری را به‌منظور جلوگیری از تخربهای فیزیکی، فرار حرارتی، پیروی و عدم تعادل در سلول ناظارت می‌کند [5]. سیستم مدیریت باتری ممکن است از اجزای بسیاری مانند سنسورها، کنترل‌کننده‌ها و اعمال کننده‌ها که توسط بسیاری از مدل‌ها، الگوریتم‌ها و سیگنال‌ها کنترل می‌شود، تشکیل شود [6]. در حال حاضر، شرکت-هایی همچون A123Systems، BMZ، Tesla، CATL، SK Innovation، LG Chem، Leclanché، Panasonic و BYD به صورت تخصصی و متوجه به تولید باتری‌های لیتیومی جهت استفاده در خودروهای الکتریکی پرداخته‌اند. برای شیوه‌سازی باتری‌های لیتیومی، روش‌های شیوه‌سازی ریاضی (توصیف باتری لیتیومی به کمک زبان ریاضی، قضیه‌ها و نمادها)، شیوه‌سازی به‌وسیله مدار معادل (شامل تعدادی مقاومت و خازن متصل شده به منبع ولتاژ و با خاصیت حفظ تمامی خواص الکتریکی)، شیوه‌سازی الکتریکی-حرارتی (بررسی رفتار حرارتی باتری با قرار دادن ترم منبع تولید گرما و محاسبه دما، جریان، ولتاژ و سطح شارژ) و شیوه‌سازی الکتریکی-شیمیایی (اغلب برای تجزیه و تحلیل عملکرد باتری در رابطه با بسیاری از مواد داخلی و واکنش‌های شیمیایی صورت گرفته در باتری با در نظر گرفتن اثرات الکترودینامیک و ترمودینامیک شیمیایی و درنتیجه محاسبه دما، جریان، ولتاژ، سطح شارژ و توزیع غلظت یون لیتیوم در باتری) وجود دارد. در این مقاله، از شیوه‌سازی کوبیل شده الکتروشیمیایی-حرارتی به‌منظور افزایش دقّت و قابلیت اعتماد در نتایج استفاده خواهد شد. از نتیجه شیوه‌سازی، فرآیند تخلیه باتری صورت می‌گیرد و بنابراین می‌توان سطح شارژ باتری را

بررسی سطح شارژ و ولتاژ تحت آزمایش قرار دادند. آن‌ها نمودار ولتاژ را در حین تخلیه بر حسب زمان در دمای ۲۰ درجه سانتی‌گراد ترسیم و مشاهده کردند که با افزایش زمان، ولتاژ خروجی کاهش یافته است. همچنین مشاهده شده است که با افزایش زمان، سطح شارژ باتری H_{20} نیز کاهش می‌یابد [16]. در سال ۲۰۱۴، روش فیلتر H_{20} پارامترهای باتری را متغیر با زمان در نظر می‌گیرد و نیازی به دانستن مشخصات نویز فرآیند و ویژگی‌های نویز اندازه‌گیری نیست. این مدل به سادگی طراحی شده که دارای قدرت بالا برای عمل در شرایط خاص است. مزیت این روش عملکرد بهینه از نظر دقّت، هزینه محاسبات و بازده زمانی است. عیب این روش این است که تأثیر دما، پیروی و هیسترزیس می‌تواند دقّت مدل را کاهش دهد [17]. در سال ۲۰۱۵، چنگ و همکاران با استفاده از باتری لیتیومی کبالت اکسید و به وسیله نرم‌افزار AutoLion، شبیه‌سازی باتری لیتیومی را توسط مدل فیزیکی-حرارتی در دمای‌های مختلف محیط انجام دادند و تأثیر دما بر مقاومت درونی باتری، دامنه پاسخ ولتاژ و ظرفیت باتری (عمر باتری) را بررسی کردند. کاهش دمای باتری منجر به افزایش محدوده ولتاژ خروجی باتری می‌شود. نشان داده شد که کاهش دمای باتری باعث افزایش مقاومت درونی باتری شده که این عامل در دمای‌های پایین‌تر نسبت به دمای‌های بالاتر سریع‌تر تخریب می‌شود [18]. در سال ۲۰۱۷، بهیرابی، فرتاج و نظری، شبیه‌سازی الکتریکی-حرارتی را برای سلول باتری لیتیومی با استفاده از باتری COMSOL Multiphysics انجام دادند. در این پژوهه از یک سیال خنک‌کننده (آب) جهت کاهش دمای باتری استفاده شده است. مشخص شد که افزایش عدد رینولدز، حداقل دمای باتری را کاهش داده ولی باعث توزیع غیریکنواخت دما به دلیل هدایت نامناسب حرارت می‌شود. همچنین مشخص شد که با افزایش ضخامت

ساخت‌افزار به‌منظور نظارت و اندازه‌گیری پارامترهای باتری مانند ولتاژ باتری، جریان و دما، سیستم‌های مختلف حسگر در سیستم مدیریت باتری گنجانده شد. بخش نرم‌افزار به‌عنوان مرکز سیستم مدیریت باتری در نظر گرفته شد، زیرا ساخت‌افزار را کنترل کرده و سطح شارژ و سطح سلامت را برای همه سنسورها تخمین می‌زند [12]. در سال ۲۰۱۲ روش فیلتر کالمون توسط رُو و وانگ به‌منظور تخمین سطح شارژ ارائه گردید. مزیت این روش دقّت بالای تخمین سطح شارژ تحت تأثیر اختشاشات خارجی مانند نویز است. عیب این روش این است که روش فیلتر کالمون به صورت مستقیم قادر به تخمین سطح شارژ یک سیستم غیر خطی نیست. همچنین نیاز به محاسبات ریاضی پیچیده‌ای دارد [13]. در سال ۲۰۱۲ لی و همکاران یک آزمایش برای تعیین کاهش ظرفیت باتری‌های لیتیومی با تغییرات دما انجام دادند. نتایج نشان می‌دهد که ظرفیت باتری‌ها با الکتروولیت $LiPF_6$ و $LiBF_4$ ، زمانی که دما به کمتر از ۲۰ درجه سانتی‌گراد برسد، به‌طور چشم‌گیری کاهش می‌یابد، در حالی که در دمای ۲۵ درجه سانتی‌گراد، کمتر از ۱۰ درصد کاهش ظرفیت وجود دارد [14]. در سال ۲۰۱۲، بی و همکاران شبیه‌سازی عددی الکتریکی-حرارتی را برای باتری لیتیومی $LiMn_2O_4$ توسط نرم‌افزار Ansys Workbench انجام دادند. در این شبیه‌سازی، توزیع یون لیتیوم در سلول باتری تعیین شد و دریافتند که با کاهش دما، تغییرات غاظت یون لیتیوم افزایش یافته که منجر به از دست رفتن ظرفیت باتری می‌شود. نشان داده شد که گرمای آنتروپی در فرآیند تخلیه با نرخ پایین، غالب و گرمای واکنش در الکترودها در فرآیند تخلیه با نرخ بالا، غالب است. برای اعتبارسنجی با نتایج تجربی به روش آزمون پالس، باتری با جریان ثابت در دمای اتاق (۲۵ درجه سانتی‌گراد) تخلیه شد تا رفتار باتری مشخص گردد. مقایسه این نتایج خطای کمتر از ۲ درصد را نتیجه داد [15]. در سال ۲۰۱۴ ژینگ و همکاران باتری $LiFePO_4$ را به‌منظور

مقیاس سلولی به دست آید. عملکرد مدل برای دامنه دمای محیط ۵ الی ۴۵ درجه سانتی گراد تصدیق داده شد. نتایج نشان می‌دهد که عملکرد باتری به درجه حرارت محیط بسیار وابسته است. با کاهش دمای محیط از ۴۵ درجه سانتی گراد به ۵ درجه سانتی گراد، انرژی در دسترس به $17/1$ درصد و $7/8$ درصد به ترتیب در تخلیه $0/05C$ و $0/5C$ کاهش می‌یابد [21]. در سال ۲۰۱۹ چن و زیونگ در ابتدا یک مدل باتری بهبودیافته به وسیله شبکه عصبی پیشرو با معرفی ورودی‌های تعریف شده جدید، ایجاد کردند. بر اساس مدل شبکه عصبی پیشرو و الگوریتم فیلتر کالمون گسترده، یک روش تخمین سطح شارژ مبتنی بر شبکه عصبی پیشرو طراحی شد و استحکام آن با استفاده از داده‌های تجربی به دست آمده در دماهای مختلف مورد تأیید قرار گرفت. نتایج نشان می‌دهد که روش مبتنی بر شبکه عصبی پیشرو یک روش مؤثر برای برآورد دقیق سطح شارژ در محیط کاربرد پیچیده وسائل نقلیه الکتریکی است [22]. در این مقاله یک تکسلول باتری لیتیومی منتشری در طول چرخه تخلیه با نرخ‌های مختلف به روش الکتروشیمیایی-حرارتی با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی سه‌بعدی و در نرم‌افزار AVL FIRE شبیه‌سازی شده است. استفاده از یک تکسلول سبب کاهش مدت زمان محاسبات و همچنین سادگی در تغییر مؤلفه‌های باتری می‌شود که درنهایت می‌تواند به یک استک باتری لیتیومی تعمیم داده شود. نوآوری این مقاله استفاده از روش الکتروشیمیایی-حرارتی است که با در نظر گرفتن واکنش‌های الکتروشیمیایی بین الکترودها و الکترولیت و همچنین با حل هم‌زمان معادلات الکتریکی، شیمیایی و حرارتی باعث می‌شود که شبیه‌سازی‌ها با دقّت بسیار بالاتری نسبت به اکثر مطالعات پیشین انجام شود. در پژوهش‌های پیشین به علت اینکه روش الکتروشیمیایی-حرارتی نیازمند تعداد زیادی مؤلفه ورودی است و همچنین مدت زمان محاسباتی بسیار بالایی دارد، کمتر از این روش استفاده شده است. نوآوری دیگر این مقاله

صفحات خنک‌کننده، سطح تماس افزایش یافته، انتقال حرارت بیشتر شده، حداکثر دما کاهش و توزیع دما یکنواخت‌تر می‌شود. به منظور اعتبارسنجی نتایج، دمای سلول باتری به روش تجربی و با استفاده از یک دوربین مادون‌قرمز اندازه‌گیری شده است. مشخص شد که سیستم خنک‌کننده دو کاناله، دارای حداکثر دمای پایین تر و توزیع دمای یکنواخت‌تری نسبت به سیستم خنک-کننده تک کاناله است [19]. در سال ۲۰۱۸ تانگ و وو به بررسی خواص حرارتی باتری‌های لیتیومی در طول فرآیند تخلیه پرداختند. در این پژوهش، از یک باتری لیتیومی با ظرفیت 20 آمپرساعت و از جنس LiFePO₄ / MCMB شد. تغییرات گرمای اهمی، گرمای واکنش الکتروشیمیایی و گرمای قطبش در تخلیه با جریان و همچنین ارتباط آن با میزان کاهش ظرفیت باتری در طی فرآیند، بررسی شد. مشخص شد که در هنگام شارژ/تخلیه با نرخ معمولی، گرمای قطبش فعل و گرمای واکنش الکتروشیمیایی، برای کاتد و آند، منبع اصلی تولید حرارت به حساب می‌آید. از بین رفتن ظرفیت در طول فرآیند شارژ/تخلیه، هر دو بر مدت زمان شارژ و تخلیه تأثیر می‌گذارند. همچنین بر سطح شارژ نیز تأثیر گذاشته که موجب تغییر در رفتار حرارتی باتری می‌شود. علاوه بر این مشاهده شد که به دلیل از بین رفتن لیتیوم فعل در طول فرآیند، باتری با چرخه بیشتر، حرارت کلی کمتری را در فرآیند شارژ/تخلیه تولید می‌کند [20]. در سال ۲۰۱۸ حسین‌زاده و همکاران یک مدل الکتروشیمیایی-حرارتی یک‌بعدی را برای توصیف رفتار باتری لیتیومی 53 آمپرساعت و فرمول شیمیایی $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{y}\text{Co}_{1-x-y}\text{O}_2$ در بازه گسترده‌ای از شرایط عملیاتی از جمله شارژ پیوسته ($0/05C$ الی $2C$)، تخلیه پیوسته ($0/05C$ الی $0/05C$) و عملکرد باتری در یک وسیله نقلیه الکتریکی در چرخه رانندگی شهری توسعه دادند. مدل یک‌بعدی یک جفت الکترود با یک مدل حرارتی سه‌بعدی یک سلول ترکیب شده است تا توزیع دما در

الکتریکی در الکترودها و پتانسیل یونی در الکتروولیت طبق معادلات (۸) و (۹) از معادلات بقای شارژ مربوطه محاسبه می‌شوند [23].

$$\nabla \cdot \vec{i}_{ele} = -i_r a_s \quad (8)$$

و

$$\nabla \cdot \vec{i}_{ion} = i_r a_s \quad (9)$$

که تراکم جریان الکتریکی در الکترود (\vec{i}_{ele}) و تراکم جریان یونی در الکتروولیت (\vec{i}_{ion}) به صورت معادلات (۱۰) و (۱۱) است.

$$\vec{i}_{ele} = -\sigma_s \varepsilon_s \nabla \Phi_{ele} \quad (10)$$

و

$$\vec{i}_{ion} = \kappa \varepsilon_e^q (\nabla \Phi_{ion} - \frac{2RT(1-t^+)}{Fc_e} \nabla c_e) \quad (11)$$

رسانش یونی (κ) به غلظت نمک لیتیوم (c_e) و دما بستگی دارد و طبق معادله (۱۲) محاسبه می‌شود [23].

$$\kappa = \kappa_{ref}(c_e) \exp \left[\frac{E_{act,\kappa}}{R} \left(\frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (12)$$

غلظت یون لیتیوم در ذرات جامد (c_s) و غلظت نمک لیتیوم در الکتروولیت (c_e) از معادلات (۱۳) و (۱۴) محاسبه می‌شوند [23].

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial r} \left(D_s \frac{\partial c_s}{\partial r} \right) - \frac{2}{r} D_s \frac{\partial c_s}{\partial r} = 0 \quad (13)$$

و

$$\frac{\partial(\varepsilon_e c_e)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}_e = \frac{(1-t^+) i_r a_s}{F} \quad (14)$$

که شار پخش نمک لیتیوم به صورت معادله (۱۵) است.

$$\vec{j}_e = -D_e \varepsilon_e^q \nabla c_e \quad (15)$$

ضرایب توزیع لیتیوم در ذرات جامد (الکترودها) و الکتروولیت به دما بستگی دارند که به ترتیب طبق روابط (۱۶) و (۱۷) به دست می‌آیند [23].

$$D_s = D_{s,ref} \exp \left[\frac{E_{act,D_s}}{R} \left(\frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (16)$$

و

$$D_e = D_{e,ref} + \delta_1(T - T_{ref}) + \delta_2(T - T_{ref})^2 + \delta_3(T - T_{ref})^3 \quad (17)$$

در محاسبه مؤلفه‌های باتری لیتیومی از جمله سطح شارژ باتری است که همگی با حل معادلات، به صورت مستقیم و در هر لحظه قابل محاسبه است. در صورتی که در مطالعات سایر افراد، اغلب از روش‌های تخمین سطح شارژ مانند روش فیلتر کالمن استفاده شده که هزینه و خطای محاسباتی نسبتاً بالایی دارد. در این مقاله نتایج عددی با نتایج آزمایشگاهی ولتاژ و دما با نرخ تخلیه جریان ثابت اعتبارسنجی شده است. سپس نتایج سطح شارژ باتری لیتیومی، توزیع پتانسیل الکتریکی در جمع‌کننده جریان، غلظت یون لیتیوم در الکترود مشتبث، توزیع دما در سطح باتری و حرارت‌های تولیدشده طی فرآیند تخلیه در نرخ‌های ۱C، ۳C و ۵C محاسبه شده است.

معادلات حاکم

معادلات شبیه‌سازی الکتروشیمیابی-حرارتی شامل کوبیل معادلات الکتریکی، شیمیابی و حرارتی است. ابتدا معادلات بقا و انتقال در جمع‌کننده‌های جریان و ناحیه واکنش حل می‌شود. ناحیه واکنش شامل الکترود مشتبث، الکترود منفی و جداساز است. پتانسیل الکتریکی (Φ_{ele}) از معادله بقای شارژ الکتریکی یعنی معادله ۴ به دست می‌آید [23].

$$\nabla \cdot \vec{i}_{ele} = 0 \quad (4)$$

که تراکم جریان الکتریکی در جمع‌کننده‌های جریان برابر با معادله (۵) است.

$$\vec{i}_{ele} = -\sigma_c \nabla \Phi_{ele} \quad (5)$$

مقدار دما از معادله تعادل انرژی یعنی معادله (۶) محاسبه می‌شود [23].

$$\frac{\partial(\rho c_p c_e T)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{q} = -\vec{i}_{ele} \cdot \nabla \Phi_{ele} \quad (6)$$

که شار حرارتی رسانش برابر با معادله (۷) است.

$$\vec{q} = -\lambda_c \nabla T \quad (7)$$

در مدل الکتروشیمیابی-حرارتی، واکنش الکتروشیمیابی در حجم الکترود و در سطح بین الکتروولیت و ذرات الکترود محاسبه می‌شود. پتانسیل

یکدیگر متصل شده‌اند. جنس الکترود مثبت از $\text{Li}[\text{NiMnCoO}_2]$ گرافیت، جنس جمع‌کننده جریان مثبت از آلومنیوم و جنس جمع‌کننده جریان منفی از مس است. الکتروولیت بکار رفته در باتری نیز از نوع لیتیوم هگزا فلورو فسفات (LiPF_6) و ترکیبی از اتیلن کربنات و دی متیل کربنات است. مشخصات باتری در جدول (۱) و ضخامت و تعداد لایه‌های اجزای باتری در جدول (۲) آورده شده است.

جدول (۱): مشخصات باتری ePLB C020 [26]

نوع مشخصه	مقدار مشخصه (واحد)
ضخامت	۷ (میلی‌متر)
طول (به جز زبانه‌ها)	۱۹۵ (میلی‌متر)
عرض	۱۲۵ (میلی‌متر)
وزن	۴۰۷ (گرم)
ولتاژ اسمی	۳/۶۵ (ولت)
ظرفیت اسمی	۲۰ (آمپرساعت)
بیشینه ظرفیت	۲۱ (آمپرساعت)
انرژی مخصوص	۱۷۵ (وات‌ساعت/کیلوگرم)
چگالی انرژی	۳۷۰ (وات‌ساعت‌لیتر)
حد ولتاژ توصیه شده تخلیه	۳ (ولت)
حد ولتاژ پایین تخلیه	۲/۵ (ولت)

جدول (۲): ضخامت و تعداد لایه‌های اجزای باتری [26]

جنس ماده	ضخامت (میکرومتر)	تعداد لایه‌ها
آلومینیوم	۲۱	۱۷
مس	۱۲	۱۸
+ الکترود	۷۰	۳۴
- الکترود	۷۹	۳۶

خواص الکتریکی و شیمیایی الکتروولیت LiPF_6 باتری ePLB C020 مطابق جدول (۴) است. خواص الکتریکی جمع‌کننده‌های جریان مثبت و منفی باتری ePLB C020 نیز به صورت جدول (۵) است. خواص حرارتی اجزای باتری نیز در جدول (۳)

رابطه پتانسیل مدار باز (Φ_{oc}) استفاده شده برای این باتری، طبق معادله (۱۸) محاسبه می‌شود [24].

$$\begin{aligned}\Phi_{oc} = & 8 + 5.06\theta_{se} - 12.58\theta_{se}^{0.5} \\ & - 8.63 \times 10^{-4}\theta_{se}^{-1} + 2.18 \times 10^{-5}\theta_{se}^{1.5} \\ & - 0.46 \exp[15(0.06 - \theta_{se})] \\ & - 0.55 \exp[-2.43(\theta_{se} - 0.92)]\end{aligned}\quad (18)$$

سطح شارژ باتری به صورت معادله (۱۹) تعریف می‌شود [23].

$$\text{SOC} = \frac{\theta - \theta_0}{\theta_1 - \theta_0} \quad (19)$$

استوکیومتری متوسط طبق معادله (۲۰) محاسبه می‌شود [23].

$$\theta = \frac{\bar{c}_s}{c_{s,\max}} \quad (20)$$

که غلظت یون لیتیوم متوسط در ذره (\bar{c}_s) طبق رابطه (۲۱) به دست می‌آید.

$$\bar{c}_s = \frac{1}{r_s} \int_0^{r_s} c_s(r, t) dr \quad (21)$$

بنابراین سطح شارژ باتری به صورت مستقیم در هر لحظه و در تمامی نقاط الکترود، با استفاده از غلظت یون لیتیوم متوسط در سطح جامد (الکترود) محاسبه خواهد شد. غلظت یون لیتیوم نیز طبق معادلات (۱۳) و (۱۶)، وابسته به دما است؛ بنابراین سطح شارژ باتری تابع مؤلفه‌های بسیاری از جمله دما (T)، استوکیومتری سطح در سطح شارژ صفر و یک (θ_0 و θ_1)، ضریب توزیع یون لیتیوم در سطح جامد (D_s) و غلظت یون لیتیوم در ذرات جامد (c_s) است.

مشخصات باتری

در این مقاله جهت شبیه‌سازی باتری لیتیومی از باتری لیتیوم پلیمر نوع ePLB C020 ساخت شرکت EiG کره جنوبی استفاده می‌کنیم [25]. این شبیه‌سازی توسط نرم‌افزار AVL FIRE انجام شده است. هر استک این باتری دارای ۳۶ سلول است که به صورت موازی به

نرخ‌های $1C$ ، $2C$ و $3C$ انجام می‌شود. در شبیه‌سازی‌ها از دو فاز جامد (الکترودها و جمع‌کننده‌های جریان) و فاز مایع (الکتروولیت) جهت انتقال یون‌های لیتیوم بین الکترودها استفاده شده است. ناحیه جداساز به عنوان فاز مایع یا الکتروولیت در نظر گرفته شده و تمامی خواص الکتریکی، حرارتی و شیمیایی الکتروولیت به این ناحیه داده شده و تأثیر آن دیده شده است. معادلات انرژی، فشار و حرارت ویسکوز برای این ناحیه حل شده و نوع سیال نیز تراکم ناپذیر انتخاب شده است. تأثیر صفحه متخلخل جداساز نیز با استفاده از عدد تخلخل وارد شبیه‌سازی می‌شود.

دیده می‌شود.

در این مقاله، شبیه‌سازی سه‌بعدی یک تک‌سلول باتری لیتیومی به صورت الکتروشیمیایی-حرارتی صورت گرفته است؛ بنابراین با توجه به بیشینه طرفیت استک باتری حاوی ۳۴ سلول (۲۱ آمپرساعت)، طرفیت یک تک‌سلول برابر با 6176 آمپرساعت است. سلول‌ها به صورت موازی متصل شده‌اند پس تک‌سلول می‌باشد ولتاژی برابر با ولتاژ ۳۴ سلول داشته و جریان آن بر ۳۴ تقسیم شود. دمای محیط 25 درجه سانتی‌گراد در نظر گرفته شده است. سطح شارژ اولیه باتری را برابر یک (صد در صد) قرار داده و چرخه تخلیه جریان ثابت برای

جدول (۳): خواص حرارتی اجزای باتری [26]

هدایت حرارتی (وات/متر کلوین)	ظرفیت حرارتی (ذول/کیلوگرم کلوین)	چگالی (کیلوگرم/مترمکعب)	جنس ماده
۲۲۸	۹۰۳	۲۷۰۲	آلومینیوم
۳۹۸	۳۸۵	۸۹۳۳	مس
۰/۳۴	۱۹۷۸	۱۰۱۷	جداساز
۱/۵۸	۱۲۷۰	۲۸۹۵	الکترود +
۱/۰۴	۱۴۳۷	۱۵۵۵	الکترود -

جدول (۴): خواص الکتریکی و شیمیایی الکتروولیت باتری ePLB C020 [23,26]

خاصیت (واحد)	در الکترود منفی	در جداساز	در الکترود مثبت	هدایت الکتریکی (A/V.m)
ضریب توزیع یون لیتیوم (m^2/s)	فرمول (۱۶)	فرمول (۱۶)	فرمول (۱۶)	فرمول (۱۶)
تخلخل (-)	$0/۵۰۳$	۱	$0/۶۳$	
شاخص Bruggeman	$۳/۳$	$۳/۳$	$۳/۳$	فرمول (۱۶)
عدد انتقال کاتیون (-)	$۰/۳۶۳$	$۰/۳۶۳$	$۰/۳۶۳$	فرمول (۱۶)
غلظت اولیه یون لیتیوم ($kmol/m^3$)	۲	۲	۲	فرمول (۱۶)

جدول (۵): خواص الکتریکی جمع‌کننده‌های جریان باتری ePLB C020 [23,26]

خاصیت (واحد)	جمع‌کننده جریان مثبت (آلومینیوم)	جمع‌کننده جریان منفی (مس)
هدایت الکتریکی (A/V.m)	۳۸۳۰۰۰۰	۶۳۳۰۰۰۰

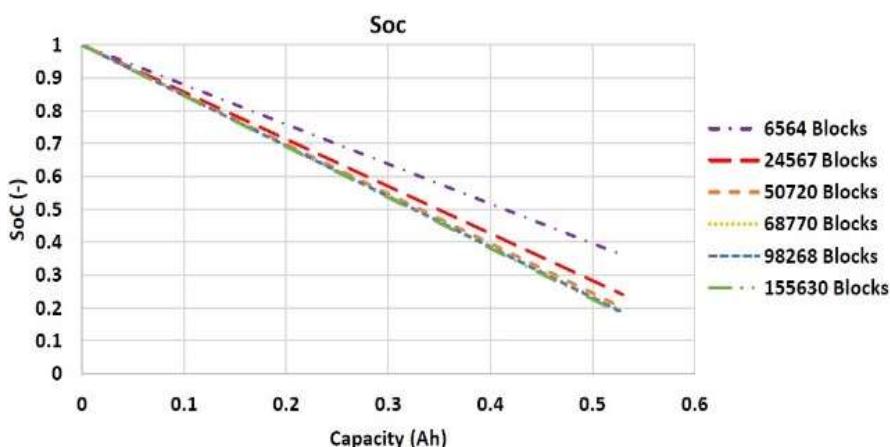
مختلف نشان داده شده است. همان‌طور که دیده می‌شود، شبکه محاسباتی دقیق و مناسب برای انجام شبیه‌سازی‌ها، شبکه محاسباتی با ۶۸۷۷۰ شبکه است و افزایش تعداد شبکه محاسباتی بیش از آن تأثیری در نتایج شبیه‌سازی نخواهد داشت و تغییرات سطح شارژ کمتر از یک درصد خواهد بود.

در جدول (۶) تعداد تقسیمات شبکه محاسباتی در راستاهای مختلف سلول باتری لیتیومی ارائه شده است.

تعداد شبکه‌های ایجاد شده در کل حجم بخش‌های مختلف باتری نیز به صورت جدول (۷) است.

ایجاد شبکه محاسباتی

در ابتدای شبیه‌سازی می‌باشد مبحث استقلال از شبکه را جهت دقیق بودن نتایج خروجی بررسی کرد. برای این منظور، سلول باتری لیتیومی را با گام‌های مکانی و تعداد تقسیمات مختلف شبکه‌بندی کرده و نتایج خروجی برای مؤلفه سطح شارژ باتری طی فرآیند تخلیه جریان ثابت با نرخ ۱C بررسی شده است. شبکه‌بندی محاسباتی توسط نرم‌افزار AVL FIRE انجام شده و به صورت منظم و سازمان یافته است. در شکل (۲) نمودار تغییرات سطح شارژ باتری بر حسب ظرفیت در تعداد شبکه‌بندی‌های



شکل (۲): تغییرات سطح شارژ بر حسب ظرفیت باتری در نرخ ۱C با تعداد شبکه محاسباتی مختلف

جدول (۶): تعداد تقسیمات شبکه محاسباتی در راستاهای مختلف سلول باتری

تعداد تقسیمات	راستا
۶۵	طول باتری (به جز زبانه‌ها)
۴۲	عرض باتری
۵	طول زبانه‌ها
۱۳	عرض زبانه‌ها
۴	ضخامت جمع‌کننده جریان منفی همراه با زبانه منفی
۶	ضخامت الکترود منفی
۵	ضخامت جدار
۶	ضخامت الکترود مثبت
۴	ضخامت جمع‌کننده جریان مثبت همراه با زبانه مثبت

جدول (۷): تعداد شبکه محاسباتی در حجم بخش‌های مختلف سلول باتری

تعداد شبکه محاسباتی	بخش
۱۱۱۸۰	جمع‌کننده جریان منفی همراه با زبانه منفی خروجی
۱۶۲۸۰	الکترود منفی
۱۳۶۵۰	جداساز
۱۶۲۸۰	الکترود مثبت
۱۱۱۸۰	جمع‌کننده جریان مثبت همراه با زبانه مثبت خروجی
۶۸۷۷۰	کل سلول باتری

جدول (۸): اجزای سلول باتری لیتیومی

نام بخش	شماره
جمع‌کننده جریان منفی	۱
زبانه منفی	۲
الکترود - (آند)	۳
جداساز (الکتروولیت)	۴
الکترود + (کاتد)	۵
جمع‌کننده جریان مثبت	۶
زبانه مثبت	۷

چرخه شبیه‌سازی

در این بخش، جهت تأیید و تصدیق نتایج شبیه‌سازی، چرخه‌های تخلیه جریان ثابت تحت نرخ‌های تخلیه ۳C، ۲C، ۱C و ۵C انجام می‌شود. جریان‌های تخلیه برای یک تک‌سلول باتری ePLB C020 به صورت جدول (۹) است.

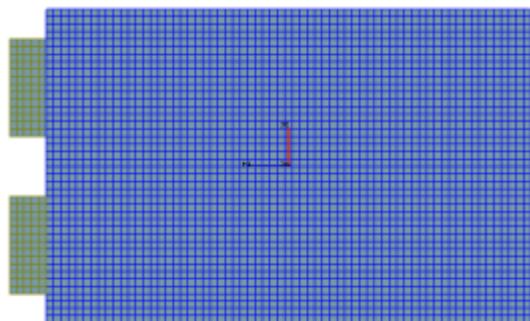
جدول (۹): نرخ و جریان تخلیه تک‌سلول باتری لیتیومی

جریان تخلیه (آمپر)	نرخ تخلیه
۰/۶۱۷۶	۱C
۱/۲۳۵۲	۲C
۱/۸۵۲۸	۳C
۳/۰۸۸	۵C

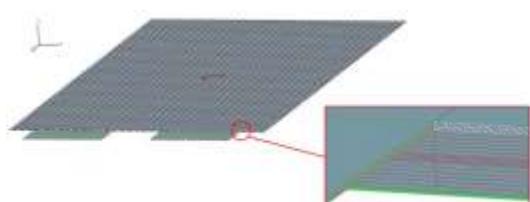
اعتبارسنجی نتایج شبیه‌سازی

برای اعتبارسنجی نتایج شبیه‌سازی الکتروشیمیایی-

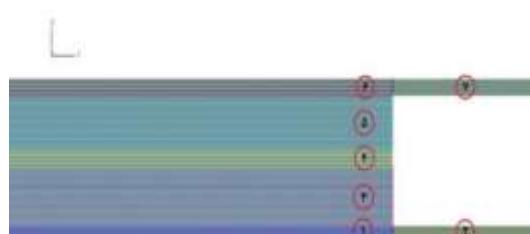
هندسه و شبکه محاسباتی تک‌سلول ایجاد شده در نرم‌افزار AVL FIRE مطابق شکل‌های (۳) و (۴) است. نحوه قرارگیری بخش‌های مختلف سلول باتری در شکل (۵) و جدول (۸) نشان داده شده است.



شکل (۳): هندسه و شبکه‌بندی تک‌سلول باتری لیتیومی



شکل (۴): هندسه و شبکه‌بندی تک‌سلول باتری لیتیومی



شکل (۵): نحوه قرارگیری اجزای سلول باتری لیتیومی

محاسبه شده و با نتایج آزمایشگاهی مقایسه شده است. شکل (۷) این نمودار را نشان می‌دهد که تطبیق خوبی با نتایج آزمایشگاهی دارد. بیشینه مقادیر خطای در نرخ‌های $1C$ ، $2C$ و $5C$ به ترتیب برابر با 0.127 ، 0.038 و 0.05 درصد است. بیشترین مقدار خطای مجدداً در نرخ تخلیه $5C$ رخ داده که علت آن تشدید واکنش‌های $5C$ است. بیشترین مقدار خطای از $1C$ در نرخ تخلیه اولیه سطح باتری در تمامی نرخ‌های تخلیه از مقدار دمای اولیه 298 کلوین شروع شده است. در نرخ‌های تخلیه $1C$ ، $2C$ ، $3C$ و $5C$ دمای متوسط سطح باتری به ترتیب تا مقادیر $300/7$ ، $307/3$ ، 313 و 325 کلوین افزایش یافته است. با افزایش نرخ تخلیه و همچنین افزایش شدت جریان تخلیه، سرعت وقوع واکنش‌های الکتروشیمیایی بین الکترودها و الکتروولیت افزایش یافته است؛ بنابراین با افزایش نرخ تخلیه، حرارت‌های تولید شده اعم از تولید حرارت ژول ناشی از مقاومت‌های درونی باتری و همچنین تولید حرارت واکنش ناشی از واکنش‌های الکتروشیمیایی بین الکترودها و الکتروولیت نیز افزایش می‌یابد که سبب می‌شود تا در یک ظرفیت مشخص، در نرخ‌های تخلیه بالاتر میزان افزایش دمای پیشتری رخ دهد. به عنوان مثال در انتهای فرآیند تخلیه در نرخ‌های تخلیه پایین مانند $1C$ ، افزایش دمای متوسط سطح باتری فقط $2/7$ کلوین بوده درحالی که در نرخ‌های تخلیه بالا مانند $5C$ ، افزایش دمای متوسط سطح باتری 27 کلوین است. ضمناً نتایج آزمایشگاهی در نرخ تخلیه $2C$ جهت تصدق با نتایج شیوه‌سازی در گزارش‌ها وجود ندارد. در انتهای این بخش، تحلیل حساسیت در شیوه‌سازی ارائه شده است. سطح شارژ باتری جهت تعیین مقدار انرژی در دسترس و همچنین انجام عملیات شارژ و تخلیه در محدوده ایمن سطح شارژ (سطح شارژ 20 الی 90 درصد) جهت افزایش طول عمر باتری لیتیومی منشوری (به عنوان یک مقیاس بسیار مهم محسوب می‌شود. بدین منظور، تحلیل حساسیت برای تغییرات سطح شارژ

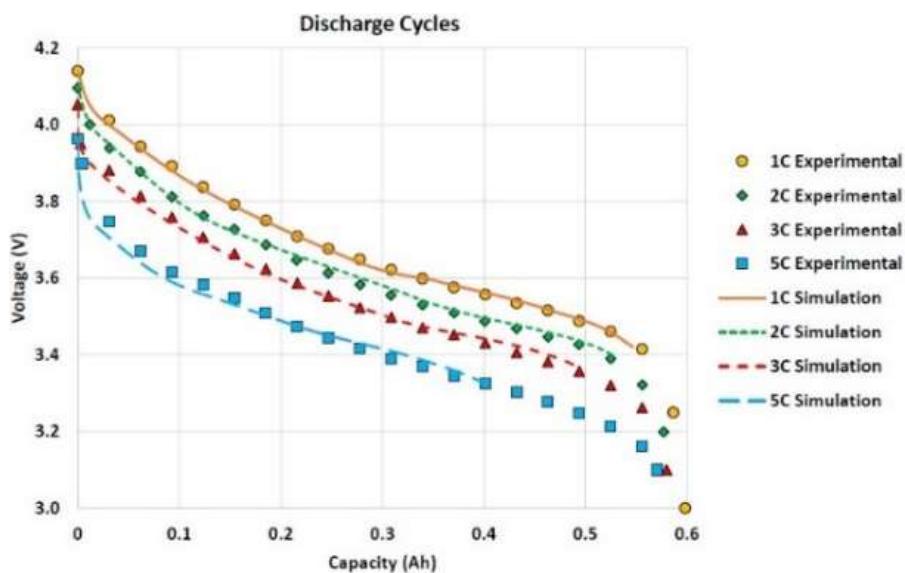
حرارتی، نمودار ولتاژ بر حسب ظرفیت باتری در حالت شیوه‌سازی و آزمایشگاهی با هم مقایسه می‌شوند. نمودار ولتاژ بر حسب ظرفیت باتری در نرخ‌های تخلیه جریان ثابت $1C$ ، $2C$ ، $3C$ و $5C$ مطابق شکل (۶) است. نتایج شیوه‌سازی تطبیق خوبی را با نتایج آزمایشگاهی نشان می‌دهد. کل مدت زمان تخلیه باتری در شیوه‌سازی عددی با نرخ‌های $1C$ ، $2C$ ، $3C$ و $5C$ به ترتیب برابر با 1536 ، 3090 ، 955 و 469 ثانیه است. بیشینه مقادیر خطای در نرخ‌های $1C$ ، $2C$ ، $3C$ و $5C$ به ترتیب برابر با $1/22$ ، $1/37$ ، $1/49$ و $1/65$ درصد است.

با افزایش نرخ تخلیه (به عنوان مثال در نرخ تخلیه $5C$)، شدت جریان تخلیه باتری نیز افزایش یافته و سرعت و میزان وقوع واکنش‌های الکتروشیمیایی بین الکترودها و الکتروولیت و درنتیجه شدت انتقال یون‌های لیتیوم نیز افزایش می‌یابد. این عمل منجر می‌شود تا درصد خطای موجود میان نتایج شیوه‌سازی عددی و نتایج تجربی کمی افزایش یابد. همچنین مشاهده می‌شود که با کاهش نرخ تخلیه (به عنوان مثال در نرخ تخلیه $1C$ ، شدت جریان تخلیه و واکنش‌های الکتروشیمیایی کاهش یافته و از اختلاف میان نتایج تجربی و شیوه‌سازی کاسته شده است. شیوه‌سازی‌ها طبق شکل نشان می‌دهد که منحنی ولتاژ در نرخ‌های تخلیه $1C$ ، $2C$ ، $3C$ و $5C$ به ترتیب از مقادیر $4/11$ ، $4/14$ ، $4/20$ و $3/95$ ولت شروع و به ترتیب تا مقادیر $3/4$ ، $3/37$ ، $3/39$ و $3/23$ ولت کاهش می‌یابد؛ بنابراین با کاهش نرخ تخلیه، ولتاژ باتری از مقادیر بالاتری شروع به کاهش کرده و میزان تغییرات ولتاژ تا انتهای تخلیه افزایش یافته است. همچنین با افزایش نرخ تخلیه، می‌توان به ولتاژ‌های پایین تری در شروع و پایان فرآیند دست پیدا کرد؛ بنابراین با افزایش نرخ تخلیه ولتاژ باتری سریع‌تر به ولتاژ قطع نزدیک شده و شیوه‌سازی در ظرفیت‌های پایین تری متوقف خواهد شد.

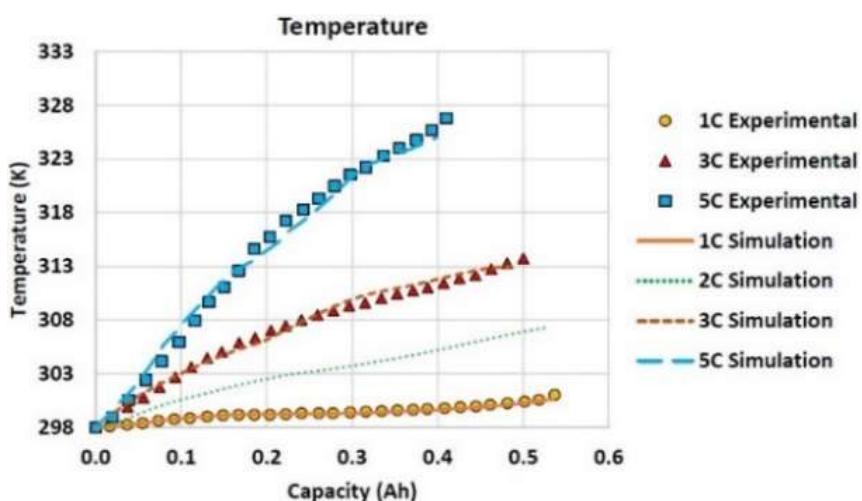
جهت تأیید بیشتر شیوه‌سازی‌ها، تغییرات دمای متوسط سطح بر حسب ظرفیت باتری طی فرآیند تخلیه

شارژ در انتهای فرآیند تخلیه رخ داده که مقدار این تغییرات برای نرخ‌های $0.95C$ و $1.05C$ نسبت به نرخ $1C$ به ترتیب برابر با (0.013 Ah) و (0.015 Ah) درصد است؛ بنابراین با ایجاد تغییرات جزئی در مقدار نرخ تخلیه به عنوان ورودی، بیشترین مقدار تغییرات سطح شارژ به عنوان خروجی بسیار کوچک خواهد بود.

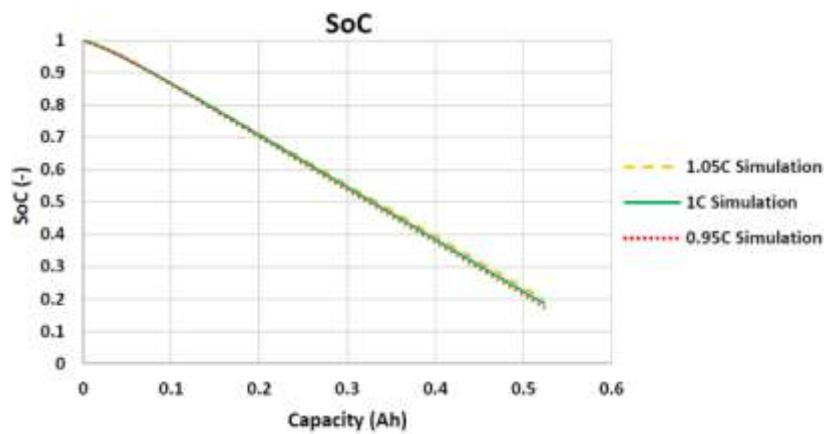
باتری بر حسب ظرفیت (به عنوان خروجی) در نرخ‌های مختلف تخلیه (به عنوان ورودی) که به طور جزئی تغییر داده می‌شوند، انجام شده است. در شکل (۶) نمودار تغییرات سطح شارژ بر حسب ظرفیت باتری در نرخ‌های تخلیه $0.95C$ ، $1C$ ، $1.05C$ و $1.15C$ ارائه شده است. همان‌طور که در شکل مشاهده می‌شود، در یک ظرفیت مشخص با تغییر در نرخ تخلیه، بیشترین مقدار تغییرات سطح



شکل (۶): تغییرات ولتاژ بر حسب ظرفیت باتری در نرخ‌های مختلف تخلیه در حالت شبیه‌سازی (خطوط) و آزمایش تجربی (نقاط) [25]



شکل (۷): تغییرات دمای متوسط سطح باتری بر حسب ظرفیت در نرخ‌های مختلف تخلیه در حالت شبیه‌سازی (خطوط) و آزمایش تجربی (نقاط) [23]

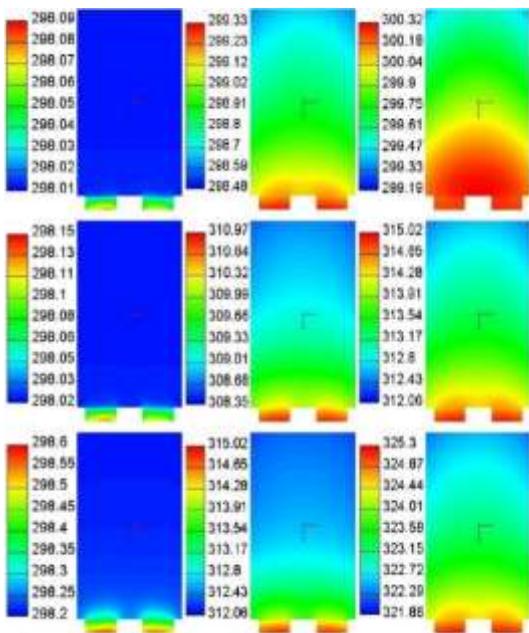


شکل (۸): تحلیل حساسیت تغییرات سطح شارژ (به عنوان خروجی) بر حسب ظرفیت با تغییر جزئی در نرخ تخلیه (به عنوان ورودی)

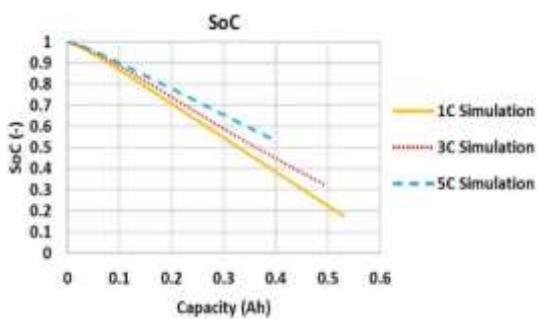
الکتریکی در جمع‌کننده جریان مثبت کاهش یافته است که این امر منجر به کاهش عمر باتری لیتیومی خواهد شد. در شکل (۱۰) توزیع دما در سطح باتری تحت نرخ‌های مختلف تخلیه جریان ثابت آورده شده است. در شبیه‌سازی‌های عددی، زبانه‌های مثبت و منفی (پایانه‌های مثبت و منفی) به عنوان ورودی و خروجی جریان الکتریکی (شرط مرزی) انتخاب شده و جریان الکتریکی از طریق این زبانه‌ها، وارد صفحات جمع‌کننده‌های جریان شده و یا از طریق آن از صفحات جمع‌کننده خارج شده و وارد مدار بیرونی باتری می‌شود. هنگامی که جریان الکتریکی از طریق زبانه‌های باتری وارد می‌شود، به علت کوچک بودن سطح مقطع زبانه‌ها نسبت به صفحات جمع‌کننده جریان، تراکم جریان الکتریکی در زبانه‌ها افزایش می‌یابد. افزایش تراکم جریان سبب ایجاد تولید حرارتی اهمی بیشتری در این نواحی خواهد شد و بنابراین مشاهده می‌شود که دما در زبانه‌های باتری افزایش بیشتری خواهد داشت. همچنین به علت هدایت کم حرارتی در گوشه‌های باتری، دما در این نواحی کمتر است. در هر نرخ تخلیه با گذر زمان، بیشینه دما از طرف زبانه‌ها به سمت مرکز باتری گسترش یافته و یکنواختی توزیع دما در سطح سلول باتری کاهش می‌یابد. با کاهش نرخ تخلیه، مدت زمان چرخه تخلیه افزایش یافته و به همین علت میزان گسترش دما به سمت مرکز سلول بیشتر شده است. همچنین با افزایش نرخ تخلیه، به علت تشدید جریان و واکنش‌های الکتروشیمیایی در باتری، یکنواختی پتانسیل

بحث بر روی نتایج

پس از اعتبارسنجی و تصدیق نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های انجام شده با نتایج آزمایشگاهی، سایر مؤلفه‌های باتری تعیین خواهد شد. نتایج حاصل از شبیه‌سازی سه‌بعدی و الکتروشیمیایی-حرارتی یک تک‌سلول باتری لیتیومی ePLB C020 با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی در نرخ‌های تخلیه جریان ثابت ۱C، ۲C و ۵C به دست آمده است. در تمامی کانتورهای ارائه شده در این مقاله، سطر اول مربوط به نرخ تخلیه ۱C از چپ به راست در ابتدا (ثانیه ۱۰ آم)، وسط (ثانیه ۱۵۰۰ آم) و انتهای (ثانیه ۳۰۹۰ آم) تخلیه، سطر دوم مربوط به نرخ تخلیه ۳C از چپ به راست در ابتدا (ثانیه ۱۰ آم)، وسط (ثانیه ۴۸۰ آم) و انتهای (ثانیه ۹۵۵ آم) تخلیه و سطر سوم مربوط به نرخ تخلیه ۵C از چپ به راست در ابتدا (ثانیه ۱۰ آم)، وسط (ثانیه ۲۲۸ آم) و انتهای (ثانیه ۴۶۹ آم) تخلیه است. شکل (۹) نشان‌دهنده توزیع پتانسیل الکتریکی در سطح جمع‌کننده جریان مثبت تحت چرخه‌های مختلف تخلیه جریان ثابت است. در هر لحظه از فرآیند تخلیه و در تمامی نرخ‌های تخلیه، توزیع پتانسیل الکتریکی در جمع‌کننده جریان مثبت تقریباً یکنواخت است. با گذر زمان و در انتهای فرآیند تخلیه، به تدریج یکنواختی پتانسیل الکتریکی در سطح جمع‌کننده جریان مثبت کاهش می‌یابد. همچنین با افزایش نرخ تخلیه، به علت افزایش شدت تخلیه و واکنش‌های الکتروشیمیایی در باتری، یکنواختی پتانسیل



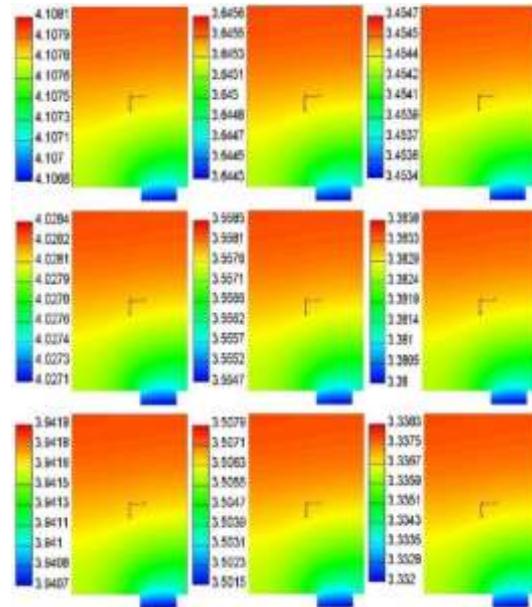
شکل (۱۰): توزیع دما (کلوین) در سطح باتری در ابتدا، وسط و انتهای فرآیند تخلیه (از چپ به راست)، سطر اول در نرخ $1C$ ، سطر دوم در نرخ $3C$ و سطر سوم در نرخ $5C$



شکل (۱۱): تغییرات سطح شارژ باتری بر حسب ظرفیت باتری در نرخ‌های مختلف تخلیه

در شکل (۱۲) کانتور توزیع سطح شارژ در الکترود مثبت مشاهده می‌شود. طبق نتایج، به علت هدایت الکتریکی بهتر در زبانه‌های باتری، سطح شارژ در نزدیکی زبانه‌ها کمتر است و با گذشت زمان، سطح شارژ به طرف مرکز الکترود حرکت می‌کند. با افزایش زمان در هر نرخ تخلیه، یکنواختی سطح شارژ در الکترود مثبت کاهش می‌یابد. با افزایش نرخ تخلیه، یکنواختی سطح شارژ نیز کاهش می‌یابد. به این امر باعث کاهش

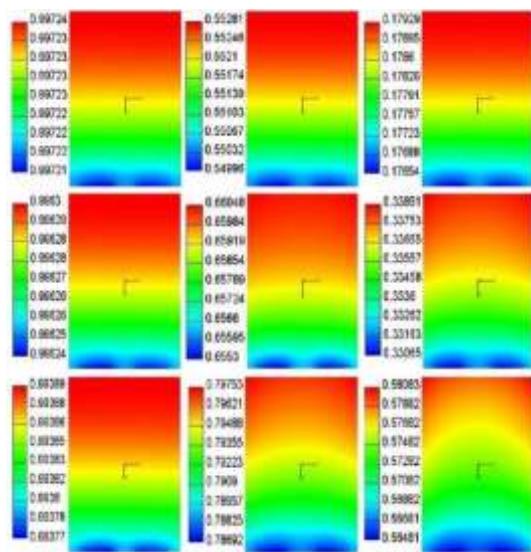
الکتروشیمیایی در باتری، بیشینه دمای سلول افزایش یافته و یکنواختی توزیع دما در سلول کاهش یافته است که این امر ممکن است باعث کاهش عمر و یا انفجار باتری لیتیومی شود. ضمناً به دلیل کوچک بودن ضخامت سلول باتری لیتیومی (207 میکرومتر)، تغییرات دما در جهت عمود بر باتری (از جمع‌کننده جریان مثبت به سمت جمع‌کننده جریان منفی) بسیار کوچک بوده و تغییرات دما عمده‌تاً در صفحه باتری است. در شکل (۱۱)، نمودار سطح شارژ تک‌سلول باتری لیتیومی تحت چرخه تخلیه جریان ثابت آورده شده است. در هر سه نرخ تخلیه $1C$ ، $3C$ و $5C$ ، سطح شارژ باتری از مقدار اولیه یک (صد در صد) با شبیه تقریباً ثابتی شروع به کاهش کرده است. با کاهش نرخ تخلیه، می‌توان به سطح شارژ پایین‌تری دست یافت. در نرخ‌های تخلیه $1C$ ، $3C$ و $5C$ ، سطح شارژ باتری به ترتیب تا مقادیر $0/176$ و $0/325$ و $0/528$ کاهش می‌یابد.



شکل (۱۲): توزیع پتانسیل الکتریکی (ولت) در سطح جمع‌کننده جریان مثبت در ابتدا، وسط و انتهای فرآیند تخلیه (از چپ به راست)، سطر اول در نرخ $1C$ ، سطر دوم در نرخ $3C$ و سطر سوم در نرخ $5C$

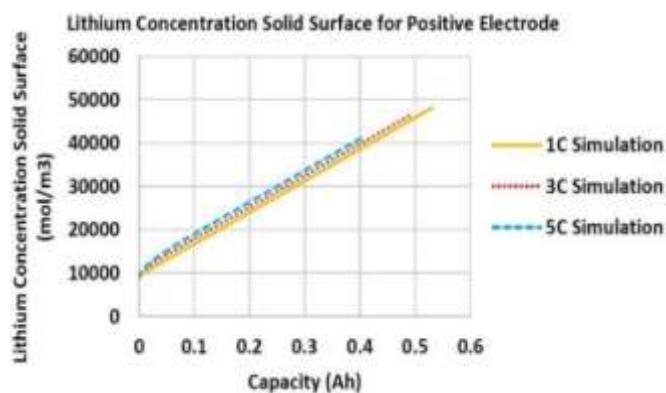
در نرخ‌های تخلیه ۱C، ۳C و ۵C به ترتیب از مقادیر ۸۷۸۰، ۸۸۱۱ و ۸۸۴۲ مول بر مترمکعب شروع شده و به ترتیب تا مقادیر ۴۱۴۳۴، ۴۶۵۱۱ و ۴۸۰۹۳ مول بر مترمکعب افزایش یافته است. مشاهده می‌شود که با کاهش نرخ تخلیه، می‌توان به غلظت‌های بالاتری از یون لیتیوم در الکترود مثبت دست پیدا کرد. در شکل (۱۴) کانتور غلظت یون لیتیوم در الکترود مثبت آورده شده است. غلظت یون لیتیوم در الکترود مثبت در نزدیکی زبانه‌های باتری بیشتر از سایر نقاط است. علت این موضوع تراکم جریان و دمای بالاتر در زبانه‌های باتری است. دمای بالاتر در زبانه‌های باتری سبب افزایش ضریب توزیع یون لیتیوم (طبق معادله ۱۶) در این نواحی شده و بنابراین غلظت یون لیتیوم در نزدیکی زبانه‌های باتری از سایر نقاط بیشتر است و با گذشت زمان و گسترش دما از سمت زبانه‌ها به سمت مرکز هندسه سلول، بیشینهٔ غلظت یون لیتیوم نیز به سمت مرکز سلول گسترش می‌یابد. افزایش نرخ تخلیه نیز باعث افزایش دمای بیشتر در زبانه‌ها و درنتیجه افزایش بیشتر غلظت یون لیتیوم در این نواحی خواهد شد. همچنین با افزایش نرخ تخلیه، به علت افزایش بیشتر در دمای باتری، یکنواختی غلظت یون لیتیوم در الکترود مثبت کاهش یافته که امری نامناسب برای باتری‌های لیتیومی به حساب می‌آید.

طول عمر باتری لیتیومی خواهد شد.

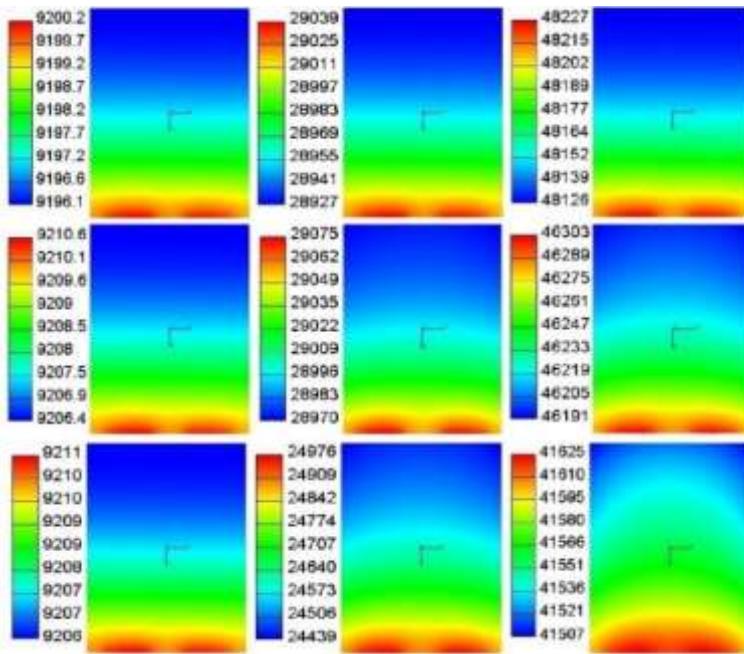


شکل (۱۲): توزیع سطح شارژ (-) در الکترود مثبت در ابتدا، وسط و انتهای فرآیند تخلیه (از چپ به راست)، سطر اول در نرخ ۱C، سطر دوم در نرخ ۳C و سطر سوم در نرخ ۵C

تغییرات غلظت یون لیتیوم در الکترود مثبت باتری لیتیومی تحت نرخ‌های مختلف تخلیه محاسبه گردید. این تغییرات مطابق با شکل (۱۳) است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، با شروع فرآیند تخلیه، یون‌های لیتیوم از سمت الکترود منفی به طرف الکترود مثبت حرکت کرده و غلظت یون لیتیوم در الکترود مثبت با شب تقریباً ثابتی افزایش می‌یابد. غلظت یون لیتیوم در الکترود مثبت



شکل (۱۳): تغییرات غلظت یون لیتیوم در الکترود مثبت بر حسب ظرفیت باتری در نرخ‌های مختلف تخلیه



شکل (۱۴): توزیع غلظت یون لیتیوم (مول بر مترمکعب) در الکترود مثبت در ابتدا، وسط و انتهای فرآیند تخلیه (از چپ به راست)، سطر اول در نرخ 1°C ، سطر دوم در نرخ 3°C و سطر سوم در نرخ 5°C

علت فرآیندهای لیتیومدهی و لیتیومگیری توسط الکترودهای منفی و مثبت، میزان افزایش تولید حرارت اهمی شدیدتر است. با افزایش نرخ تخلیه، به علت افزایش شدت جریان تخلیه، تولید حرارت اهمی نیز بیشتر شده و در کل، تولید حرارت اهمی در نرخهای تخلیه بالاتر مقدار بیشتری دارد.

میزان تولید حرارت واکنش‌های الکتروشیمیایی بین الکترودها و الکتروولیت در نرخهای مختلف تخلیه محاسبه گردید. این تغییرات مطابق با شکل (۱۶) است. مقدار تولید حرارت واکشن در نرخهای تخلیه 1°C , 3°C و 5°C به ترتیب از مقادیر $40/03$, $40/04$ و $40/05$ وات شروع شده و به ترتیب تا مقادیر $40/045$, $40/07$ و $40/081$ وات افزایش می‌یابد. با افزایش نرخ تخلیه، به دلیل افزایش شدت جریان تخلیه و واکنش‌های الکتروشیمیایی در باتری، مقدار و شیب افزایش تولید حرارت واکنش نیز بیشتر شده و در کل، تولید حرارت واکنش در نرخهای تخلیه بالاتر تأثیر چشم‌گیرتری دارد.

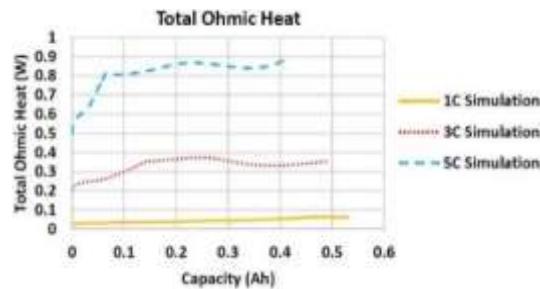
میزان تولید حرارت ژول (تولید حرارت اهمی) ناشی از ناتوانی حرکت الکترون‌ها با سرعت مورد نیاز تحت نرخهای مختلف تخلیه محاسبه گردید. به عبارت دیگر، در حین انجام واکنش‌های الکتروشیمیایی در باتری لیتیومی، الکtron تولیدشده و به وسیله جمع‌کننده‌های جریان دریافت می‌شود. حرکت این الکترون‌ها در صفحات جمع‌کننده جریان و زبانه‌های آن، باعث تولید حرارت ژول خواهد شد که مقدار آن بهشدت جریان تخلیه و میزان رسانایی و هدایت الکتریکی مواد استفاده شده در جمع‌کننده‌ها بستگی دارد. همچنین بخش دیگری از این حرارت مربوط به حرارت‌های تولید شده در اثر مقاومت‌های داخلی اجزای باتری اعم از فاز جامد و مایع است که مانع از انتقال مناسب بار می‌شوند. این تغییرات مطابق با شکل (۱۵) است. مقدار تولید حرارت ژول در نرخهای تخلیه 1°C , 3°C و 5°C به ترتیب از مقادیر $40/03$, $40/04$ و $40/05$ وات شروع شده و به ترتیب تا مقادیر $40/062$, $40/036$ و $40/088$ وات افزایش می‌یابد. در ابتدا و انتهای چرخه تخلیه به

انهای تخلیه افزایش یافته است. همچنین با افزایش نرخ تخلیه، می‌توان به ولتاژهای پایین‌تری در شروع و پایان فرآیند دست پیدا کرد.

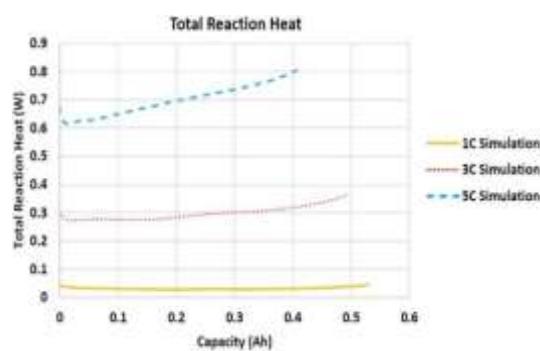
۲. در هر لحظه از فرآیند تخلیه و در تمامی نرخ‌های تخلیه، توزیع پتانسیل الکتریکی در جمع‌کننده جریان ثابت تقریباً یکنواخت است. با گذشت زمان و در انتهای فرآیند تخلیه، به تدریج یکنواختی پتانسیل الکتریکی در سطح جمع‌کننده جریان ثابت کاهش می‌یابد. همچنین با افزایش نرخ تخلیه، به علت افزایش شدت جریان و واکنش‌های الکتروشیمیایی در باتری، یکنواختی پتانسیل الکتریکی در جمع‌کننده جریان ثابت کاهش یافته است که این امر منجر به کاهش عمر باتری لیتیومی خواهد شد.

۳. به علت تراکم بیشتر جریان در زبانه‌ها، دما در زبانه‌های باتری بالاتر از سایر مناطق باتری است. همچنین به علت هدایت کم حرارتی در گوشه‌های باتری، دما در این نواحی کمتر است. در هر نرخ تخلیه با گذشت زمان، بیشینه دما از طرف زبانه‌ها به سمت مرکز باتری گسترش یافته و یکنواختی توزیع دما در سطح سلول باتری کاهش می‌یابد. با کاهش نرخ تخلیه، مدت زمان چرخه تخلیه افزایش یافته و به همین علت میزان گسترش دما به سمت مرکز سلول بیشتر شده است. همچنین با افزایش نرخ تخلیه، به علت تشدید جریان واکنش‌های الکتروشیمیایی در باتری، بیشینه دمای سلول افزایش یافته و یکنواختی توزیع دما در سلول کاهش یافته است که این امر ممکن است باعث کاهش عمر و یا انفجار باتری لیتیومی شود. ضمناً به دلیل کوچک بودن ضخامت سلول باتری لیتیومی تغییرات دما در جهت عمودی بر باتری بسیار کوچک بوده و تغییرات دما عمده‌تاً در صفحه باتری است.

۴. در هر سه نرخ تخلیه، سطح شارژ باتری از مقدار اولیه یک (صد در صد) با شبیه تقریباً ثابتی شروع به کاهش کرده است. با کاهش نرخ تخلیه، می‌توان به سطح شارژ پایین‌تری دست یافت. به علت هدایت



شکل (۱۵): تولید حرارت ناشی از گرمایش ژول بر حسب ظرفیت باتری در نرخ‌های مختلف تخلیه



شکل (۱۶): تولید حرارت ناشی از گرمایش واکنش بر حسب ظرفیت باتری در نرخ‌های مختلف تخلیه

نتیجه‌گیری

در این مقاله یک تک‌سلول سه‌بعدی باتری لیتیومی به روش الکتروشیمیایی-حرارتی به صورت عددی شبیه‌سازی شد. سه چرخه تخلیه جریان ثابت با نرخ ۱C، ۳C و ۵C صورت گرفت. اعتبارسنجی نتایج عددی شبیه‌سازی الکتروشیمیایی-حرارتی در هر سه نرخ تخلیه، تطبیق خوبی با نتایج تجربی دارد. مؤلفه‌های باتری از جمله توزیع پتانسیل الکتریکی در جمع‌کننده جریان، سطح شارژ باتری، غلظت یون لیتیوم در الکترود ثابت، توزیع دمای متوسط در سطح باتری و حرارت‌های تولیدشده طی فرآیند تخلیه در نرخ‌های مختلف محاسبه شد. پس از تحلیل و بررسی، نتایج زیر به دست آمده است:

۱. با کاهش نرخ تخلیه، ولتاژ باتری از مقادیر بالاتر شروع به کاهش کرده و میزان تغییرات ولتاژ تا

c_e	غلاظت نمک لیتیوم در الکترولیت، mol/m^3
c_p	ظرفیت حرارتی ویژه، $\text{J}/\text{kg}\text{K}$
c_s	غلاظت لیتیوم در الکترود، mol/m^3
C	نرخ شارژ یا تخلیه، $1/\text{h}$
D	ضریب توزیع یون لیتیوم، m^2/s
E	انرژی فعال‌سازی، J/mol
F	ثابت فارادی، As/mol
$i \cdot i^\rightarrow$	تراکم جریان، A/m^2
I	جریان الکتریکی، A
j^\rightarrow	شار توزیع، $\text{mol}/\text{m}^2\text{s}$
q	شار حرارتی، W/m^2
r	شعاع ذرات الکترود، m
r_s	شعاع متوسط ذرات، m
R	ثابت جهانی گازها، $\text{J}/\text{mol}\cdot\text{K}$
SoC	سطح شارژ، -
t	زمان، s
t^+	عدد انتقال کاتیون، -
T	دما، K
T_∞	دمای محیط، K

نمادهای یونانی

δ_1	وابستگی دمایی، m^2/Ks
δ_2	وابستگی دمایی، $\text{m}^2/\text{K}^2\text{s}$
δ_3	وابستگی دمایی، $\text{m}^2/\text{K}^3\text{s}$
ϵ	کسر حجمی، -
θ	استوکیومتری متوسط در الکترود، -
θ_0	استوکیومتری در سطح شارژ صفر، -
θ_1	استوکیومتری در سطح شارژ یک، -
κ	هدایت یونی، A/Vm
λ	هدایت حرارتی، W/m
ρ	چگالی، $\text{J}/\text{kg}\cdot\text{K}$
σ	هدایت الکتریکی، A/Vm
ϕ	پتانسیل الکتریکی، V
ϕ_{oc}	پتانسیل مدار باز، V

الکتریکی بهتر در زبانه‌های باتری، سطح شارژ در نزدیکی زبانه‌ها کمتر است و با گذشت زمان، سطح شارژ به طرف مرکز الکترود حرکت می‌کند. با افزایش زمان در هر نرخ تخلیه، یکنواختی سطح شارژ در الکترود ثابت کاهش می‌یابد. با افزایش نرخ تخلیه، یکنواختی سطح شارژ نیز کاهش می‌یابد که این امر باعث کاهش طول عمر باتری لیتیومی خواهد شد.

۵. با شروع فرآیند تخلیه، یون‌های لیتیوم از سمت الکترود منفی به طرف الکترود ثابت حرکت کرده و غلاظت یون لیتیوم در الکترود ثابت با شبیه تقریباً ثابتی افزایش می‌یابد. مشاهده می‌شود که با کاهش نرخ تخلیه، می‌توان به غلاظت‌های بالاتری از یون لیتیوم در الکترود ثابت دست پیدا کرد. به علت هدایت الکتریکی بهتر در زبانه‌ها، غلاظت یون لیتیوم در نزدیکی زبانه‌های باتری بیشتر است و با گذشت زمان به طرف مرکز الکترود حرکت می‌کند. همچنین با افزایش نرخ تخلیه، یکنواختی غلاظت یون لیتیوم در الکترود ثابت کاهش می‌یابد که امری نامناسب برای باتری‌های لیتیومی به حساب می‌آید.

۶. در ابتدا و انتهای چرخه تخلیه به علت فرآیندهای لیتیومدهی و لیتیومگیری توسط الکترودهای منفی و ثابت، میزان افزایش تولید حرارت ژول شدیدتر است. با افزایش نرخ تخلیه، به علت افزایش شدت جریان تخلیه، تولید حرارت ژول نیز بیشتر شده و تولید حرارت ژول در نرخ‌های تخلیه بالا، مقدار و تأثیر بیشتری دارد.

۷. با افزایش نرخ تخلیه، به علت افزایش شدت جریان تخلیه و واکنش‌های الکترو شیمیایی در باتری، مقدار و شبیه افزایش تولید حرارت واکنش نیز بیشتر شده و در کل، تولید حرارت واکنش در نرخ‌های بالای تخلیه تأثیر چشم‌گیرتری دارد.

واژه نامه

a_s مساحت سطح فعال در واحد حجم، m^2/m^3

زیرنویس‌ها	فاز یونی		ion
جمع کننده جریان	c		ini
جمع کننده جریان مثبت	c +		ref
جمع کننده جریان منفی	c -		se
فاز الکترولیت	e		sep
فاز جامد الکترود	s		+
فاز انتقال الکترون	ele		-

مراجع

1. Rahn, C. D., and Wang, C. Y., "Battery Systems Engineering", John Wiley & Sons Ltd, (2013).
2. Mastali Majdabadi, M., "Electrochemical-Thermal Modeling of Lithium-ion Batteries", PhD thesis, University of Waterloo, (2016).
3. Linden, D., and Reddy, T. B., "Handbook of Batteries", 2nd ed, McGraw-Hill, New York, (2002).
4. Martin, H., "Solid-state-EV-Battery Breakthrough from Li-ion Battery Inventor John Goodenough", North American Energy News, (2017).
5. Campestrini, C., and Horsche, M. F., "Validation and Benchmark Methods for Battery Management System Functionalities: State of Charge Estimation Algorithms", *Journal Energy Storage*, Vol. 7, No. 1, pp. 38–51, (2016).
6. Hannan, M. A., and Lipu, M. S. H., "A Review of Lithium-ion Battery State of Charge Estimation and Management System in Electric Vehicle Applications: Challenges and Recommendations", *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Vol. 78, No. 1, pp. 834–854, (2017).
7. Chung, S. Y., Bloking, J. T., and Chiang, Y. M., "Electronically Conductive Phospho-olivines as Lithium Storage Electrodes", *Nature Materials*, Vol. 1, No. 2, pp. 123–128, (2002).
8. Conte, F. V., "Battery and Battery Management for Hybrid Electric Vehicles", A Review, *Elektro Und Inf*, Vol. 123, No. 10, pp. 424–31, (2006).
9. Imara Corporation website, Imaracorp.com, Archived from the original on 22 July 2009, Retrieved 8 October, (2011).
10. Kroese, R. C., and Krein, P. T., "Electrical Battery Model for Use in Dynamic Electric Vehicle Simulations", *IEEE Power Electron Spec Conference*, pp. 1336–1342, (2008).
11. Chen, M., and Rinc Mora, G. A., "Accurate Electrical Battery Model Capable of Predicting Runtime and I-V Performance", *IEEE Trans Energy Convers*, Vol. 21, No. 2, pp. 504–11, (2006).
12. Xing, Y., Ma, E. W. M., Tsui, K. L., and Pecht, M., "Battery Management Systems in Electric and Hybrid Vehicles", *Energies*, Vol. 4, No. 11, pp. 1840–57, (2011).
13. Xu, L., Wang, J., and Chen, Q., "Kalman Filtering State of Charge Estimation for Battery Management

- System Based on A Stochastic Fuzzy Neural Network Battery model", *Energy Convers Manag*, Vol. 53, No. 1, pp. 33–9, (2012).
14. Li, J., Yuan, C. F., Guo, Z. H., Zhang, Z. A., Lai, Y. Q., and Liu, J., "Limiting Factors for Low Temperature Performance of Electrolytes in LiFePO₄/Li and Graphite/Li Half Cells", *Electrochim Acta*, Vol. 59, No. 1, pp. 69–74, (2012).
15. Ye, Y., Shi, Y., Cai, N., Lee, J., and He, X., "Electro-thermal modeling and experimental validation for lithium ion battery", *Journal of Power Sources*, Vol. 199, No. 1, pp. 227– 238, (2012).
16. Xing, Y., He, W., Pecht, M., and Tsui, K. L., "State of charge estimation of lithium-ion batteries using the open-circuit voltage at various ambient temperatures", *Applied Energy*, Vol. 113, No. 1, pp. 106– 115, (2014).
17. Zhang, Y., "State-of-charge Estimation of the Lithium-ion Battery System with Time-Varying Parameter for Hybrid Electric Vehicles", *Control Theory Appl IET*, Vol. 8, No. 3, pp. 160–7, (2014).
18. Cheng, M., Feng, L., and Chen, B., "Simulation of Lithium Ion HEV Battery Aging Using Electrochemical Battery Model under Different Ambient Temperature Conditions", SAE International by University of Alberta Libraries, (2015).
19. Bahraei, F., Fartaj, A., and Nazri, Gh. A., "Electrochemical-thermal Modeling to Evaluate Active Thermal Management of a Lithium-ion Battery Module", *Electrochimica Acta*, Vol. 254, No. 1, pp. 59–71, (2017).
20. Tang, Y., and Wu, L., "Study of the Thermal Properties During the Cyclic Process of Lithium ion Power Batteries Using the Electrochemical-Thermal Coupling model", *Applied Thermal Engineering*, Vol. 137, No. 1, pp. 11–22, (2018).
21. Hosseinzadeh, E., Genieser, R., Worwood, D., Barai, A., Marco, J., and Jennings, P., "A systematic approach for electrochemical-thermal modelling of a large format lithium-ion battery for electric vehicle application", *Journal of power sources*, Vol. 382, No. 1, pp. 77-94, (2018).
22. Chen, C., Xiong, R., Yang, R., and Shen, W., "State of Charge Estimation of Lithium-ion Battery Using an Improved Neural Network Model and Extended Kalman Filter", *Journal of Cleaner Production*, Vol. 234, No. 1, pp. 1153-1164, (2019).
23. Fink, C., and Kaltenegger, B., "Electrothermal and Electrochemical Modeling of Lithium-ion Batteries: 3D Simulation with Experimental Validation", *The Electrochemical Society*, Vol. 61, No. 27, (2014).
24. Doyle, M., Newman, J., Gozdz, A., Schmutz, C., and Tarascon, J. M., "Comparison of modeling predictions with experimental data from plastic lithium ion cells", *Journal of the Electrochemical Society*, Vol. 143, No. 6, (1996).
25. EIG-ePLB-C020-Datasheet, HighEnergy Product ePLB C Technology.
26. Taheri, P., and Bahrami, M., "Temperature Rise in Prismatic Polymer Lithium-Ion Batteries: An Analytic Approach", *SAE Int*, Vol. 5, No. 1, (2012).