



بررسی عددی ویژگی‌های انباره لیتیومی منشوری تحت بار در خودروی برقی

محمد امیر بیاتی نژاد^{۱*}، آرش محمدی^۲

^۱ دانش‌آموخته کارشناسی ارشد دانشکده مهندسی مکانیک دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، تهران، ایران، a.bayatinezhad@sru.ac.ir

^۲ عضو هیات علمی دانشکده مهندسی مکانیک دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، تهران، ایران، amohammadi@sru.ac.ir

* نویسنده مسئول

اطلاعات مقاله

تاریخچه مقاله:

دریافت: ۷ خرداد ۱۳۹۹

پذیرش: ۲۸ مرداد ۱۳۹۹

کلیدواژه‌ها:

انباره لیتیومی

سطح تغذیه انباره

غلظت یون لیتیوم

جمع‌کننده جریان

چکیده

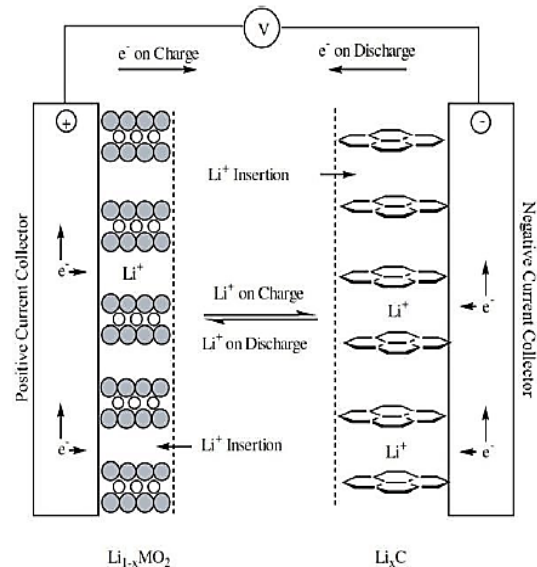
خودروهای برقی و دورگه جایگزینی مناسب برای خودروها با سوخت‌های هیدروکربنی برای کاهش آلاینده‌ها و منابع سنگواره‌ای اند. انباره‌ها به عنوان بخش تأمین نیروی محرکه این خودروها عمل می‌کنند. یکی از مهم‌ترین ویژگی‌ها برای انباره محاسبه مقدار سطح تغذیه آن است. بهترین بازه برای سطح تغذیه انباره لیتیومی بین ۲۰ تا ۹۰ درصد است و بکارگیری چرخه‌های تغذیه و تخلیه خارج از این بازه، منجر به کاهش عمر انباره خواهد شد. بنابراین باید سطح تغذیه انباره طی فرآیندهای تغذیه و تخلیه مشخص شود تا در بازه ایمن قرار گیرد. در این مقاله یک تک شبکه انباره لیتیومی در حین چرخه تخلیه جریان ثابت به روش الکتروشیمیایی-گرمانی با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی سه بعدی و در نرم افزار AVL FIRE شبیه‌سازی شده است. ابتدا نتایج شبیه‌سازی با نتایج آزمایشگاهی ولتاژ و دما اعتبارسنجی شده است. سپس نتایج توزیع ظرفیت برقی در جمع‌کننده جریان، سطح تغذیه، غلظت یون لیتیوم در الکترودها، توزیع دما در سطح انباره و گرمای تولید شده طی فرآیند تخلیه در نرخ‌های مختلف ارائه شده است. در نهایت، یک چرخه تغذیه/تخلیه با جریان متغیر شبیه‌سازی شده و نتایج ولتاژ خروجی و سطح تغذیه انباره محاسبه شده است.



تمامی حقوق برای انجمن علمی موتور ایران محفوظ است.

۱- مقدمه

به احتمال زیاد خودروهای تمام برقی در آینده جایگزین خودروهای احتراق داخلی خواهند شد. انباره به عنوان بخش تأمین انرژی قوای محرکه خودروهای برقی است. در بین انباره‌های قابل تغذیه، انباره‌های لیتیومی به دلیل چگالی انرژی بزرگ (تقریباً ۲ برابر انباره نیکل کادمیوم)، وزن و حجم سبک‌تر (حدود ۳ تا ۵ برابر دیگر انباره‌ها)، قابلیت تغذیه سریع، نرخ گند خود تخلیه بودن (کمتر از ۱۰ درصد در هر ماه) و عمر طولانی (> ۵۰۰ چرخه)، انتخاب مناسبی برای استفاده در وسایل برقی است [۱].



شکل ۱: فرآیند الکتروشیمیایی در شبکه انباره لیتیومی [۳]

به تولید گرمای و جریان برقی می‌شود. واکنش‌های انجام شده در فرآیند تغذیه و تخلیه به صورت معادلات ۱ تا ۳ است [۲].

در شکل ۱ فرآیند الکتروشیمیایی انباره لیتیومی در چرخه تغذیه/تخلیه نشان داده شده است.

چالش‌های استفاده از انباره‌های لیتیومی شامل افزایش کارایی، ایمنی و طول عمر انباره است. استفاده از انباره‌های لیتیومی به دلیل ترکیب مواد پر انرژی و حلال‌های الکترولیت ممکن است باعث بروز اشتعال و انفجار انباره شود [۴].

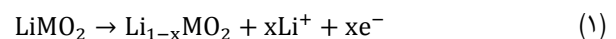
همچنین افزایش دمای بیشینه و توزیع غیر یکنواخت دما در انباره منجر به عدم تعادل برقی و در نتیجه اختلاف سطح تغذیه در شبکه‌ها می‌شود. بنابراین به یک سامانه مدیریت انباره دقیق نیاز است تا انباره به صورت مناسب ایفای نقش کند. سامانه مدیریت انباره عواملی چون دمای انباره و خطر انفجار، توزیع دما در شبکه انباره (یکنواخت سازی دما در شبکه انباره)، توزیع غلظت یون لیتیوم در الکترودها و الکترولیت (جلوگیری از کاهش ظرفیت انباره)، جریان انباره و تعیین بازه بهینه، ولتاژ انباره و تعیین بازه بهینه، تخمین سطح تغذیه انباره (جلوگیری از افزایش بیش از حد تغذیه/تخلیه) و تخمین سطح سلامت انباره را به منظور جلوگیری از تخریب‌های فیزیکی، فرار گرمایی، پیری و عدم تعادل در شبکه نظارت می‌کند [۵].

سامانه مدیریت انباره ممکن است از اجزای بسیاری مانند حسگر، پایشگر کننده‌ها و اعمال کننده‌ها که توسط بسیاری از روش‌ها، قاعده‌ها و علامت‌ها پایش می‌شود، تشکیل شده است [۶].

برای شبیه‌سازی انباره‌های لیتیومی، روش‌های شبیه‌سازی ریاضی (توصیف انباره لیتیومی با زبان ریاضی، قضیه‌ها و نمادها)، شبیه‌سازی با مدار معادل^۱ (شامل تعدادی مقاومت و خازن متصل شده به منبع ولتاژ و با خاصیت حفظ تمامی خواص برقی)، شبیه‌سازی برقی-گرمایی (بررسی رفتار گرمایی انباره با قرار دادن ترم منبع تولید گرما و محاسبه دما، جریان، ولتاژ و سطح تغذیه) و شبیه‌سازی برقی-شیمیایی (اغلب برای تجزیه و تحلیل عملکرد انباره در رابطه با بسیاری از مواد داخلی و واکنش‌های شیمیایی صورت گرفته در انباره با در نظر گرفتن اثرات الکترودینامیک و ترمودینامیک شیمیایی و در نتیجه محاسبه دما، جریان، ولتاژ، سطح تغذیه و توزیع غلظت یون لیتیوم در انباره) وجود دارد که در این مقاله، از شبیه‌سازی وابسته شده الکتروشیمیایی-گرمایی به منظور افزایش دقت و قابلیت اعتماد در نتایج استفاده خواهد شد.

در شکل ۱ فرآیند الکتروشیمیایی انباره لیتیومی در چرخه تغذیه/تخلیه نشان داده شده است.

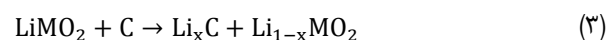
واکنش الکتروکود مثبت در فرآیند تغذیه (تخلیه بالعکس است):



واکنش الکتروکود منفی در فرآیند تغذیه (تخلیه بالعکس است):



واکنش کلی:



انباره‌های 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)، الکتروکود مثبت (کاتد)، الکتروکود منفی (آند)، جداساز و محلول الکترولیت است که فضای بین دو الکتروکود را اشغال می‌کند. عملکرد انباره‌های لیتیومی بدین گونه است که در فرآیند تخلیه (تبدیل انرژی شیمیایی به برقی)، یون‌های لیتیوم از الکتروکود منفی به الکتروکود مثبت و در فرآیند تغذیه (تبدیل انرژی برقی به شیمیایی)، بالعکس عمل می‌کنند که این عمل منجر

۲- پیشینه تحقیق

در سال ۲۰۰۲، چانگ و همکاران عملکرد انباره لیتیومی LiFePO_4 را با افزایش هدایت مواد (۸ تا ۱۰ برابر) و استفاده از آلومینیوم، نایوبیوم و زیرکونیوم بهبود بخشیدند [۷].

در سال ۲۰۰۶ کنته و همکاران بر روی دستگاه‌های مختلف ذخیره انرژی، مطالعه تطبیقی انجام دادند. آن‌ها به وضوح دریافتند که انباره لیتیومی دارای قدرت و چگالی انرژی بیشتری نسبت به سایر دستگاه‌های ذخیره سازی انرژی است. علاوه بر این، برخی ویژگی‌ها مانند بازده قوی، چرخه عمر طولانی، نرخ تخلیه کند و ولتاژ بزرگ را دارد [۸].

در سال ۲۰۰۸، شرکت های نیشان و ایمارا از فناوری لیتیوم نیکل کبالت منگنز اکسید ($\text{LiNi}_x\text{Mn}_y\text{Co}_z\text{O}_2$) استفاده کردند که منجر به چگالی انرژی بزرگی شد [۹].

در سال ۲۰۰۸، روش تونین^۱ شامل یک یا دو شبکه مدار معادل برای پیش بینی پاسخ انباره در وضعیت خاصی از تغذیه و ولتاژ مدار باز ارائه شد. این روش قادر به پیش بینی پاسخ گذرا از ولتاژ انباره با تغییر جریان است و بنابراین می‌توان آن را در شرایط مختلف دینامیکی بکار برد. مزیت این روش آسانی و سادگی اجرای آن است و عیب آن این است که واحدهای مقاومت و خازن ثابت فرض شده و قادر به پیش بینی کاهش ظرفیت نیست [۱۰].

در سال ۲۰۱۱، چن و رینس روش ترکیبی را پیشنهاد کردند که ترکیبی از شبکه‌های مدار معادل و روش تونین و روش زمان اجرا بود و در آن ولتاژ پایانه انباره توسط یک شبکه مدار معادل تحت شرایط بارگذاری دینامیکی مختلف شبیه‌سازی شد. مزیت این روش دقت عالی در شرایط بارگذاری دینامیکی است و عیب آن این است که متغیرهای روش بخوبی به روزرسانی نمی‌شود [۱۱].

در سال ۲۰۱۱ زینگ و همکاران، سامانه مدیریت انباره را به دو دیدگاه ساختار سخت افزاری و نرم افزاری طبقه بندی کردند. در بخش سخت افزار به منظور نظارت و اندازه‌گیری متغیرهای انباره مانند ولتاژ انباره، جریان و دما، سامانه‌های مختلف حسگر در سامانه مدیریت انباره گنجانده شد. بخش نرم افزار به عنوان مرکز سامانه مدیریت انباره در نظر گرفته شد، زیرا سخت افزار را پیش‌رگر کرده و سطح تغذیه و سطح سلامت را برای همه حسگر تخمین می‌زند [۱۲].

در سال ۲۰۱۲ روش صافی کالمن توسط وانگ و زو به منظور تخمین سطح تغذیه ارائه شد. مزیت این روش دقت عالی تخمین سطح تغذیه تحت تأثیر اغتشاشات خارجی مانند نوفه است. عیب این روش این است که روش صافی کالمن به صورت مستقیم قادر به تخمین سطح تغذیه یک الگوی غیرخطی نیست. همچنین نیاز به محاسبات ریاضی پیچیده‌ای دارد [۱۳].

در سال ۲۰۱۲ لی و همکاران یک آزمایش برای تعیین کاهش ظرفیت انباره‌های لیتیومی با تغییرات دما انجام دادند. نتایج نشان می‌دهد که ظرفیت انباره‌های LiPF_6 و LiBF_4 ، زمانی که دما به کمتر از ۲۰- درجه سانتیگراد برسد، به طور چشمگیری کاهش می‌یابد، در حالی که در دمای ۲۵ درجه سانتیگراد، کم‌تر از ۱۰ درصد کاهش ظرفیت وجود دارد [۱۴].

در سال ۲۰۱۲، یونگوانگ و شیا شبیه‌سازی عددی برقی-گرمائی را برای انباره لیتیومی LiMn_2O_4 توسط نرم افزار Ansys Workbench انجام دادند. در این شبیه‌سازی، توزیع یون لیتیوم در شبکه انباره تعیین شد و دریافتند که با کاهش دما، تغییرات غلظت یون لیتیوم افزایش یافته که منجر به از دست رفتن ظرفیت انباره می‌شود. نشان داده شد که گرمای آنتروپی در فرایند تخلیه با نرخ کند، غالب و گرمای واکنش در الکترودها در فرایند تخلیه با نرخ بالا، غالب است. برای اعتبارسنجی با نتایج تجربی به روش آزمون پالس، انباره با جریان ثابت در دمای اتاق (۲۵ درجه سانتیگراد) تخلیه شد تا رفتار انباره مشخص گردد. مقایسه این نتایج خطای کمتر از ۲ درصد را نتیجه داد [۱۵].

در سال ۲۰۱۴ زینگ و همکاران انباره LiFePO_4 را به منظور بررسی سطح تغذیه و ولتاژ تحت آزمایش قرار دادند. آن‌ها نمودار ولتاژ در حین تخلیه را 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 تغذیه انباره نیز کاهش می‌یابد [۱۶].

در سال ۲۰۱۴، روش صافی H_∞ توسط زانگ برای تخمین سطح تغذیه استفاده شد. صافی H_∞ متغیرهای انباره را متغیر با زمان در نظر می‌گیرد و نیازی به دانستن ویژگی‌های نوفه فرآیند و ویژگی‌های نوفه اندازه گیری نیست. این روش به سادگی طراحی شده که دارای قدرت شدید برای عمل در شرایط خاص است. مزیت این روش عملکرد بهینه از نظر دقت، هزینه محاسبات و بازده زمانی است. عیب این روش این است که تأثیر دما، پیری و هیستریزس می‌تواند دقت روش را کاهش دهد [۱۷].

در سال ۲۰۱۴، فینک و کالتنگر شبیه‌سازی سه بعدی الکتروشیمیایی-گرمائی را بر انباره لیتیوم پلیمر ePLB C020 انجام دادند و با نتایج تجربی مقایسه کردند. انباره مورد نظر شامل ۳۴ عدد شبکه با ظرفیت ۲۰ آمپر ساعت است که به صورت موازی به یکدیگر متصل شده‌اند. آن‌ها ویژگی‌های خروجی انباره از جمله ولتاژ، توزیع دما و توزیع سطح تغذیه را محاسبه نمودند [۱۸].

در پژوهش حاضر نیز از این نوع انباره برای انجام شبیه‌سازی‌ها استفاده شده است. تفاوت پژوهش حاضر با پژوهش مرجع [۱۸] در تعداد شبکه مورد استفاده از انباره مورد نظر است.

¹ Thevenin

۲۰ آمپرساعت و از جنس $LiFePO_4/MCMB$ برای یک شبهه‌سازی عددی استفاده شد. تغییرات گرمای اهمی، گرمای واکنش الکتروشیمیایی و گرمای قطبش در تخلیه با جریان و ولتاژ تغذیه ثابت و همچنین ارتباط آن با مقدار کاهش ظرفیت انباره در طی فرآیند، بررسی شد.

در هنگام تغذیه/تخلیه با نرخ معمولی، گرمای قطبش فعال و گرمای واکنش الکتروشیمیایی، برای کاتد و آند، منبع اصلی تولید گرمای به حساب می‌آید. از بین رفتن ظرفیت در طول فرآیند تغذیه/تخلیه، هر دو بر مدت زمان تغذیه و تخلیه تأثیر می‌گذارد. همچنین بر سطح تغذیه نیز تأثیر گذاشته که موجب تغییر در رفتار گرمایی انباره می‌شود. علاوه بر این مشاهده شد که به دلیل از بین رفتن لیتیوم فعال در طول فرآیند، انباره با چرخه بیشتر، گرمای کلی کمتری را در فرآیند تغذیه/تخلیه تولید می‌کند [۲۱].

در سال ۲۰۱۸ حسین زاده و جنیزر یک روش الکتروشیمیایی-گرمایی یک بعدی برای توصیف رفتار انباره لیتیومی ۵۳ آمپرساعت با معادله شیمیایی $LiNi_xMn_yCo_{1-x-y}O_2$ در بازه گسترده‌ای از شرایط عملیاتی توسعه دادند، از جمله: تغذیه پیوسته (۵C تا ۲C)، تخلیه پیوسته (۵C تا ۰.۵C) و عملکرد انباره در یک وسیله نقلیه برقی در یک چرخه رانندگی شهری. الگوی یک بعدی یک جفت الکتروود با یک الگوی گرمایی سه بعدی یک شبکه ترکیب شده است تا توزیع دما در مقیاس شبکه‌ای به دست آید.

عملکرد الگو برای یک دامنه دمای محیط ۵ تا ۴۵ درجه سانتیگراد تصدیق داده شد. نتایج نشان می‌دهد که عملکرد انباره به درجه گرمای محیط بسیار وابسته است. با کاهش دمای محیط از ۴۵ درجه سانتیگراد به ۵ درجه سانتیگراد، انرژی در دسترس به ۱۷٫۱ درصد و ۷٫۸ درصد در تخلیه ۰٫۵C و ۵C بترتیب کاهش می‌یابد [۲۲].

در سال ۲۰۱۹ چن و زیونگ ابتدا یک الگوی انباره بهبود یافته با شبکه عصبی پیشرو با معرفی ورودی‌های جدید تعریف شده ساختند. بر اساس الگوی شبکه عصبی پیشرو و اصول صافی کالمن گسترده، یک روش تخمین سطح تغذیه مبتنی بر شبکه عصبی پیشرو طراحی شد و استحکام آن با استفاده از داده‌های تجربی بدست 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 تغذیه در محیط کاربرد پیچیده وسایل نقلیه برقی است [۲۳].

در این مقاله یک تک شبکه انباره لیتیومی منشوری در طول چرخه تخلیه با نرخ‌های مختلف به روش الکتروشیمیایی-گرمایی با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی سه بعدی و در نرم افزار AVL FIRE شبهه‌سازی شده است.

استفاده از یک تک شبکه سبب کاهش مدت زمان محاسبات و همچنین سادگی در تغییر ویژگی‌های انباره می‌شود که در نهایت می‌تواند به یک استک انباره لیتیومی تعمیم داده شود. نوآوری این

در مطالعه حاضر، از یک تک شبکه میانی این انباره برای تسریع در روند شبهه‌سازی‌ها با در نظر گرفتن تأثیر گرمایی سایر شبکه‌های مجاور بر شبکه مورد نظر و همچنین سهولت در تغییر ویژگی‌های ورودی انباره لیتیومی استفاده شده است که در نهایت می‌توان آن را به یک استک از این انباره تعمیم داد. این عمل باعث می‌شود که تغییر در هندسه و ابعاد انباره به آسانی صورت گرفته و بهینه‌سازی هندسه انباره در پژوهش‌های آتی به سادگی انجام پذیرد. در صورتی که در مرجع [۱۸] از یک قسمت از این انباره استفاده شده که روند شبهه‌سازی را بسیار طولانی کرده و سبب افزایش هزینه محاسبات می‌شود.

در پژوهش حاضر مواردی چون تغییرات غلظت یون لیتیوم در الکترودهای مثبت و منفی در تمام لحاظ تخلیه، تغییرات نرخ گرمای تولید شده در انباره و همچنین توزیع ظرفیت برقی در جمع‌کننده جریان در هر لحظه و در نرخ‌های مختلف تخلیه محاسبه و ارائه شده که در مطالعات پیشین اعمال نشده است. در سال ۲۰۱۵، و چنگ و فنگ با استفاده از انباره لیتیومی کبالت اکسید و با نرم افزار AutoLion، شبهه‌سازی انباره لیتیومی را توسط روش فیزیکی-گرمایی در دماهای مختلف محیط انجام دادند و تأثیر دما بر مقاومت درونی انباره، دامنه پاسخ ولتاژ و ظرفیت انباره (عمر انباره) را بررسی کردند.

کاهش دمای انباره منجر به افزایش بازه ولتاژ خروجی انباره می‌شود. نشان داده شد که کاهش دمای انباره باعث افزایش مقاومت درونی انباره شده که این عامل باعث کاهش ظرفیت انباره می‌شود و ظرفیت انباره در دماهای سردتر نسبت به دماهای گرمتر سریع‌تر تخریب می‌شود [۱۹].

در سال ۲۰۱۷، فرید بهیرایی، امیر فرتاج و عباس نظری، شبهه‌سازی برقی-گرمایی را برای شبکه انباره لیتیومی با استفاده از انباره ۵ آمپر-ساعت در نرم افزار COMSOL Multiphysics انجام دادند. در این طرح از یک سیال خنک‌کننده (آب) برای کاهش دمای انباره استفاده شده است. مشخص شد که افزایش عدد رینولدز، دمای بیشینه انباره را کاهش داده ولی باعث توزیع غیر یکنواخت دما به دلیل هدایت نامناسب گرمای می‌شود.

همچنین مشخص شد که با افزایش ضخامت صفحات خنک‌کننده، سطح تماس افزایش یافته، انتقال گرمای بیشتر شده، دمای بیشینه کاهش و توزیع دما یکنواخت‌تر می‌شود. به منظور اعتبارسنجی نتایج، دمای شبکه انباره به روش تجربی و با استفاده از یک دوربین فروسرخ اندازه‌گیری شده است. مشخص شد که سامانه خنک‌کننده دو مسیری، دمای بیشینه سردتر و توزیع دمای یکنواخت‌تری نسبت به سامانه خنک‌کننده تک مسیری است [۲۰].

در سال ۲۰۱۸ تانگ و وو به بررسی خواص گرمایی انباره‌های لیتیومی در طول فرآیند پرداختند. در این طرح، از یک انباره لیتیومی با ظرفیت

و

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

که تراکم جریان برقی در الکتروود و تراکم جریان برقی یونی در الکتروولیت به صورت معادلات ۱۰ و ۱۱ است.

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

و

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

رسانش یونی به غلظت نمک لیتیوم و دما بستگی دارد و طبق معادله ۱۲ محاسبه می‌شود.

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

تراکم جریان واکنش در معادلات بقای تغذیه به وسیله معادله باتلر-والمر (Butler-Volmer) و طبق رابطه ۱۳ محاسبه می‌شود.

$$i_r = i_0 \left[\exp \left(\frac{k_a F}{RT} \eta_{act} \right) - \exp \left(-\frac{k_c F}{RT} \eta_{act} \right) \right] \quad (13)$$

که ظرفیت بیش از حد فعال ساز برابر با معادله ۱۴ است.

$$\eta_{act} = \phi_{ele} - \phi_{ion} - \phi_{oc} \quad (14)$$

و تراکم جریان مبادله برابر است با معادله ۱۵ است.

$$i_0 = i_{0,ini} \left(\frac{c_e}{c_{e,ini}} \right)^{k_a} \left(\frac{c_{s,max} - c_{se}}{c_{s,max} - c_{s,ini}} \right)^{k_a} \left(\frac{c_{se}}{c_{s,ini}} \right)^{k_c} \exp \left[\frac{E_{act,i_0}}{R} \left(\frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (15)$$

ظرفیت مدار باز ϕ_{oc} به شدت به استوکیومتری سطح θ_{se} بستگی دارد یعنی:

$$\phi_{oc} = f(\theta_{se}) \quad (16)$$

و

$$\theta_{se} = c_{se}/c_{s,max} \quad (17)$$

با فرض این که ذرات الکتروود با شعاع متوسط r_s به شکل کروی هستند، مساحت سطح ذره بر واحد حجم a_s به صورت معادله ۱۸ تعریف می‌شود.

$$a_s = \frac{3\varepsilon_s}{r_s} = \frac{3(1-\varepsilon_e - \varepsilon_f)}{r_s} \quad (18)$$

غلظت یون لیتیوم در ذرات جامد c_s و غلظت نمک لیتیوم در الکتروولیت

c_e از معادلات انتقال ۱۹ و ۲۰ محاسبه می‌شوند.

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial r} \left(D_s \frac{\partial c_s}{\partial r} \right) - \frac{2}{r} D_s \frac{\partial c_s}{\partial r} = 0 \quad (19)$$

$$\frac{\partial (\varepsilon_e c_e)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}_e = \frac{(1-t^+) i_r a_s}{F} \quad (20)$$

که شار پخش نمک لیتیوم به صورت معادله ۲۱ است.

$$\vec{j}_e = -D_e \varepsilon_e^q \nabla c_e \quad (21)$$

مقاله استفاده از روش الکتروشیمیایی-گرمائی است که با در نظر گرفتن واکنش‌های الکتروشیمیایی بین الکتروودها و الکتروولیت و همچنین با حل همزمان معادلات الکتریکی، شیمیایی و گرمائی باعث می‌شود که شبیه‌سازی‌ها با دقت بسیار عالی نسبت به بیشتر مطالعات پیشین انجام شود.

در پژوهش‌های پیشین به علت اینکه روش الکتروشیمیایی-گرمائی نیازمند تعداد زیادی ویژگی ورودی است و همچنین مدت زمان محاسباتی بسیار طولانی دارد، کمتر از این روش استفاده شده است. نوآوری دیگر این مقاله در محاسبه ویژگی‌های انباره لیتیومی از جمله سطح تغذیه انباره است که همگی با حل معادلات، به صورت مستقیم و در هر لحظه قابل محاسبه است. در صورتیکه در مطالعات سایر افراد، اغلب از روش‌های تخمین سطح تغذیه مانند روش صافی کالمن استفاده شده که هزینه و خطای محاسباتی نسبتاً زیادی دارد. ابتدا نتایج شبیه‌سازی با نتایج آزمایشگاهی ولتاژ و دما اعتبارسنجی شده است. سپس نتایج توزیع ظرفیت برقی در جمع‌کننده جریان، سطح تغذیه انباره، غلظت یون لیتیوم در الکتروود مثبت و منفی، توزیع دما در سطح انباره و گرمای تولید شده طی فرآیند تخلیه در نرخ‌های مختلف ارائه شده است. در انتها، یک چرخه تغذیه/تخلیه با جریان متغیر با زمان شبیه‌سازی شده و نتایج ولتاژ خروجی و سطح تغذیه انباره محاسبه گردیده است.

۳- معادلات حاکم

معادلات شبیه‌سازی الکتروشیمیایی-حرارتی شامل حل همزمان معادلات الکتریکی-شیمیایی و حرارتی است [۱۸]. ابتدا معادلات بقا و انتقال در جمع‌کننده‌های جریان و ناحیه واکنش حل می‌شود. ناحیه واکنش شامل الکتروودهای مثبت و منفی و جداساز است. ظرفیت الکتریکی ϕ_{ele} از معادله بقای تغذیه برقی یعنی معادله ۴ به دست می‌آید.

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

که تراکم جریان برقی 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.

$$\frac{\partial (\rho_c c_p c T)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{q} = -\vec{i}_{ele} \cdot \nabla \phi_{ele} \quad (6)$$

که شار حرارتی رسانش برابر با معادله ۷ است.

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

در مدل الکتروشیمیایی-حرارتی، واکنش الکتروشیمیایی در حجم الکتروود و در سطح بین الکتروولیت و ذرات الکتروود محاسبه می‌شود. ظرفیت الکتریکی در الکتروودها و ظرفیت یونی در الکتروولیت طبق معادلات ۸ و ۹ از معادلات بقای تغذیه مربوطه محاسبه می‌شوند.

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

و شرایط وابسته کننده به کار رفته در سطح مشترک الکتروود/جداساز طبق معادلات ۳۴، ۳۵ و ۳۶ است.

$$\phi_{ion.\pm}^f = \phi_{ion.sep}^f \quad (34)$$

$$i_{ion.\pm}^f \cdot \vec{n}^f = i_{ion.sep}^f \cdot \vec{n}^f \quad (35)$$

$$i_{ele.\pm}^f \cdot \vec{n}^f = 0 \quad (36)$$

در معادلات ۳۱ تا ۳۶، از مقاومت‌های تماسی چشم‌پوشی شده است. برای شرایط وابسته کننده گرمائی، فرض می‌شود که دما و شار گرمائی رسانش در سطوح مشترک پیوسته بود که در سطح مشترک جمع کننده جریان/الکتروود به صورت معادلات ۳۷ و ۳۸ است.

$$T_c^f = T_{\pm}^f \quad (37)$$

$$\vec{q}_c^f \cdot \vec{n}^f = \vec{q}_{\pm}^f \cdot \vec{n}^f \quad (38)$$

و در سطح مشترک الکتروود/جداساز به صورت معادلات ۳۹ و ۴۰ است.

$$T_{\pm}^f = T_{sep}^f \quad (39)$$

$$\vec{q}_{\pm}^f \cdot \vec{n}^f = \vec{q}_{sep}^f \cdot \vec{n}^f \quad (40)$$

در سطح مشترک حالتی بین ذرات الکتروود و الکتروولیت، شرایط وابسته کننده معادله ۱۹ برای محاسبه c_s استفاده شده است که طبق معادله ۴۱ است.

$$-\left(D_s \frac{\partial c_s}{\partial r}\right)_{r=r_s} = \frac{i_r}{F} \quad (41)$$

در نهایت، شرایط وابسته کننده سطح مشترک برای غلظت نمک لیتیوم تعیین می‌شوند. در سطح مشترک جمع کننده جریان/الکتروود به صورت معادله ۴۲ است.

$$j_{e.\pm}^f \cdot \vec{n}^f = 0 \quad (42)$$

و در سطح مشترک الکتروود/جداساز طبق معادلات ۴۳ و ۴۴ است.

$$c_{e.\pm}^f = c_{e.sep}^f \quad (43)$$

$$j_{e.\pm}^f \cdot \vec{n}^f = j_{e.sep}^f \cdot \vec{n}^f \quad (44)$$

شرایط مرزی در مرزهای بیرونی دامنه شبیه‌سازی تعریف می‌شوند. در خروجی برقی پایانه مثبت، تراکم جریان مرزی از جریان کل انباره طبق معادله ۴۵ به دست می‌آید.

$$i_{ele.c+}^b \cdot \vec{n}^b = -\frac{I^b}{A^b} \quad (45)$$

ضرایب توزیع لیتیوم به دما بستگی دارند که طبق معادلات ۲۲ و ۲۳ به دست می‌آید.

$$D_s = D_{s.ref} \exp \left[\frac{E_{act}.D_s}{R} \left(\frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (22)$$

$$D_e = D_{e.ref} + \delta_1(T - T_{ref}) + \delta_2(T - T_{ref})^2 + \delta_3(T - T_{ref})^3 \quad (23)$$

سطح تغذیه انباره به صورت معادله ۲۴ تعریف می‌شود.

$$SOC = \frac{\theta - \theta_0}{\theta_1 - \theta_0} \quad (24)$$

درست متوسط طبق معادله ۲۵ محاسبه می‌شود.

$$\theta = \frac{\bar{c}_s}{c_{s,max}} \quad (25)$$

که غلظت یون لیتیوم متوسط در ذره \bar{c}_s طبق معادله ۲۶ به دست می‌آید.

$$\bar{c}_s = \frac{1}{r_s} \int_0^{r_s} c_s(r, t) dr \quad (26)$$

بیشترین ظرفیت انباره برای هر الکتروود از متغیرهای هندسی و الکتروشیمیایی طبق معادلات ۲۷ و ۲۸ محاسبه می‌شوند.

$$Q_{max,+} = \varepsilon_{s,+} V_+ c_{s,max,+} (\theta_{0,+} - \theta_{1,+}) F \quad (27)$$

$$Q_{max,-} = \varepsilon_{s,-} V_- c_{s,max,-} (\theta_{1,-} - \theta_{0,-}) F \quad (28)$$

فرض می‌شود که ذرات الکتروود و الکتروولیت در تعادل گرمائی هستند. یعنی آن‌ها میدان دمایی مشابهی را تولید می‌کنند (رویکرد انرژی همگن). معادله انرژی مربوطه به صورت معادله ۲۹ است.

$$\frac{\partial (\rho c_p T)}{\partial T} + \nabla \cdot \vec{q} = \quad (29)$$

$$-i_{ele}^f \cdot \nabla \phi_{ele} - i_{ion}^f \cdot \nabla \phi_{ion} + i_r a_s \eta_{act}$$

که شار گرمائی رسانش متوسط به صورت معادله ۳۰ است.

$$\vec{q} = -\lambda \nabla T \quad (30)$$

در شبیه‌سازی الکتروشیمیایی-گرمائی، دو نوع سطح مشترک متفاوت وجود دارد که عبارت است از سطح جمع کننده جریان/الکتروود و سطح الکتروود/جداساز. همچنین، یک سطح مشترک حالتی بین ذرات الکتروود جامد و الکتروولیت وجود دارد. برای ظرفیت‌های برقی و یونی، شرایط وابسته کننده به کار رفته در سطح مشترک جمع کننده جریان/الکتروود طبق معادلات ۳۱، ۳۲ و ۳۳ است.

$$\phi_{ele.c}^f = \phi_{ele.\pm}^f \quad (31)$$

$$i_{ele.c}^f \cdot \vec{n}^f = i_{ele.\pm}^f \cdot \vec{n}^f \quad (32)$$

$$i_{ion.\pm}^f \cdot \vec{n}^f = 0 \quad (33)$$

جدول ۱: ویژگی‌های انباره ePLB C020 [۲۵]

ویژگی	مقدار مشخصه (واحد)
ضخامت	۷ (میلیمتر)
عرض	۱۲۵ (میلیمتر)
ارتفاع	۱۹۵ (میلیمتر)
وزن	۴۰۷ (گرم)
ولتاژ اسمی	۳,۶۵ (ولت)
ظرفیت اسمی	۲۰ (آمپر ساعت)
انرژی مخصوص	۱۷۵ (وات ساعت/کیلوگرم)
چگالی انرژی	۳۷۰ (وات ساعت/لیتر)
حد ولتاژ توصیه شده برای تخلیه	۳ (ولت)
حد ولتاژ کم برای تخلیه	۲,۵ (ولت)

جدول ۲: ضخامت و تعداد لایه‌های اجزای انباره [۲۵]

جنس ماده	ضخامت (میکرومتر)	تعداد لایه‌ها
ورق آلومینیوم	۲۱	۱۷
ورق مس	۱۲	۱۸
الکتروود مثبت	۷۰	۳۴
الکتروود منفی	۷۹	۳۶

جدول ۳: خواص گرمایی اجزای انباره [۲۵]

جنس ماده	چگالی (کیلوگرم/متر مکعب)	ظرفیت گرمایی (ژول/کیلوگرم کلوین)	هدایت گرمایی (وات/متر کلوین)
ورق آلومینیوم	۲۷۰۲	۹۰۳	۲۳۸
ورق مس	۸۹۳۳	۳۸۵	۳۹۸
جداساز	۱۰۱۷ (مرطوب)	۱۹۷۸ (مرطوب)	۰,۳۴ (مرطوب)
الکتروود مثبت	۲۸۹۵ (مرطوب)	۱۲۷۰ (مرطوب)	۱,۵۸ (مرطوب)
الکتروود منفی	۱۵۵۵ (مرطوب)	۱۴۳۷ (مرطوب)	۱,۰۴ (مرطوب)

خواص برقی و شیمیایی انباره ePLB C020 به صورت جدول ۴ است.

A^b کل مساحت خروجی برقی است. جریان انباره I^b برای تخلیه به صورت مثبت و برای تغذیه به صورت منفی تعریف می‌شود. در خروجی برقی پایانه منفی، ظرفیت برقی ثابت و طبق معادله ۴۶ است.

$$\phi_{ele}^b = 0 \quad (46)$$

بر روی تمام مرزهای خارجی دیگر، تراکم جریان برقی صفر فرض شده و مطابق با معادله ۴۷ است.

$$\vec{i}_{ele}^b \cdot \vec{n}^b = 0 \quad (47)$$

دو نوع شرایط مرزی گرمایی به کار گرفته شده است. برای پایانه‌های انباره از شرایط مرزی عایق استفاده شده و به صورت معادله ۴۸ است.

$$\vec{q}^b \cdot \vec{n}^b = 0 \quad (48)$$

در مرزهای دیگر، شرایط مرزی جابجایی طبق معادله ۴۹ به کار گرفته می‌شود.

$$\vec{q}^b \cdot \vec{n}^b = \beta (T_\infty - T^b) \quad (49)$$

در الگوی الکتروشیمیایی-گرمایی، از شرایط مرزی اضافی برای ظرفیت یونی و غلظت نمک لیتیوم در الکتروود استفاده می‌شود. در اینجا، طبق معادلات ۵۰ و ۵۱ شرایط شار صفر به کار گرفته شده است.

$$\vec{i}_{ion}^b \cdot \vec{n}^b = 0 \quad (50)$$

$$\vec{j}_e^b \cdot \vec{n}^b = 0 \quad (51)$$

۴- ویژگی‌های انباره

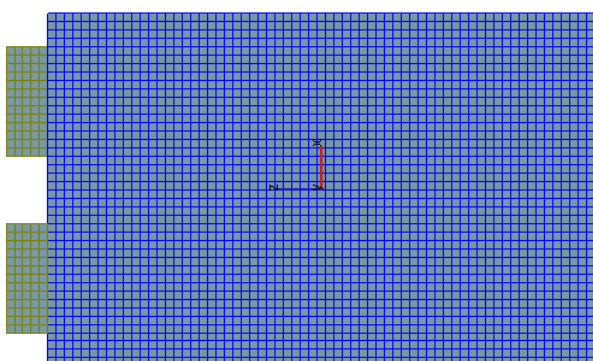
در این مقاله برای شبیه‌سازی انباره لیتیومی از انباره لیتیوم پلیمر نوع ePLB C020 ساخت شرکت EiG کره جنوبی استفاده می‌کنیم [۲۴]. این شبیه‌سازی توسط نرم افزار AVL FIRE انجام شده است. هر استک این انباره دارای ۳۴ شبکه است که به صورت موازی به یکدیگر متصل شده‌اند. جنس الکتروود مثبت از $Li[NiCoMn]O_2$ ، جنس الکتروود منفی از گرافیت، جنس جمع‌کننده جریان مثبت از آلومینیوم و جنس جمع‌کننده جریان منفی از مس است. نوع الکتروود بکار رفته در انباره نیز $LiPF_6$ و ترکیبی از اتیلن کربنات و دی متیل کربنات است. ویژگی‌های انباره در جدول ۱ و ضخامت و تعداد لایه-های اجزای انباره در جدول ۲ آورده شده است. خواص گرمایی اجزای انباره در جدول ۳ دیده می‌شود.

جدول ۶: خواص برقی جمع کننده‌های جریان انباره

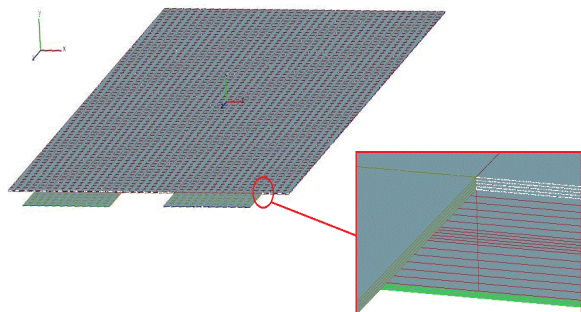
ePLB C020 [۲۵،۱۸]		
خاصیت (واحد)	جمع کننده جریان مثبت (آلومینیوم)	جمع کننده جریان منفی (مس)
هدایت برقی (A/V.m)	۳۸۳۰۰۰۰۰	۶۳۳۰۰۰۰۰

در این مقاله، شبیه‌سازی سه بعدی یک تک شبکه انباره لیتیومی به صورت الکتروشیمیایی-گرمائی صورت گرفته است. بنابراین با توجه به ظرفیت ۳۴ شبکه، ظرفیت یک تک شبکه برابر با ۰،۶۱۷۶ آمپر ساعت است. شبکه‌ها به صورت موازی متصل شده‌اند پس تک شبکه باید ولتاژی برابر با ولتاژ ۳۴ شبکه داشته و جریان آن بر ۳۴ تقسیم شود. دمای محیط ۲۵ درجه سانتیگراد در نظر گرفته شده است.

سطح تغذیه اولیه انباره را برابر یک (صد در صد) قرار داده و چرخه تخلیه جریان ثابت برای نرخ‌های ۱C، ۳C و ۵C انجام می‌شود. شبکه محاسباتی تک شبکه ایجاد شده در نرم افزار AVL FIRE مطابق شکل‌های ۲ و ۳ است. نحوه قرارگیری بخش‌های مختلف شبکه انباره در شکل ۴ و جدول ۷ نشان داده شده است.



شکل ۲: شبکه‌بندی هندسه تک شبکه انباره لیتیومی



شکل ۳: شبکه‌بندی هندسه تک شبکه انباره لیتیومی

جدول ۴: خواص برقی و شیمیایی انباره ePLB C020 [۲۵،۱۸]

خاصیت (واحد)	الکتروود مثبت (Li[NiCoMn]O ₂)	الکتروود منفی (گرافیت)
هدایت برقی (A/V.m)	۲	۶۸،۶
شعاع متوسط ذرات (m)	$5,8 \times 10^{-6}$	25×10^{-5}
بیشترین غلظت یون لیتیوم (kmol/m ³)	۵۱،۵۵۴	۳۰،۵۵۵
ضریب توزیع یون لیتیوم (m ² /s)	معادله (۲۲)	معادله (۲۲)
مقاومت فیلم ذره (V.m ² /A)	.	.
درست در سطح تغذیه صفر (-)	۱	۰،۱
درست در سطح تغذیه یک (-)	۰،۱۷	۰،۹۷
سطح تغذیه اولیه (-)	۱	۱
ضریب انتقال کاتدیک (-)	۰،۵	۰،۵
ضریب انتقال آنودیک (-)	۰،۵	۰،۵
تراکم جریان مبادله (A/m ²)	معادله (۱۵)	معادله (۱۵)

خواص برقی و شیمیایی الکتروولیت LiPF₆ انباره ePLB C020 مطابق جدول ۵ است.

جدول ۵: خواص برقی و شیمیایی الکتروولیت انباره

ePLB C020 [۲۵،۱۸]

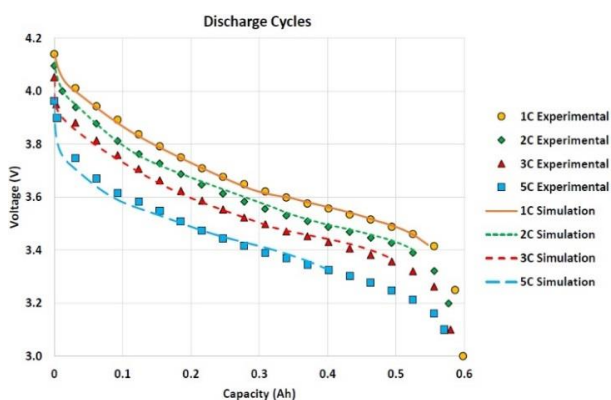
خاصیت (واحد)	در الکتروود مثبت در جداساز در الکتروود منفی		
هدایت برقی (A/V.m)	معادله (۱۲)	معادله (۱۲)	معادله (۱۲)
ضریب توزیع یون لیتیوم (m ² /s)	معادله (۲۲)	معادله (۲۲)	معادله (۲۲)
تخلخل (-)	۰،۶۳	۱	۰،۵۰۳
شاخص (-) Bruggeman	۳،۳	۳،۳	۳،۳
عدد انتقال کاتیون (-)	۰،۳۶۳	۰،۳۶۳	۰،۳۶۳
غلظت اولیه یون لیتیوم (kmol/m ³)	۲	۲	۲

خواص برقی جمع کننده‌های جریان مثبت و منفی انباره ePLB C020 به صورت جدول ۶ است.

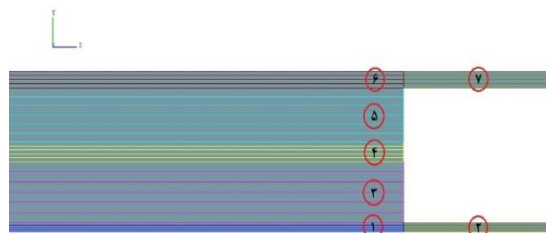
گرمائی سایر شبکه‌های مجاور، مقدار ضریب انتقال گرمای جابجایی خارجی باید به نحوی تغییر کند که تأثیر گرمائی شبکه‌های مجاور دیده شده و نمودار دمای متوسط سطح انباره با نتایج آزمایشگاهی تطبیق داشته باشد. بنابراین نیاز به یافتن یک مقدار ضریب انتقال گرمای جابجایی خارجی بهینه از طریق روش آزمون و خطا وجود دارد. پس از بررسی‌های انجام شده و با توجه به این مورد که در آزمایشات تجربی انجام شده از سیال خنک‌کننده برای خنک‌سازی انباره لیتیومی استفاده نشده است، با روش آزمون و خطا مقدار ضریب انتقال گرمای جابجایی خارجی انباره در شبیه‌سازی‌ها برابر با $10.3 \text{ W/m}^2\text{K}$ در نظر گرفته شده که در این حالت با توجه به دقت بسیار خوب نتایج از طریق روش الکتروشیمیایی-گرمائی، کم‌ترین مقدار خطا در مقایسه با نتایج تجربی وجود دارد و می‌توان به تطبیق بسیار مطلوبی با نتایج آزمایشگاهی دست یافت.

نمودار ولتاژ بر حسب ظرفیت انباره در نرخ‌های تخلیه جریان ثابت 1C ، 2C ، 3C و 5C مطابق شکل ۵ است. نتایج شبیه‌سازی تطبیق خوبی را با نتایج آزمایشگاهی نشان می‌دهد. بیشینه مقادیر خطا در نرخ‌های 1C ، 2C ، 3C و 5C به ترتیب برابر با 1.22 ، 1.37 ، 1.49 و 1.65 درصد است. بیشترین مقدار خطا در نرخ تخلیه 5C رخ داده که علت آن شدید بودن نرخ تخلیه (تخلیه بیش از حد) و سرعت بیشتر واکنش‌های الکتروشیمیایی است. شبیه‌سازی‌ها طبق شکل نشان می‌دهد که منحنی ولتاژ در نرخ‌های تخلیه 1C ، 2C ، 3C و 5C به ترتیب از مقادیر 4.14 ، 4.11 ، 4.04 و 3.95 ولت شروع و به ترتیب تا مقادیر 3.4 ، 3.39 ، 3.37 و 3.33 ولت کاهش می‌یابد.

بنابراین با کاهش نرخ تخلیه، ولتاژ انباره از مقادیر بزرگتری شروع به کاهش کرده و مقدار تغییرات ولتاژ تا انتهای تخلیه افزایش یافته است. همچنین با افزایش نرخ تخلیه، می‌توان به ولتاژهای ضعیف‌تری در شروع و پایان فرآیند دست پیدا کرد. بنابراین با افزایش نرخ تخلیه ولتاژ انباره سریع‌تر به ولتاژ قطع نزدیک شده و شبیه‌سازی در ظرفیت‌های ضعیف‌تری متوقف خواهد شد.



شکل ۵: تغییرات ولتاژ بر حسب ظرفیت انباره در نرخ‌های مختلف تخلیه در حالت شبیه‌سازی (خطوط) و آزمایش تجربی (نقاط) [۲۴]



شکل ۴: نحوه قرارگیری اجزای شبکه انباره لیتیومی

جدول ۷: اجزای شبکه انباره لیتیومی

نام بخش
جمع‌کننده جریان منفی
زبانه منفی خروجی
الکتروود منفی (آند)
جداساز (الکتروولیت)
الکتروود مثبت (کاتد)
جمع‌کننده جریان مثبت
زبانه مثبت خروجی

۵- تعیین حالت مواد

در انباره لیتیومی باید دو حالت جامد و مایع ایجاد شود. حالت جامد برای جمع‌کننده‌ها، زبانه‌ها و الکتروودها و حالت مایع برای الکتروولیت انتخاب شده است.

۶- چرخه شبیه‌سازی

در این بخش، برای تأیید و تصدیق نتایج شبیه‌سازی، چرخه‌های تخلیه جریان ثابت^۱ تحت نرخ‌های تخلیه 1C ، 2C و 3C انجام می‌شود. جریان‌های تخلیه برای یک تک شبکه انباره ePLB C020 به صورت جدول ۸ است.

جدول ۸: نرخ و جریان تخلیه تک شبکه انباره لیتیومی

نرخ تخلیه	جریان تخلیه (آمپر)
1C	0.6176
2C	1.2352
3C	1.8528
5C	3.088

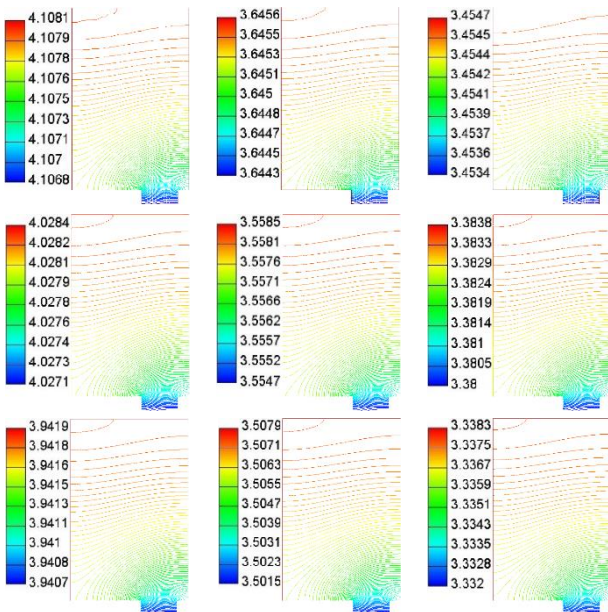
۷- اعتبارسنجی نتایج شبیه‌سازی

برای اعتبارسنجی نتایج شبیه‌سازی الکتروشیمیایی-گرمائی، نمودار ولتاژ بر حسب ظرفیت انباره در حالت شبیه‌سازی و آزمایشگاهی با هم مقایسه می‌شوند. از آنجایی که در شبیه‌سازی‌ها فقط یک تک شبکه انباره لیتیومی در نظر گرفته شده و به دلیل نیاز به در نظر گرفتن تأثیر

¹ Constant Current

۹۵۵ ام) تخلیه و سطر سوم برای نرخ تخلیه ۵C از چپ به راست در ابتدا (ثانیه ۱۰ ام)، وسط (ثانیه ۲۲۸ ام) و انتها (ثانیه ۴۶۹ ام) تخلیه است.

در هر لحظه از فرآیند تخلیه و در تمامی نرخ‌های تخلیه، توزیع ظرفیت برقی در جمع‌کننده جریان مثبت تقریباً یکنواخت است. با گذر زمان و در انتهای فرآیند تخلیه بتدریج یکنواختی ظرفیت برقی در سطح جمع‌کننده جریان مثبت کاهش می‌یابد. همچنین با افزایش نرخ تخلیه، به علت افزایش شدت جریان و واکنش‌های الکتروشیمیایی در انباره، یکنواختی ظرفیت برقی در جمع‌کننده جریان مثبت کاهش یافته است که این امر منجر به کاهش عمر انباره لیتیومی خواهد شد.



شکل ۷: توزیع ظرفیت برقی (ولت) در سطح جمع‌کننده جریان مثبت در ابتدا، وسط و انتهای فرآیند تخلیه (چپ به راست)، سطر اول در نرخ ۱C، سطر دوم در نرخ ۳C و سطر سوم در نرخ ۵C

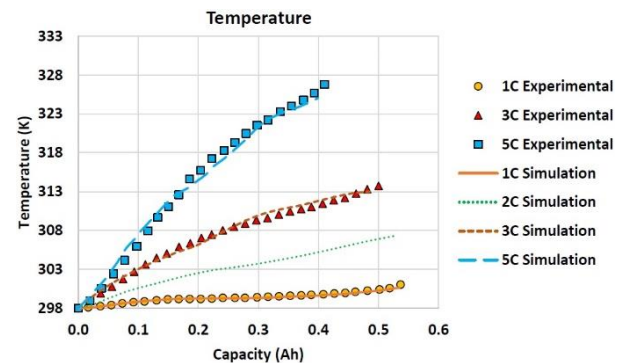
در شکل ۸ توزیع دما در سطح انباره تحت نرخ‌های مختلف تخلیه جریان ثابت آورده شده است. سطر اول برای نرخ تخلیه ۱C از چپ به راست در ابتدا (ثانیه ۱۰ ام)، وسط (ثانیه ۱۵۵۰ ام) و انتها (ثانیه ۳۰۹۰ ام) تخلیه، سطر دوم برای نرخ تخلیه ۳C از چپ به راست در ابتدا (ثانیه ۱۰ ام)، وسط (ثانیه ۴۸۰ ام) و انتها (ثانیه ۹۵۵ ام) تخلیه و سطر سوم برای نرخ تخلیه ۵C از چپ به راست در ابتدا (ثانیه ۱۰ ام)، وسط (ثانیه ۲۲۸ ام) و انتها (ثانیه ۴۶۹ ام) تخلیه است.

مشاهده می‌شود که به علت تراکم بیشتر جریان در زبانه‌ها، دما در زبانه‌های انباره گرمتر از سایر مناطق انباره است. همچنین به علت هدایت کم گرمائی در گوشه‌های انباره، دما در این نواحی کم‌تر است. در هر نرخ تخلیه با گذر زمان، بیشینه دما از طرف زبانه‌ها به سمت مرکز انباره گسترش یافته و یکنواختی توزیع دما در سطح شبکه انباره کاهش می‌یابد. با کاهش نرخ تخلیه، مدت زمان چرخه تخلیه افزایش

برای تأیید بیشتر شبیه‌سازی‌ها، تغییرات دمای متوسط سطح بر حسب ظرفیت انباره طی فرآیند تخلیه محاسبه شده و با نتایج آزمایشگاهی مقایسه شده است. دمای اولیه انباره و دمای محیط ۲۹۸ کلوین است. شکل ۶ این نمودار را نشان می‌دهد که تطبیق خوبی با نتایج آزمایشگاهی دارد. بیشینه مقادیر خطا در نرخ‌های ۱C، ۲C، ۳C و ۵C بترتیب برابر با ۰.۱۲۷، ۰.۳۸، ۰.۵ و ۰.۵ درصد است.

بیشترین مقدار خطا مجدداً در نرخ تخلیه ۵C رخ داده که علت آن تشدید واکنش‌های الکتروشیمیایی در نرخ‌های تند تخلیه است. شبیه‌سازی‌ها طبق شکل ۶ نشان می‌دهد که دمای متوسط سطح انباره در تمامی نرخ‌های تخلیه از مقدار دمای اولیه ۲۹۸ کلوین شروع شده است. در نرخ‌های تخلیه ۱C، ۲C، ۳C و ۵C دمای متوسط سطح انباره بترتیب تا مقادیر ۳۰۰.۷، ۳۰۷.۳، ۳۱۳ و ۳۲۵ کلوین افزایش یافته است.

بنابراین با افزایش نرخ تخلیه، شدت جریان تخلیه و واکنش‌های الکتروشیمیایی در انباره افزایش یافته و دمای سطح انباره افزایش بیشتری خواهد داشت. به‌عنوان مثال در نرخ‌های تخلیه کم مانند ۱C، افزایش دمای سطح انباره فقط ۲.۷ کلوین بوده درحالی‌که در نرخ‌های تند تخلیه مانند ۵C، افزایش دمای انباره ۲۷ کلوین است. ضمناً نتایج آزمایشگاهی برای تصدیق با نتایج شبیه‌سازی تخلیه ۲C در گزارش‌ها وجود ندارد.



شکل ۸: تغییرات دمای سطح بر حسب ظرفیت انباره در نرخ‌های مختلف تخلیه در حالت شبیه‌سازی (خطوط) و آزمایش تجربی (نقاط)

[۱۸]

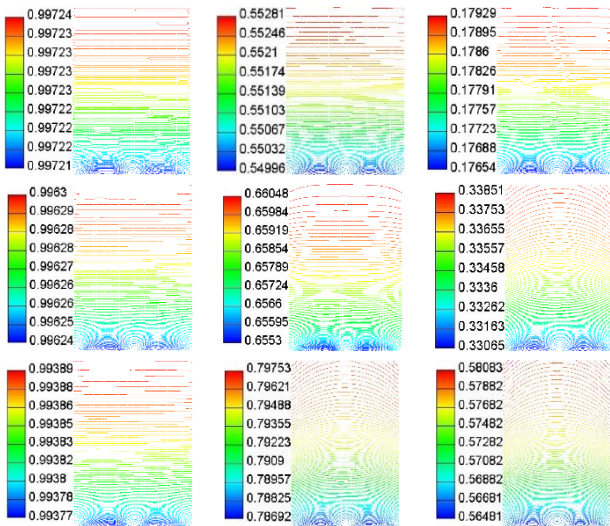
۸- بحث بر روی نتایج

پس از اعتبارسنجی و تصدیق نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های انجام شده با نتایج آزمایشگاهی، سایر ویژگی‌های انباره تعیین خواهد شد. نتایج حاصل از شبیه‌سازی سه بعدی و الکتروشیمیایی-گرمائی یک تک شبکه انباره لیتیومی ePLB C020 با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی در نرخ‌های تخلیه جریان ثابت ۱C، ۳C و ۵C به‌دست آمده است.

شکل ۷ نشان دهنده توزیع ظرفیت برقی در سطح جمع‌کننده جریان مثبت تحت چرخه‌های مختلف تخلیه جریان ثابت است. سطر اول برای نرخ تخلیه ۱C از چپ به راست در ابتدا (ثانیه ۱۰ ام)، وسط (ثانیه ۱۵۵۰ ام) و انتها (ثانیه ۳۰۹۰ ام) تخلیه، سطر دوم برای نرخ تخلیه ۳C از چپ به راست در ابتدا (ثانیه ۱۰ ام)، وسط (ثانیه ۴۸۰ ام) و انتها (ثانیه ۹۵۵ ام) تخلیه، سطر سوم برای نرخ تخلیه ۵C از چپ به راست در ابتدا (ثانیه ۱۰ ام)، وسط (ثانیه ۲۲۸ ام) و انتها (ثانیه ۴۶۹ ام) تخلیه است.

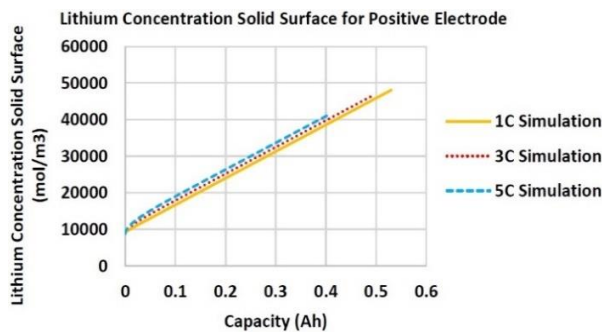
در شکل ۱۰ تصویر توزیع سطح تغذیه در الکتروود مثبت مشاهده می‌شود. سطر اول برای نرخ تخلیه ۱C از چپ به راست در ابتدا (ثانیه ۱۰ ام)، وسط (ثانیه ۱۵۵۰ ام) و انتها (ثانیه ۳۰۹۰ ام) تخلیه، سطر دوم برای نرخ تخلیه ۳C از چپ به راست در ابتدا (ثانیه ۱۰ ام)، وسط (ثانیه ۴۸۰ ام) و انتها (ثانیه ۹۵۵ ام) تخلیه و سطر سوم برای نرخ تخلیه ۵C از چپ به راست در ابتدا (ثانیه ۱۰ ام)، وسط (ثانیه ۲۲۸ ام) و انتها (ثانیه ۴۶۹ ام) تخلیه است.

طبق نتایج، به علت هدایت برقی بهتر در زبانه‌های انباره، سطح تغذیه در نزدیکی زبانه‌ها کم‌تر است و با گذشت زمان، سطح تغذیه به طرف مرکز الکتروود حرکت می‌کند. با افزایش زمان در هر نرخ تخلیه، یکنواختی سطح تغذیه در الکتروود مثبت کاهش می‌یابد. با افزایش نرخ تخلیه، یکنواختی سطح تغذیه نیز کاهش می‌یابد که این امر باعث کاهش طول عمر انباره لیتیومی خواهد شد.



شکل ۱۰: توزیع سطح تغذیه در الکتروود مثبت در ابتدا، وسط و انتهای فرآیند تخلیه (چپ به راست)، سطر اول در نرخ ۱C، سطر دوم در نرخ ۳C و سطر سوم در نرخ ۵C

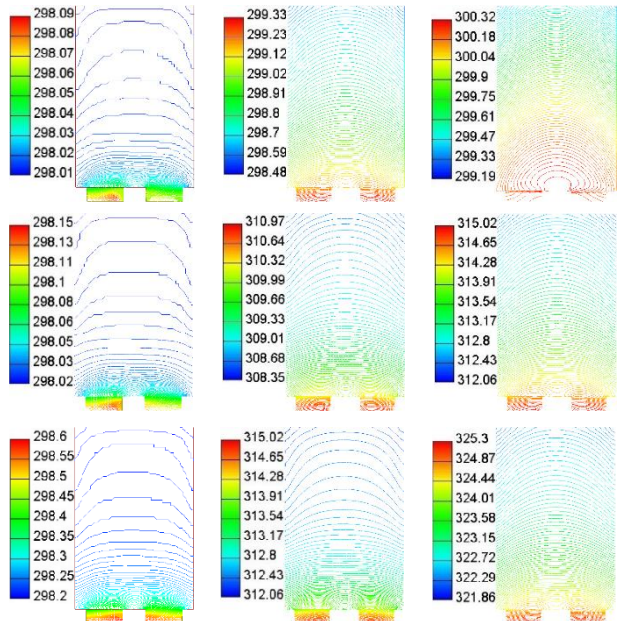
تغییرات غلظت یون لیتیوم در الکتروود مثبت انباره لیتیومی تحت نرخ‌های مختلف تخلیه محاسبه شد. این تغییرات مطابق با شکل ۱۱ است.



شکل ۱۱: غلظت یون لیتیوم در الکتروود مثبت بر حسب ظرفیت انباره در نرخ‌های مختلف تخلیه

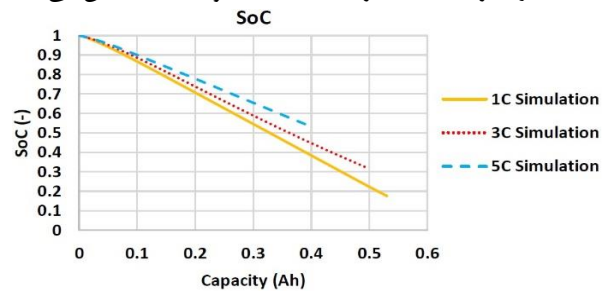
یافته و به همین علت مقدار گسترش دما به سمت مرکز شبکه بیشتر شده است. همچنین با افزایش نرخ تخلیه، به علت تشدید جریان و واکنش‌های الکتروشیمیایی در انباره، بیشینه دمای شبکه افزایش یافته و یکنواختی توزیع دما در شبکه کاهش یافته است که این امر ممکن است باعث کاهش عمر و یا انفجار انباره لیتیومی شود.

همچنین به دلیل کوچک بودن ضخامت شبکه انباره لیتیومی (۲۰۷ میکرو متر) تغییرات دما در جهت عمود بر انباره (از جمع‌کننده جریان مثبت به سمت جمع‌کننده جریان منفی) بسیار کوچک بوده و تغییرات دما عمدتاً در صفحه انباره است.



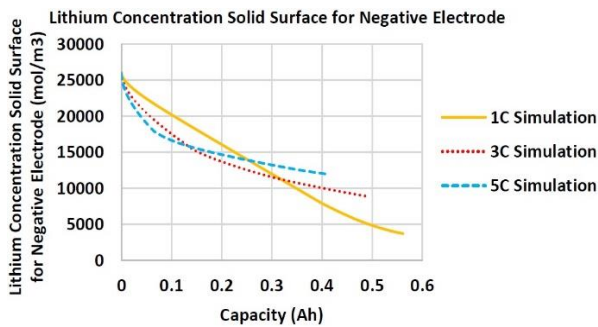
شکل ۸: توزیع دما (کلوین) در سطح انباره در ابتدا، وسط و انتهای فرآیند تخلیه (چپ به راست)، سطر اول در نرخ ۱C، سطر دوم در نرخ ۳C و سطر سوم در نرخ ۵C

در شکل ۹، سطح تغذیه تک شبکه انباره لیتیومی تحت چرخه تخلیه جریان ثابت آورده شده است. در هر سه نرخ تخلیه ۱C، ۳C و ۵C، سطح تغذیه انباره از مقدار اولیه یک (صد در صد) با شیب تقریباً ثابتی شروع به کاهش کرده است. با کاهش نرخ تخلیه، می‌توان به سطح تغذیه کمتری دست یافت. در نرخ‌های تخلیه ۱C، ۳C و ۵C، سطح تغذیه انباره بترتیب تا مقادیر ۰،۱۷۶، ۰،۳۲۵ و ۰،۵۲۸ کاهش می‌یابد.



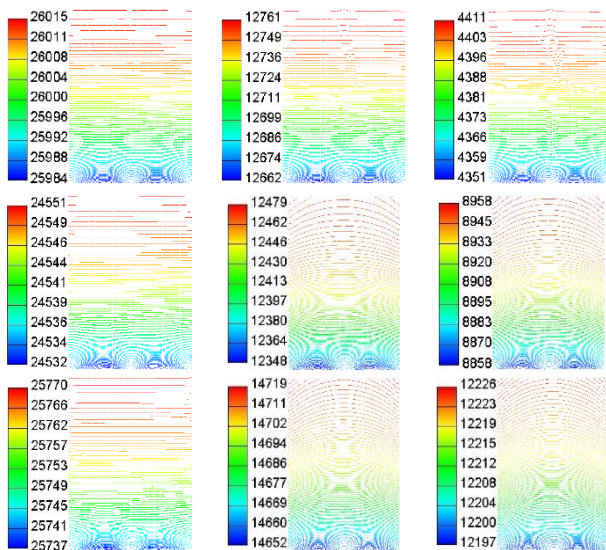
شکل ۹: تغییرات سطح تغذیه انباره بر حسب ظرفیت انباره در نرخ‌های مختلف تخلیه

یون‌های لیتیوم از سمت الکتروود منفی به طرف الکتروود مثبت حرکت کرده و غلظت یون لیتیوم در الکتروود منفی کاهش می‌یابد. غلظت یون لیتیوم در الکتروود منفی در نرخ‌های تخلیه ۱C، ۳C و ۵C به ترتیب از مقادیر ۲۶۰۷۸، ۲۵۹۸۴ و ۲۵۸۸۹ مول بر متر مکعب شروع شده و به ترتیب تا مقادیر ۳۷۱۹، ۸۸۵۶ و ۱۱۹۹۴ مول بر متر مکعب کاهش یافته است. مشاهده می‌شود که با کاهش نرخ تخلیه، می‌توان به غلظت‌های کمتری از یون لیتیوم در الکتروود منفی دست پیدا کرد.



شکل ۱۳: غلظت یون لیتیوم در الکتروود منفی بر حسب ظرفیت انبار در نرخ‌های مختلف تخلیه

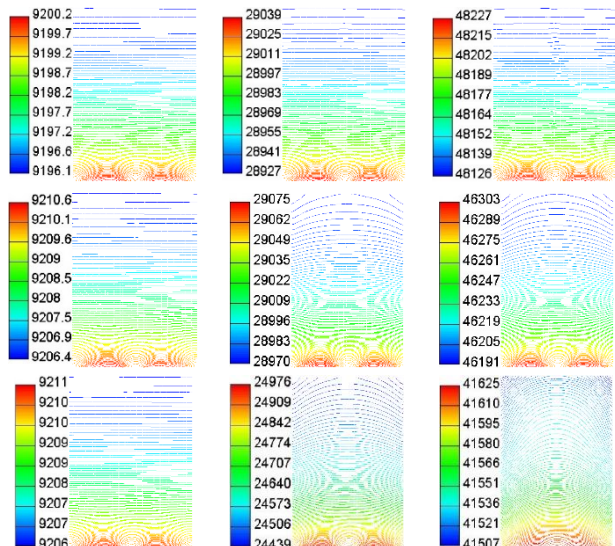
در شکل ۱۴ تصویر غلظت یون لیتیوم در الکتروود منفی آورده شده است. سطر اول برای نرخ تخلیه ۱C از چپ به راست در ابتدا (ثانیه ۱۰ ام)، وسط (ثانیه ۱۵۵۰ ام) و انتها (ثانیه ۳۰۹۰ ام) تخلیه، سطر دوم برای نرخ تخلیه ۳C از چپ به راست در ابتدا (ثانیه ۱۰ ام)، وسط (ثانیه ۴۸۰ ام) و انتها (ثانیه ۹۵۵ ام) تخلیه و سطر سوم برای نرخ تخلیه ۵C از چپ به راست در ابتدا (ثانیه ۱۰ ام)، وسط (ثانیه ۲۲۸ ام) و انتها (ثانیه ۴۶۹ ام) تخلیه است.



شکل ۱۴: توزیع غلظت یون لیتیوم (مول بر متر مکعب) در الکتروود منفی در ابتدا، وسط و انتهای فرآیند تخلیه (چپ به راست)، سطر اول در نرخ ۱C، سطر دوم در نرخ ۳C و سطر سوم در نرخ ۵C

همان‌طور که مشاهده می‌شود، با شروع فرآیند تخلیه، یون‌های لیتیوم از سمت الکتروود منفی به طرف الکتروود مثبت حرکت کرده و غلظت یون لیتیوم در الکتروود مثبت با شیب تقریباً ثابتی افزایش می‌یابد. غلظت یون لیتیوم در الکتروود مثبت در نرخ‌های تخلیه ۱C، ۳C و ۵C به ترتیب از مقادیر ۸۷۸۰، ۸۸۱۱ و ۸۸۴۲ مول بر متر مکعب شروع شده و به ترتیب تا مقادیر ۴۸۰۹۳، ۴۶۵۱۱ و ۴۱۴۳۴ مول بر متر مکعب افزایش یافته است.

مشاهده می‌شود که با کاهش نرخ تخلیه، می‌توان به غلظت‌های بزرگتری از یون لیتیوم در الکتروود مثبت دست پیدا کرد. در شکل ۱۲ تصویر غلظت یون لیتیوم در الکتروود مثبت آورده شده است. سطر اول برای نرخ تخلیه ۱C از چپ به راست در ابتدا (ثانیه ۱۰ ام)، وسط (ثانیه ۱۵۵۰ ام) و انتها (ثانیه ۳۰۹۰ ام) تخلیه، سطر دوم برای نرخ تخلیه ۳C از چپ به راست در ابتدا (ثانیه ۱۰ ام)، وسط (ثانیه ۴۸۰ ام) و انتها (ثانیه ۹۵۵ ام) تخلیه و سطر سوم برای نرخ تخلیه ۵C از چپ به راست در ابتدا (ثانیه ۱۰ ام)، وسط (ثانیه ۲۲۸ ام) و انتها (ثانیه ۴۶۹ ام) تخلیه است.

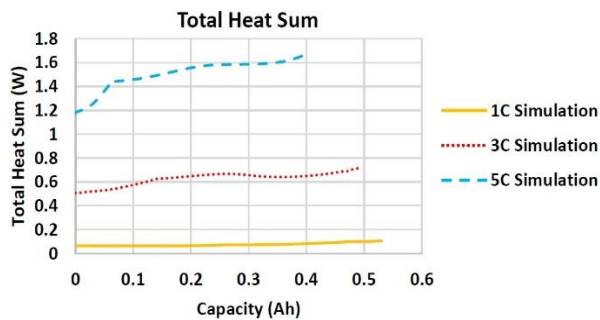


شکل ۱۲: توزیع غلظت یون لیتیوم (مول بر متر مکعب) در الکتروود مثبت در ابتدا، وسط و انتهای فرآیند تخلیه (چپ به راست)، سطر اول در نرخ ۱C، سطر دوم در نرخ ۳C و سطر سوم در نرخ ۵C

مشاهده می‌شود که به علت هدایت برقی بهتر در زبانه‌ها، غلظت یون لیتیوم در نزدیکی زبانه‌های انبار بیشتر است و با گذشت زمان به طرف مرکز الکتروود حرکت می‌کند. همچنین با افزایش نرخ تخلیه، یکنواختی غلظت یون لیتیوم در الکتروود مثبت کاهش می‌یابد که امری نامناسب برای انبارهای لیتیومی به حساب می‌آید.

تغییرات غلظت یون لیتیوم در الکتروود منفی انبار لیتیومی تحت نرخ‌های مختلف تخلیه محاسبه شده است. این تغییرات مطابق با شکل ۱۳ است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، با شروع فرآیند تخلیه،

مقدار تولید گرمای کل انباره ناشی تولید گرمای اهمی و تولید گرمای واکنش تحت نرخ‌های مختلف تخلیه محاسبه شد. این تغییرات مطابق با شکل ۱۷ است. مقدار تولید گرمای کل در نرخ‌های تخلیه ۱C، ۳C و ۵C به ترتیب از مقادیر ۰,۰۷، ۰,۵۱ و ۱,۱۸ وات شروع شده و به ترتیب تا مقادیر ۰,۱۱، ۰,۷۲ و ۱,۶۸ وات افزایش می‌یابد. در ابتدا و انتهای چرخه تخلیه به علت فرآیندهای لیتیوم‌دهی و لیتیوم‌گیری توسط الکترودهای منفی و مثبت، مقدار افزایش تولید گرمای کل انباره شدیدتر است. با افزایش نرخ تخلیه، به دلیل افزایش شدت جریان تخلیه و واکنش‌های الکتروشیمیایی در انباره، مقدار و شیب تولید گرمای کل انباره نیز افزایش یافته است.



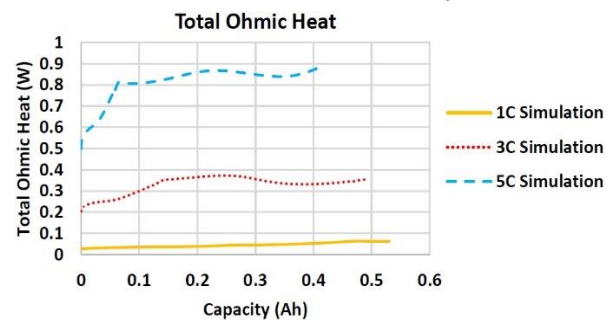
شکل ۱۷: تولید گرمای کل انباره ناشی از تولید گرمای اهمی و تولید گرمای واکنش بر حسب ظرفیت انباره در نرخ‌های مختلف تخلیه

در نهایت، شبیه‌سازی عددی به روش الکتروشیمیایی-گرمائی برای چرخه تغذیه/تخلیه با جریان متغیر با زمان انجام شده است. در این حالت، جریان در بازه‌های زمانی مختلف، مقادیر متفاوتی خواهد داشت. در جدول ۹ چرخه تغذیه/تخلیه مورد نظر ارائه شده است. این چرخه به ترتیب شامل مراحل تخلیه، استراحت، تغذیه و مجدداً استراحت طی بازه‌های زمانی تقریباً یکسان است. چرخه تغذیه/تخلیه مذکور بیان‌کننده نمونه کوچکی از یک چرخه با جریان متغیر است که می‌توان با تغییر در مقدار شدت جریان و مدت زمان تغذیه یا تخلیه، تمامی چرخه‌های جریان متغیر را شبیه‌سازی نمود.

جدول ۹: چرخه تغذیه/تخلیه متغیر با زمان

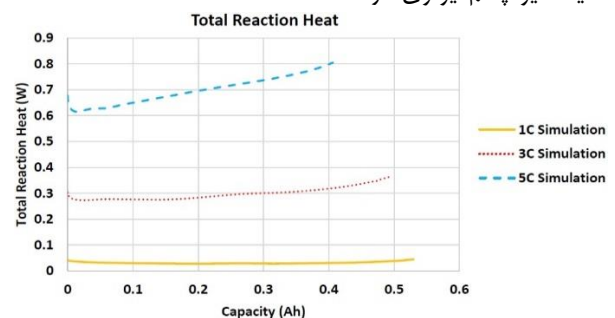
زمان (ثانیه)	نرخ تغذیه/تخلیه	جریان (آمپر)
۰ تا ۶۰۰	۱,۵C (تخلیه)	۰,۹۲۶۴
۶۰۰ تا ۱۲۰۰	۰ (استراحت)	۰
۱۲۰۰ تا ۱۹۰۰	۱C (تغذیه)	۰,۶۱۷۶
۱۹۰۰ تا ۲۴۰۰	۰ (استراحت)	۰

مشاهده می‌شود که غلظت یون لیتیوم در نزدیکی زبانه‌های انباره کمتر است و با گذشت زمان به طرف مرکز الکتروود حرکت می‌کند. مقدار تولید گرمای ژول (تولید گرمای اهمی) ناشی از ناتوانی حرکت الکترون‌ها با سرعت مورد نیاز تحت نرخ‌های مختلف تخلیه محاسبه شد. این تغییرات مطابق با شکل ۱۵ است. مقدار تولید گرمای ژول در نرخ‌های تخلیه ۱C، ۳C و ۵C به ترتیب از مقادیر ۰,۰۳، ۰,۲۱ و ۰,۵ وات شروع شده و به ترتیب تا مقادیر ۰,۰۶۲، ۰,۳۶ و ۰,۸۸ وات افزایش می‌یابد. در ابتدا و انتهای چرخه تخلیه به علت فرآیندهای لیتیوم‌دهی و لیتیوم‌گیری توسط الکترودهای منفی و مثبت، مقدار افزایش تولید گرمای اهمی شدیدتر است. با افزایش نرخ تخلیه، به دلیل افزایش شدت جریان تخلیه، تولید گرمای اهمی نیز بیشتر شده و در کل، تولید گرمای اهمی در نرخ‌های تند تخلیه مقدار بیشتری دارد.

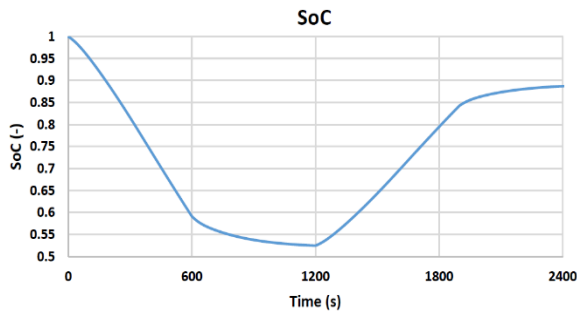


شکل ۱۵: تولید گرمای ناشی از گرمایش ژول بر حسب ظرفیت انباره در نرخ‌های مختلف تخلیه

مقدار تولید گرمای واکنش ناشی از واکنش‌های الکتروشیمیایی بین الکترودها و الکتروولت در نرخ‌های مختلف تخلیه محاسبه شد. این تغییرات مطابق با شکل ۱۶ است. مقدار تولید گرمای واکنش در نرخ‌های تخلیه ۱C، ۳C و ۵C به ترتیب از مقادیر ۰,۰۴، ۰,۳ و ۰,۷ وات شروع شده و به ترتیب تا مقادیر ۰,۰۴۵، ۰,۳۶ و ۰,۸۱ وات افزایش می‌یابد. در هر سه نرخ تخلیه، در ابتدای فرآیند تخلیه مقدار تولید گرمای واکنش کمی کاهش یافته و سپس روند افزایشی داشته است. با افزایش نرخ تخلیه، به دلیل افزایش شدت جریان تخلیه و واکنش‌های الکتروشیمیایی در انباره، مقدار و شیب افزایش تولید گرمای واکنش نیز بیشتر شده و در کل، تولید گرمای واکنش در نرخ‌های تند تخلیه تأثیر چشم‌گیرتری دارد.



شکل ۱۶: تولید گرمای ناشی از گرمایش واکنش بر حسب ظرفیت انباره در نرخ‌های مختلف تخلیه



شکل ۲۰: سطح تغذیه در چرخه تغذیه/تخلیه بر حسب زمان نتایج شبیه‌سازی‌های عددی به صورت زیر خلاصه شده است:

۱- با کاهش نرخ تخلیه، ولتاژ انباره از مقادیر بزرگتری شروع به کاهش کرده و مقدار تغییرات ولتاژ تا انتهای تخلیه افزایش یافته است.

۲- با گذر زمان و در انتهای فرآیند تخلیه بتدریج یکنواختی ظرفیت برقی در سطح جمع‌کننده جریان مثبت کاهش می‌یابد. همچنین با افزایش نرخ تخلیه، یکنواختی ظرفیت برقی کاهش یافته است.

۳- به علت تراکم بیشتر جریان در زبانه‌ها، دما در زبانه‌های انباره گرمتر از سایر مناطق انباره است. همچنین به علت هدایت کم گرمایی در گوشه‌های انباره، دما در این نواحی کم‌تر است. در هر نرخ تخلیه با گذر زمان، بیشینه دما از طرف زبانه‌ها به سمت مرکز انباره گسترش یافته و یکنواختی توزیع دما در سطح شبکه انباره کاهش می‌یابد. همچنین با افزایش نرخ تخلیه، بیشینه دمای شبکه افزایش و یکنواختی توزیع دما در شبکه کاهش یافته است.

۴- به علت هدایت برقی بهتر در زبانه‌های انباره، سطح تغذیه در نزدیکی زبانه‌ها کم‌تر است. با افزایش نرخ تخلیه، یکنواختی سطح تغذیه نیز کاهش می‌یابد که این امر باعث کاهش طول عمر انباره لیتیومی خواهد شد.

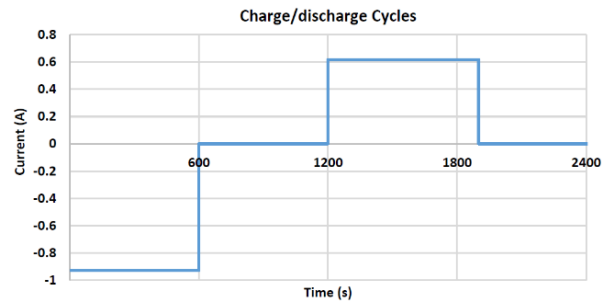
۵- به علت هدایت برقی بهتر در زبانه‌ها، غلظت یون لیتیوم در نزدیکی زبانه‌های انباره بیشتر است و با گذشت زمان به طرف مرکز الکتروود حرکت می‌کند. همچنین با افزایش نرخ تخلیه، یکنواختی غلظت یون لیتیوم در الکتروود مثبت کاهش می‌یابد.

۶- در ابتدا و انتهای چرخه تخلیه، مقدار افزایش تولید گرمای اهمی شدیدتر است. با افزایش نرخ تخلیه، به دلیل افزایش شدت جریان تخلیه، تولید گرمای اهمی نیز بیشتر خواهد شد.

۷- با افزایش نرخ تخلیه، به دلیل افزایش شدت جریان تخلیه و واکنش‌های الکتروشیمیایی در انباره، مقدار و شیب افزایش تولید گرمای واکنش نیز بیشتر شده است.

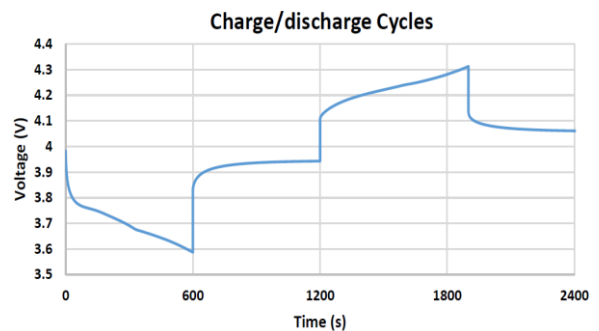
۸- در ابتدا و انتهای چرخه تخلیه، مقدار افزایش تولید گرمای کل انباره شدیدتر است. با افزایش نرخ تخلیه، به دلیل افزایش شدت جریان تخلیه و واکنش‌های الکتروشیمیایی در انباره، مقدار و شیب تولید گرمای کل انباره نیز افزایش یافته است.

تغییرات جریان در چرخه تغذیه/تخلیه بر حسب زمان در شکل ۱۸ ارائه شده است.



شکل ۱۸: جریان در چرخه تغذیه/تخلیه بر حسب زمان

تغییرات ولتاژ خروجی بر حسب زمان در شکل ۱۹ ارائه شده است. همانطور که مشاهده می‌شود، با شروع چرخه تخلیه، ولتاژ انباره از مقدار ۳٫۹۸ ولت شروع به کاهش کرده و طی مدت زمان ۶۰۰ ثانیه پس از شروع تخلیه، ولتاژ تا مقدار ۳٫۵۸ ولت ادامه می‌یابد. پس از آن چرخه وارد مرحله استراحت شده و ولتاژ خروجی تا مقدار ۳٫۹۴ ولت افزایش یافته است. سپس چرخه تغذیه انباره آغاز شده و ولتاژ خروجی تا مقدار ۴٫۳۱ ولت افزایش می‌یابد. در نهایت مجدداً وارد مرحله استراحت شده و ولتاژ انباره به مقدار ۴٫۰۶ ولت خواهد رسید.



شکل ۱۹: تغییرات ولتاژ خروجی در چرخه تغذیه/تخلیه بر حسب زمان

در شکل ۲۰ تغییرات سطح تغذیه انباره در چرخه تغذیه/تخلیه بر حسب زمان نشان داده شده است. سطح تغذیه انباره با آغاز فرآیند تخلیه از مقدار اولیه ۱ (صد در صد) شروع به کاهش کرده و در انتهای مرحله اول استراحت به مقدار ۰٫۵۳ رسیده است. با شروع فرآیند تغذیه، مقدار سطح تغذیه انباره افزایش یافته و در انتهای مرحله دوم استراحت به مقدار ۰٫۸۸ خواهد رسید.

Q_{max}	بیشترین ظرفیت انباره، AS
r	شعاع ذرات الکترو، m
r_s	شعاع متوسط ذرات، m
R	ثابت جهانی گازها، J/mol.K
SoC	سطح تغذیه، -
t^+	عدد انتقال کاتیون، -
T	دما، K
T_{∞}	دمای محیط، K
V	حجم، m^3
V_{oc}	ولتاژ مدار باز، V

نمادهای یونانی

β	ضریب انتقال گرمای خارجی، W/m^2K
δ_1	متغیر وابستگی دمایی، m^2/Ks
δ_2	متغیر وابستگی دمایی، m^2/K^2s
δ_3	متغیر وابستگی دمایی، m^2/K^3s
ε	کسر حجمی، -
ε_f	کسر حجمی پر کننده و گیره، -
η_{act}	ولتاژ بیش از حد فعالسازی، V
θ	درست متوسط در الکترو، -
θ_{se}	درست سطح در الکترو، -
θ_0	درست متوسط در الکترو در سطح تغذیه صفر، -
θ_1	درست متوسط در الکترو در سطح تغذیه یک، -
κ	هدایت یونی، A/Vm
λ	هدایت گرمایی، W/mK
σ	هدایت برقی، A/Vm
ϕ	ظرفیت برقی، V
ϕ_{oc}	ظرفیت مدار باز، V

زیرنویس‌ها

c	جمع کننده جریان
c^+	جمع کننده جریان مثبت
c^-	جمع کننده جریان منفی
e	حالت الکترولیت
ele	حالت انتقال الکترون
ini	مقدار اولیه
ion	حالت یونی
max	مقدار بیشینه
ref	مقدار مرجع
s	حالت جامد الکترو
se	سطح مشترک بین ذرات الکترو/الکترولیت
sep	جداساز

۹- در انتها، یک چرخه تغذیه/تخلیه با جریان متغیر با زمان شبیه‌سازی شد و نتایج ولتاژ خروجی و سطح تغذیه انباره ارائه گردید. نتایج نشان می‌دهد که با استفاده از روش الکتروشیمیایی-گرمائی، می‌توان ویژگی‌های انباره را با دقت بسیار خوبی در چرخه‌های جریان متغیر نیز محاسبه نمود.

۹- نتیجه‌گیری

در این مقاله یک تک شبکه سه بعدی انباره لیتیومی به روش الکتروشیمیایی-گرمائی به صورت عددی شبیه‌سازی شد. سه چرخه تخلیه جریان ثابت با نرخ ۱C، ۳C و ۵C انجام گرفت. اعتبارسنجی نتایج عددی شبیه‌سازی الکتروشیمیایی-گرمائی در هر سه نرخ تخلیه، تطبیق خوبی با نتایج تجربی داشت.

سپس ویژگی‌های انباره از جمله توزیع ظرفیت برقی در جمع کننده جریان، سطح تغذیه انباره، غلظت یون لیتیوم در الکترو مثبت و منفی، توزیع دما در سطح انباره و گرمای تولید شده طی فرآیند تخلیه در نرخ‌های مختلف محاسبه شد. در نهایت، یک چرخه تغذیه/تخلیه با جریان متغیر با زمان به روش الکتروشیمیایی-گرمائی شبیه‌سازی و نتایج ولتاژ خروجی و سطح تغذیه انباره ارائه شد.

فهرست علائم

a_s	مساحت سطح فعال در واحد حجم، m^2/m^3
c_e	غلظت نمک لیتیوم در الکترولیت، mol/m^3
c_p	ظرفیت گرمائی ویژه، J/kgK
c_s	غلظت لیتیوم در الکترو، mol/m^3
C	نرخ تغذیه یا تخلیه، 1/h
D	ضریب توزیع، m^2/s
DoD	عمق تخلیه، -
E	انرژی فعالسازی، J/mol
$f(\varphi)$	تابع φ ، واحد متغیر
F	ثابت فارادی، As/mol
i, i^{\rightarrow}	تراکم جریان، A/m^2
i_r	تراکم جریان واکنش، A/m^2
i_0	تراکم جریان مبادله، A/m^2
I	جریان برقی، A
j^{\rightarrow}	شار توزیع، mol/m^2s
k_a	ضریب انتقال آندیک، -
k_c	ضریب انتقال کاتدیک، -
$n^{\rightarrow b}$	بردار عمود واحد در مرز خارجی، -
$n^{\rightarrow f}$	بردار عمود واحد در سطح مشترک دامنه، -
q	شاخص بروگمن، -
\dot{q}	شار گرمائی، W/m^2

predicting runtime and IV performance, IEEE Transactions on Energy Conversion, vol. 21, no. 2, pp. 504-511, 2006	+	الکتروود مثبت
[12] Y. Xing, E.W.M. Ma, K.L. Tsui and M. Pecht, Battery management systems in electric and hybrid vehicles, Energies, vol. 4, no. 11, pp. 1840-1857, 2011	-	الکتروود منفی
[13] L. Xu, J. Wang and Q. Chen, Kalman filtering state of charge estimation for battery management system based on a stochastic fuzzy neural network battery model, Energy Conversion and Management, vol. 53, no. 1, pp. 33-39, 2012	±	الکتروود
[14] J. Li, C.F. Yuan, Z.H. Guo, Z.A. Zhang, Y.Q. Lai and J. Liu, Limiting factors for low temperature performance of electrolytes in LiFePO ₄ /Li and Graphite/Li Half Cells, Electrochim Acta, vol. 59, pp. 69-74, 2012		بالانویسها
[15] Y. Ye, Y. Shi, N. Cai, J. Lee and X. He, Electro-thermal modeling and experimental validation for lithium ion battery, Journal of Power Sources, vol. 199, pp. 227- 238, 2012	f	سطح مشترک دامنه
[16] Y. Xing, W. He, M. Pecht and K.L. Tsui, State of charge estimation of lithium-ion batteries using the open-circuit voltage at various ambient temperatures, Applied Energy, vol. 113, pp. 106-115, 2014	b	مرز خارجی
[17] Y. Zhang, C. Zhang and X. Zhang, State-of-charge estimation of the lithium-ion battery system with time-varying parameter for hybrid electric vehicles, IET Control Theory and Applications, vol. 8, no. 3, pp. 160-167, 2014		اختصارها
[18] C. Fink and B. Kaltenegger, Electrothermal and electrochemical modeling of lithium-ion batteries: 3D simulation with experimental validation, ECS Transactions, vol. 61, no. 27, 2014	Li	لیتیوم
[19] M. Cheng, L. Feng and B. Chen, Simulation of lithium ion HEV battery aging using electrochemical battery model under different ambient temperature conditions, SAE Technical Paper, 2015	OCV	ولتاژ مدار باز
[20] F. Bahiraei, A. Fartaj and Gh.A Nazri, Electrochemical-thermal modeling to evaluate active thermal management of a lithium-ion battery module, Electrochimica Acta, vol. 254, pp. 59-71, 2017		مراجع و منابع
[21] Y. Tang and L. Wu, 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, pp. 11-22, 2018		[1] C.D. Rahn and C.Y. Wang, Battery systems engineering, John Wiley & Sons Ltd, 2013
[22] E. Hosseinzadeh, R. Genieser, D. Worwood, A. Barai, J. Marco, and P. Jennings, A systematic approach for electrochemical-thermal modelling of a large format lithium-ion battery for electric vehicle application,		[2] M. Mastali Majdabadi, Electrochemical-thermal modeling of lithium-ion batteries, Doctoral Thesis, Canada, 2016
		[3] D. Linden and T.B. Reddy, Handbook of batteries, 2nd ed, McGraw-hill, New York, 2002
		[4] H. Martin, Solid-state-EV-battery breakthrough from li-ion battery inventor John Goodenough, North American Energy News, 2017
		[5] C. Campestrini and M.F. Horsche, Validation and benchmark methods for battery management system functionalities: State of charge estimation algorithms, Journal of Energy Storage, vol. 7, pp. 38-51, 2016
		[6] M.A. Hannan and M.S.H. Lipu, 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, pp. 834-854, 2017
		[7] S.Y. Chung, J.T. Bloking and Y.M. Chiang, Electronically conductive phospho-olivines as lithium storage electrodes, Nature Materials, vol.1, no. 2, pp. 123-128, 2002
		[8] F.V. Conte, Battery and battery management for hybrid electric vehicles: A review, Elektrotechnik und Informationstechnik, vol. 123, no. 10, pp. 424-431, 2006
		[9] <u>Imara Corporation website</u> , <i>Imaracorp.com</i> , Archived from the original on 22 July, 2009
		[10] R.C. Kroeze and P.T. Krein, Electrical battery Model for Use in Dynamic Electric Vehicle simulations, IEEE Power Electronics Specialists Conference, pp. 1336-1342, 2008
		[11] M. Chen and G.A. Rinc Mora, Accurate electrical battery model capable of

Journal of Power Sources, vol. 382, pp. 77-94, 2018

- [23] C. Chen, R. Xiong, R. Yang and W. Shen, State of charge estimation of lithium-ion battery using an improved neural network model and extended Kalman filter, Journal of Cleaner Production, vol. 234, pp. 1153-1164, 2019
- [24] EIG-ePLB-C020-Datasheet, High Energy Product, ePLB C Technology
- [25] P. Taheri and M. Bahrami, Temperature rise in prismatic polymer lithium-Ion batteries: An analytic approach, SAE International Journal of Passenger Cars-Electronic and Electrical Systems, pp. 164-176, 2012



Numerical investigation of the parameters of a prismatic lithium ion battery under load for electrical vehicle

M. A. Bayati Nezhad^{1*}, A. Mohammadi²

¹ MSc Graduate, Mechanical Engineering Department, Shahid Rajaee Teacher Training University, Tehran, Iran, a.bayatinezhad@sru.ac.ir

² Faculty of Mechanical Engineering Department, Shahid Rajaee Teacher Training University, Tehran, Iran, amohammadi@sru.ac.ir

*Corresponding Author

ARTICLE INFO

Article history:

Received: 27 May 2020

Accepted: 18 August 2020

Keywords:

Lithium Ion Battery

State of Charge

Lithium Ion Concentration

ABSTRACT

Electric vehicles and hybrid electric vehicles are a suitable alternative for vehicles with hydrocarbons fuels to reduce pollution and fossil resources. The batteries operate as the driving force for these vehicles. One of the most critical parameters of the battery is computing the state of charge (SOC). The best range for SOC of lithium-ion battery is between 20% and 90%, and charging and discharging cycles outside of this range causes to decrease the battery life-span. Therefore, the battery SOC must be specified during the charging and discharging processes in order to the SOC to be within a safe range. In this paper, a single cell of lithium ion battery during the constant current discharge cycle with the electrochemical-thermal method has been simulated with 3D CFD in AVL FIRE software. First, numerical results are validated with experimental results of voltage and temperature. Then, the electrical potential distribution in the current collector, SOC, the lithium ion concentration in the electrodes, the temperature distribution at the battery surface, and generated heat during the discharge process at different rates are presented. Finally, a charge/discharge cycle with the variable current was simulated, and the output voltage and SOC were calculated.

