

梅文昕¹, 徐文军², 王青松^{1*}, 孙金华¹

1. 中国科学技术大学, 火灾科学国家重点实验, 安徽, 合肥
2. 中国科学技术大学, 热科学与能源工程系, 安徽, 合肥
作者联系: 梅文昕 (heart@mail.ustc.edu.cn)

1. 简介

目前人们都追求高能量密度和功率密度的锂离子电池, 然而二者之间存在矛盾, 一般来说能量密度越高, 其功率密度越低。例如对电动汽车来说, 能量密度决定了单次最大行驶里程, 而功率密度决定了最大行驶速度。因此如何才能既保证“跑得快”, 又能够“跑得远”?

正负电极作为锂离子电池最重要的部分, 其设计直接影响到电池的容量、能量密度和功率密度。本文设计了一种**多参数多目标**的锂离子电池电极厚度优化方法, 借助COMSOL Multiphysics平台, 对18.5Ah的NCM/C电池建立电化学-热耦合模型, 通过两种优化算法比较得出最优的正负电极厚度。

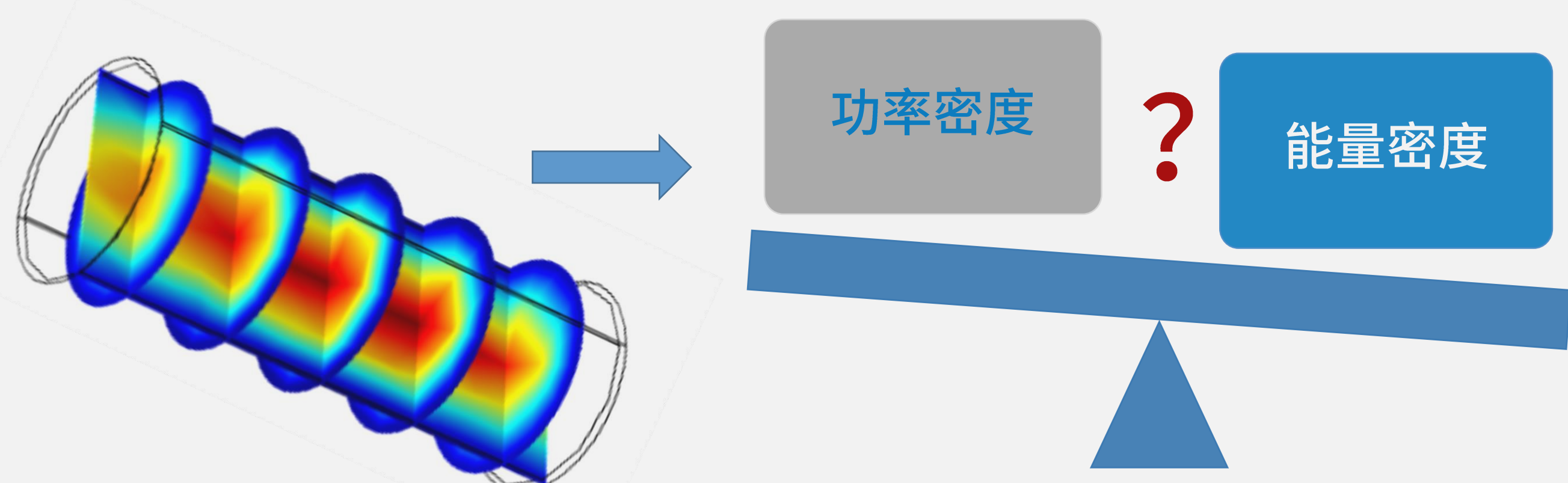


图 1. 能量密度与功率密度的矛盾

3. 电极厚度的影响

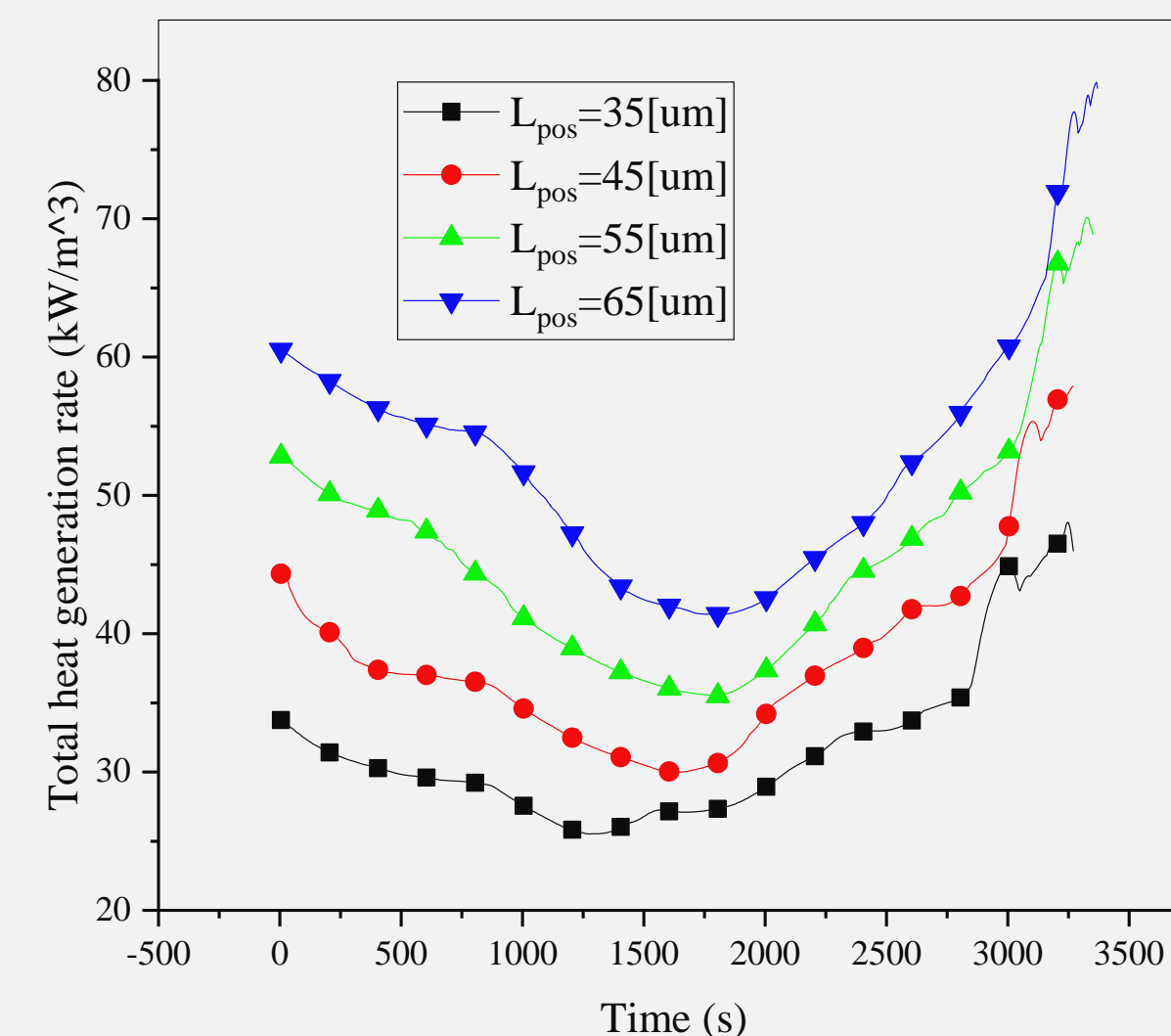


图 3. 不同正极厚度的产热曲线

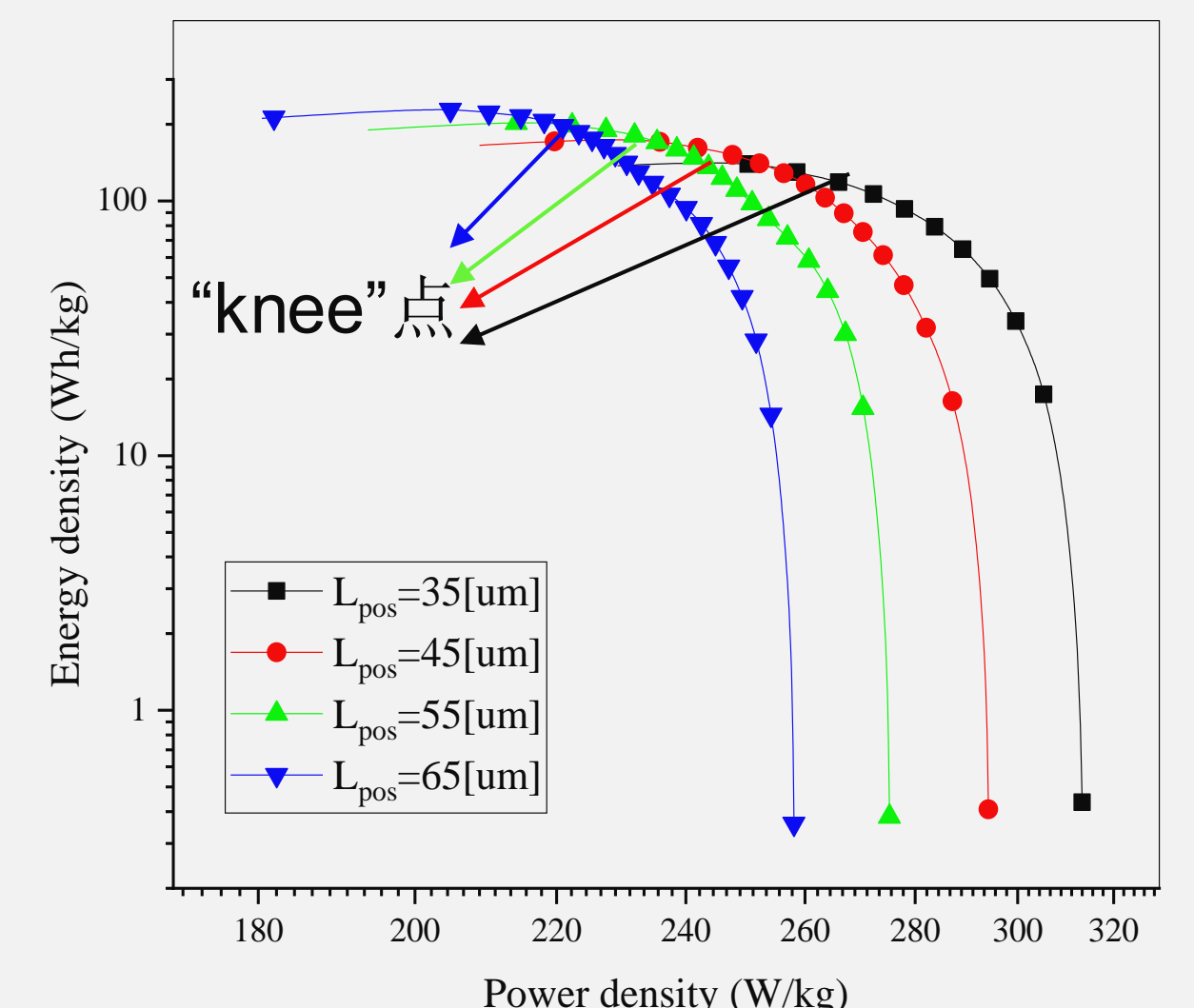


图 4. Ragone Plot (双对数坐标)

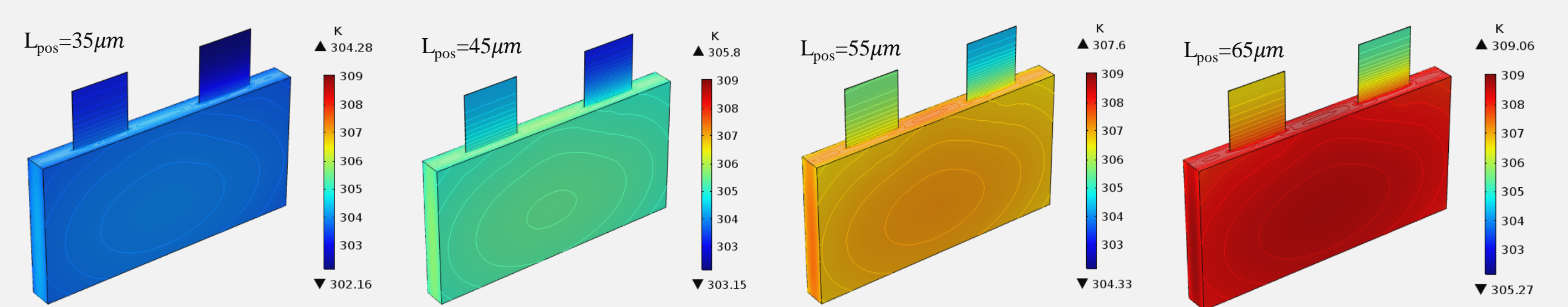


图 5. 不同电极厚度的电池1C放电结束时的温度分布

- ◆ 采用四种不同的正极厚度(35 μm、45 μm、55 μm、65 μm), 维持负极厚度不变, 研究了不同电极厚度对电池的温度以及能量密度和功率密度的影响
- ◆ 随着电极厚度的增大, 电池的容量增大, 能量密度增大而功率密度减小; 并且电池的温度升高, 产热速率增大。
- ◆ “knee”点--能量密度降低的转折点

2. 模型建立及优化机制

模型为1D电化学模型与3D热模型的耦合模型, 模型耦合示意图见图1

◆ 目标函数

$$\text{能量密度 } E = \frac{\int_0^t IV dt}{M} = \frac{I \int_0^t V dt}{M} \quad \text{功率密度 } P = \frac{\int_0^t IV dt}{Mt} = \frac{I \int_0^t V dt}{Mt}$$

$$M = (L_{pcc} \rho_{pcc} + L_{ncc} \rho_{ncc} + L_p \varepsilon_{ps} \rho_p + L_p \varepsilon_{pl} \rho_l + L_n \varepsilon_{ns} \rho_n + L_n \varepsilon_{nl} \rho_l + L_s \varepsilon_s \rho_s + L_s \rho_s) \times A_{\text{batt}}$$

质量包含 (集流体, 隔膜, 正负极材料, 电解液)

◆ 约束条件

① 负极容量略大于正极, 以避免锂枝晶的产生。根据电池设计经验, 电池NP比 (负极容量与正极容量之比) 设置为1.1

② 电池最佳工作温度为298K-313K

$$NP \text{ ratio} = \frac{L_n C_{s, \max, n} \varepsilon_{ns}}{L_p C_{s, \max, p} \varepsilon_{ps}}$$

◆ 参数设置

① 负极厚度: 初始值65 μm (实验测量), 优化范围[30,100]

② 正极厚度: 初始值55 μm (实验测量), 优化范围[30,80]

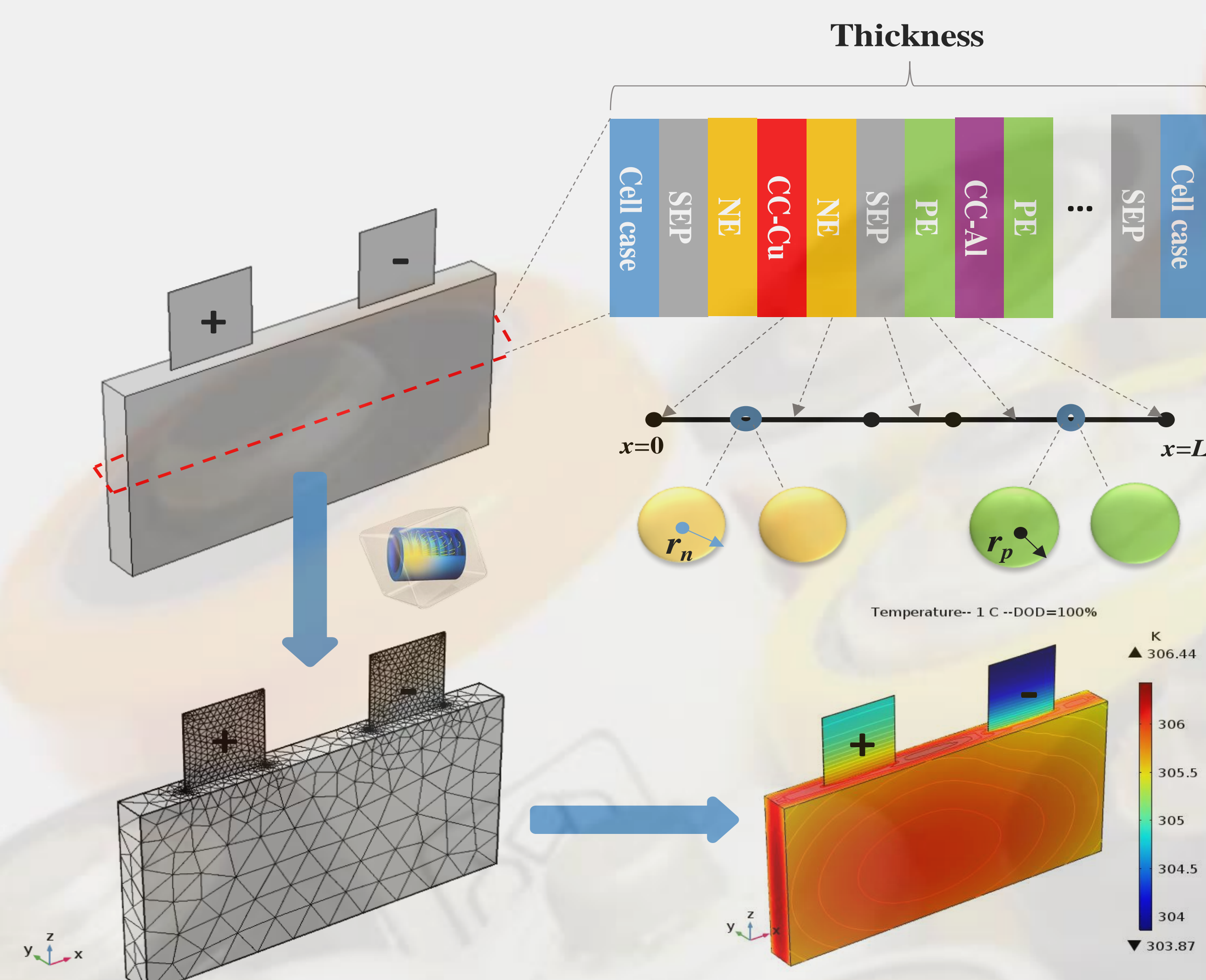


图 2. 电化学-热耦合模型示意图

4. 电极厚度的优化

优化方法	目标函数	正极厚度 (μm)	负极厚度 (μm)	能量密度 (Wh/kg)	功率密度 (W/kg)	能量密度×功率密度 (W ² h/kg ²)
初始值	-	55	65	239.71	244.46	58601
N-M	能量密度	56.15	65.933	243.24	241.11	-
N-M	乘积	39.855	34.863	205.37	330.06	67784
COBYLA	能量密度	56.511	66.441	242.57	241.19	-
COBYLA	😊 乘积	55.335	63.188	244.37	247.11	60387

- ◆ 多参数多目标的优化, 同时对正极厚度和负极厚度进行优化, 同时得到能量密度和功率密度最大值
- ◆ 采用了COBYLA和N-M两种优化算法进行比较

5. 结论

- ◆ 电极厚度增大, 容量增大, 相应的1C放电电流增大, 极化增大, 能量密度增大的同时功率密度减小;
- ◆ COBYLA优化算法适用于电极厚度的优化。优化后的电极厚度使能量密度和功率密度分别提升1.59% and 1.08%。

6. 参考文献

1. Wenxin Mei, Qingsong Wang*. The Effect of Electrode Design Parameters on Battery Performance and Optimization of Electrode Thickness Based on the Electrochemical-Thermal Coupling Model. *Sustainable Energy & Fuels* 3 (2019): 148-165.