

**简介:** 基于多物理场耦合仿真软件COMSOL Multiphysics® 5.4对三元锂离子电池建立电化学-热耦合模型, 并分析其热特性。

**结果:** 由图可知, 电池的总产热量和电池的总温升都与放电倍率呈线性相关, 都随着放电速率的增大而增大。

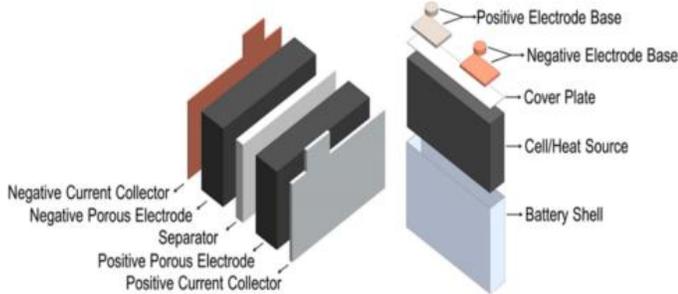


图 1. 电池三维几何模型爆炸示意图

**计算方法:** 电化学-热耦合模型是由电化学模型以及热模型中各自的相关参数耦合而成, 电化学模型在建立过程中涉及到电荷守恒、质量守恒以及电极动力学, 而热模型的构建主要是结合产热、传热与散热的能量守恒关系。两者相辅相成, 从而提高模型的准确性。

**电化学模型:**

- 1) 质量守恒-固相  $\frac{\partial c_1}{\partial t} = D_1 \left( \frac{\partial^2 c_1}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial c_1}{\partial r} \right)$
- 2) 质量守恒-液相  $\varepsilon_2 \frac{\partial c_2}{\partial t} = \nabla \cdot (D_2^{\text{eff}} \nabla c_2) + \frac{1-t_+^0}{F} j_{Li}$
- 3) 电荷守恒-固相  $\nabla \cdot (\sigma^{\text{eff}} \nabla \phi_1) = j_{Li}$
- 4) 电荷守恒-液相  $\nabla \cdot \left[ k^{\text{eff}} \left[ -\nabla \phi_2 + \frac{2RT}{F} \left( 1 + \frac{\partial \ln f}{\partial \ln c_2} \right) (1-t_+^0) \frac{\nabla c_2}{c_2} \right] \right] = j_{Li}$
- 5) 电极动力学  $j_{Li} = a_i j_0 \left[ \exp \left( \frac{\alpha_a F}{RT} \eta \right) - \exp \left( -\frac{\alpha_c F}{RT} \eta \right) \right]$

**热模型:**

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + Q$$

$$Q = Q_{re} + Q_{ohm} + Q_{act} + Q_{exch}$$

其中,  $Q$  是总的产热速率,  $Q_{re}$  为可逆热,  $Q_{ohm}$  为欧姆热,  $Q_{act}$  为极化热,  $Q_{exch}$  为热耗散率。

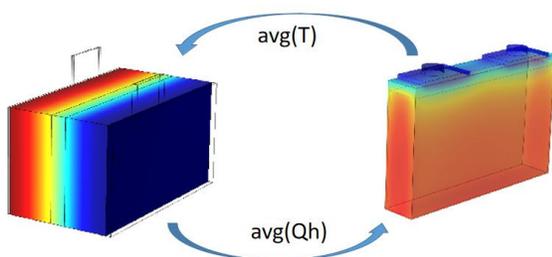


图 2. 平均耦合模型耦合示意图

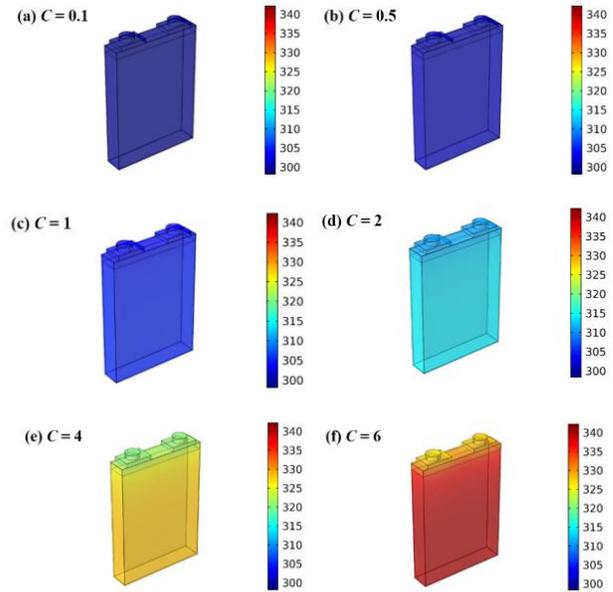


图 3. 不同放电速率下电池放电结束时的温度分布

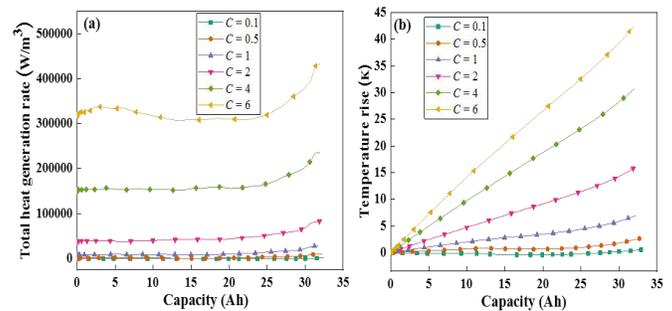


图 4. 放电速率对热特性的影响 (a) 总发热量; (b) 电池温度

**结论:** 随着放电速率的增加, 电化学反应开始以较高的速率发生, 正极和负极活性材料不能均匀利用, 导致电池内部高度极化。在这种作用下, 更多的热量在电极间累积, 从而导致电池温度升高。可知若电池长期在高放电速率下工作的话, 其性能会降低。因此, 需要增加散热装置来提高电池性能。

**参考文献:**

1. Doyle M, Fuller T F, Newman J. Modeling of Galvanostatic Charge and Discharge of the Lithium/Polymer/Insertion Cell[J]. Journal of The Electrochemical Society, 1993, 140(6): 1526-1533.
2. Ji Y, Zhang Y, Wang C-Y. Li-Ion Cell Operation at Low Temperatures[J]. Journal of The Electrochemical Society, 2013, 160(4): A636-A649.
3. Zhao R, Liu J, Gu J. The effects of electrode thickness on the electrochemical and thermal characteristics of lithium ion battery[J]. Applied Energy, Elsevier Ltd, 2015, 139: 220-229.