



# VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

## FAKULTA ELEKTROTECHNIKY A KOMUNIKAČNÍCH TECHNOLOGIÍ

FACULTY OF ELECTRICAL ENGINEERING AND COMMUNICATION

## ÚSTAV ELEKTROTECHNOLOGIE

DEPARTMENT OF ELECTRICAL AND ELECTRONIC TECHNOLOGY

## NUMERICKÝ MODEL TEPLOTNÍHO POLE LI-ION AKUMULÁTORU PŘI VYBÍJENÍ

NUMERICAL MODEL OF LI-ION BATTERY TEMPERATURE FIELD BY DISCHARGING

### DIPLOMOVÁ PRÁCE

MASTER'S THESIS

### AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Bc. Jakub Novotný

### VEDOUCÍ PRÁCE

SUPERVISOR

Ing. Petr Vyroubal, Ph.D.

BRNO 2017



# Diplomová práce

magisterský navazující studijní obor **Elektrotechnická výroba a materiálové inženýrství**

Ústav elektrotechnologie

**Student:** Bc. Jakub Novotný

**ID:** 142966

**Ročník:** 2

**Akademický rok:** 2016/17

## NÁZEV TÉMATU:

**Numerický model teplotního pole Li-Ion akumulátoru při vybíjení**

## POKYNY PRO VYPRACOVÁNÍ:

Nastudujte možnosti modelování lithium iontových baterií metodou MSMD v programu ANSYS Fluent. Proměřte potřebné charakteristiky akumulátoru a pomocí termokamery proměřte teplotní pole vzniklé vybíjením. Výsledky porovnejte s numerickým modelem.

## DOPORUČENÁ LITERATURA:

Podle pokynů vedoucího semestrálního projektu.

**Termín zadání:** 6.2.2017

**Termín odevzdání:** 25.5.2017

**Vedoucí práce:** Ing. Petr Vyroubal, Ph.D.

**Konzultant:**

**doc. Ing. Petr Bača, Ph.D.**  
*předseda oborové rady*

## UPOZORNĚNÍ:

Autor diplomové práce nesmí při vytváření diplomové práce porušit autorská práva třetích osob, zejména nesmí zasahovat nedovoleným způsobem do cizích autorských práv osobnostních a musí si být plně vědom následků porušení ustanovení § 11 a následujících autorského zákona č. 121/2000 Sb., včetně možných trestněprávních důsledků vyplývajících z ustanovení části druhé, hlavy VI. díl 4 Trestního zákoníku č.40/2009 Sb.

## **ABSTRAKT**

Tato práce je zaměřena na lithium-iontové akumulátory obecně a na jejich možnosti modelování v systému ANSYS Fluent. V práci jsou popsány jednotlivé výhody a nevýhody lithium-iontových akumulátorů. Dále jsou zde popsány jednotlivé modely a submodely, které nabízí program ANSYS Fluent. Nezbytnou součástí práce je modelování reálné baterie a porovnání jednotlivých výsledků mezi reálnou baterií a simulací samotnou. V poslední řadě je provedena simulace průrazu baterie.

## **KLÍČOVÁ SLOVA**

Lithium-iontový akumulátor, MSMD Metoda, ANSYS Fluent, NTGK Model.

## **ABSTRACT**

This work is focused on lithium-ion batteries in general and their modeling capabilities in ANSYS Fluent. The various advantages and disadvantages of li-ion batteries are describes in my work. There are also described the various models and submodels offered by ANSYS Fluent. An essential part of the work is to model the real battery and compare the results between the real battery and the simulation itself. Finally, simulation of battery breakdown is performed.

## **KEYWORDS**

Li-ion battery, MSMD approach, ANSYS Fluent, NTGK Model.

NOVOTNÝ, J. *Numerický model teplotního pole Li-Ion akumulátoru při vybíjení.*  
Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta elektrotechniky a komunikačních  
technologií. Ústav elektrotechnologie, 2017. 78 s., 0 s. příloh. Diplomové práce.  
Vedoucí diplomové práce: Ing. Petr Vyroubal, Ph.D.

## PROHLÁŠENÍ

Prohlašuji, že svou diplomovou práci na téma Numerický model teplotního pole Li-Ion akumulátoru při vybíjení jsem vypracoval samostatně pod vedením vedoucího diplomové práce a s použitím odborné literatury a dalších informačních zdrojů, které jsou všechny citovány v práci a uvedeny v seznamu literatury na konci práce.

Jako autor uvedené diplomové práce dále prohlašuji, že v souvislosti s vytvořením této diplomové práce jsem neporušil autorská práva třetích osob, zejména jsem nezasáhl nedovoleným způsobem do cizích autorských práv osobnostních a/nebo majetkových a jsem si plně vědom následků porušení ustanovení § 11 a následujících zákona č. 121/2000 Sb., o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon), ve znění pozdějších předpisů, včetně možných trestněprávních důsledků vyplývajících z ustanovení části druhé, hlavy VI. díl 4 Trestního zákoníku č. 40/2009 Sb.

V Brně dne .....

.....

(podpis autora)

## **PODĚKOVÁNÍ**

Děkuji vedoucímu diplomové práce Ing. Petru Vyroubalovi, Ph.D. za účinnou metodickou, pedagogickou a odbornou pomoc a další cenné rady při zpracování mé diplomové práce.

V Brně dne .....

.....

(podpis            autora)

# OBSAH

<b>Úvod</b>	<b>6</b>
<b>1 Lithium iontové akumulátory</b>	<b>7</b>
1.1 Historie akumulátorů .....	7
1.2 Výhody Li - iontových akumulátorů .....	8
1.3 Nevýhody Li - iontových akumulátorů.....	9
1.4 Složení Li - ion akumulátoru .....	9
1.4.1 Kladná elektroda .....	10
1.4.2 Záporná elektroda .....	10
1.4.3 Separátor .....	10
1.4.4 Elektrolyt .....	11
1.5 Katodové materiály .....	11
1.6 Anodové materiály.....	12
1.7 Chemické reakce Li - ion baterie při nabíjení a vybíjení.....	12
1.8 Nabíjecí a vybíjecí charakteristiky Li - ion baterie.....	13
1.9 Bezpečnost lithium iontových akumulátorů .....	14
<b>2 Numerické modelování lithium iontových baterií</b>	<b>15</b>
2.1 Úrovně numerického modelování Li-Ion baterií .....	15
2.2 Druhy modelů .....	16
2.3 Jedno potenciálový empirický model .....	17
2.3.1 Výpočet elektrického potenciálu a proudové hustoty.....	17
2.4 Dvou potenciálový MSMD model.....	18
2.4.1 Limitace modelů .....	18
2.4.2 MSMD Metoda .....	19
2.4.3 ECM Model .....	20
2.4.4 NTGK Model.....	21
2.4.5 Newmanův P2D Model .....	22
2.5 Vazba mezi CFD a dílčími modely.....	22
2.6 Baterie obecně.....	23
2.7 Propojení baterií.....	23
2.8 Simulace článku baterie za použití MSMD modelu .....	23

2.8.1	Výpočet celkových parametrů .....	25
2.9	Computation fluid dynamics (CFD) .....	26
2.9.1	Navier - Stokesova rovnice .....	27
2.9.2	Rovnice kontinuity .....	27
2.10	Metoda konečných objemů (MKO) .....	28
<b>3</b>	<b>Praktická část</b> .....	<b>29</b>
3.1	Experimentální měření .....	29
3.2	Rozebrání baterie .....	30
3.3	Složení akumulátoru .....	32
3.3.1	Hliník .....	32
3.3.2	Měď .....	33
3.3.3	Polyethylen (PE) .....	33
3.3.4	Elektrolyt .....	34
3.4	Geometrie modelu baterie .....	34
3.4.1	Rozměry geometrie .....	35
3.4.2	Označení částí baterie .....	36
3.5	Vytvoření výpočetní sítě na geometrii .....	36
3.6	Schéma propojení v Ansysu .....	37
3.7	Solid 186 .....	37
3.8	Solid 187 .....	38
3.9	Solid 117 .....	39
3.10	Vyvolání MSMD metody .....	39
3.11	Výpočet parametrů baterie .....	40
3.12	Počáteční podmínky simulace .....	40
3.12.1	Přidělení elektrických kontaktů .....	42
3.12.2	Přidělení vodivých zón .....	43
3.12.3	Nastavení teplotních podmínek .....	43
3.13	Porovnání odsimulovaných a naměřených výsledků .....	44
3.14	Nail test .....	52
3.14.1	Adaptivní metoda síťování .....	53
3.15	Metoda konečných prvků (MKP) .....	59
3.15.1	Rovnice rovnováhy .....	60
3.15.2	Rovnice geometrické .....	61



3.15.3 Konstitutivní vztahy.....	61
3.16 Výpočet tepelné roztažnosti a Youngova modulu .....	62
3.16.1 Výpočet celkových parametrů .....	62
3.17 Schéma propojení .....	63
3.17.1 Geometrie a síť modelu .....	63
3.17.2 Simulace modelu baterie.....	63
<b>Závěr</b>	<b>67</b>
<b>Literatura</b>	<b>68</b>
<b>Seznam symbolů, veličin a zkratk</b>	<b>71</b>
<b>Seznam obrázků</b>	<b>72</b>
<b>Seznam tabulek</b>	<b>75</b>
<b>Seznam příloh</b>	<b>76</b>

# ÚVOD

Lithium iontové akumulátory nás provází už od poloviny šedesátých let minulého století, kdy byly vyrobeny první verze. Ačkoliv na začátku vývoje byly vyrobitelné pouze v nedobíjitelné verzi, tak v dnešní době jsou již řadu let na trhu i ve formě dobíjitelné. Díky svým výborným parametrům jsou využívány v různých oblastech techniky, ať už se jedná o různá zařízení, jako jsou mobilní telefony, tablety a notebooky. V současné době se, jako alternativní zdroj energie, začínají uplatňovat čím dál tím více lithium-iontové baterie v automobilovém průmyslu pro napájení elektrických automobilů a motorek.

Lithium iontové akumulátory už řadu let dominují na trhu a jejich využití je čím dál větší. S každým přibývajícím rokem můžeme sledovat, jak se výrobci Li-ion baterií předhánějí a nabízejí baterie s vyšší kapacitou, delší životností, nižší hmotností, ale hlavně také nižší cenou.

Nezbytnou součástí lithium iontových akumulátorů je také bezpečnost, na kterou je v současné době kladen velký důraz. V důsledku zmenšování velikosti a zvyšování kapacity dochází k nežádoucímu zahřívání, které může mít za následek zničení baterie, a tím pádem může dojít k ohrožení, zranění nebo i dokonce úmrtí lidí. Typickým příkladem jsou právě zmiňované elektromobily, které mají stovky těchto zabudovaných baterií. Z důvodu bezpečnosti se vědci pokouší potlačovat negativní jevy, ale i najít bezpečnější materiály a metody výroby.

S příchodem přísnějších podmínek pro životní prostředí a různých norem se v poslední době hodně hovoří o snížení počtu aut se spalovacím motorem zejména v Německu a Číně. Pokud by se měli spalovací motory opravdu omezit, ba měli dokonce i zmizet z trhu, přispělo by to zejména k větší produkci elektromobilů a tím pádem k většímu využití lithium iontových akumulátorů, které dnes ovládají trh.

# 1 LITHIUM IONTOVÉ AKUMULÁTORY

V této kapitole jsou rozebrány Li - iontové akumulátory z hlediska historie, jsou zde popsány jednotlivé výhody, nevýhody a složení včetně rozebrání jednotlivých složek akumulátoru. Nakonec jsou zmíněny chemické reakce a zobrazeny charakteristiky nabíjení a vybíjení.

## 1.1 Historie akumulátorů

V polovině šedesátých let minulého století byly vynalezeny první primární lithiové články, které se již od začátku vyznačovaly vysokou měrnou kapacitou a energií, velice nízkým samovybíjením a mnoha dalšími příznivými vlastnostmi. Ačkoliv byly na počátku vyrobitelné pouze v nedobíjitelné verzi, tak se brzy ukázalo, že je možné tyto články vyrobit i ve verzi dobíjitelné. [1]

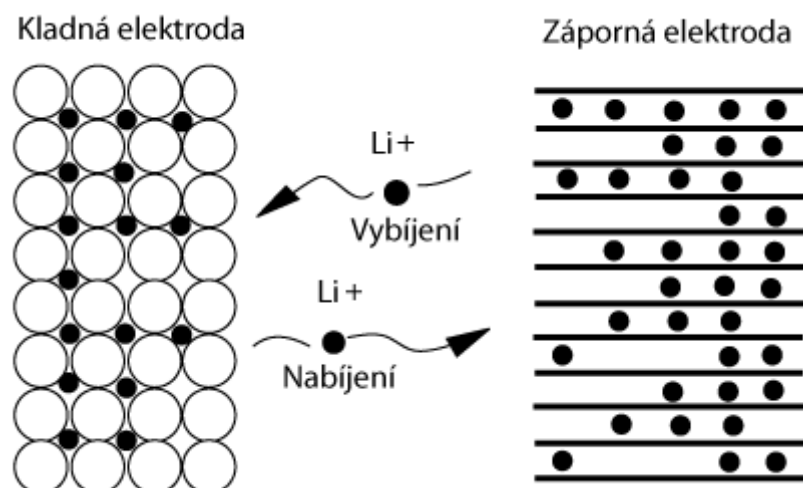
První pokusy začaly zhruba v polovině sedmdesátých let, kde na kladnou elektrodu byly použity sulfidy kovů a na zápornou elektrodu kovové lithium. Jelikož však docházelo k pasivaci elektrod a korozi, byly výsledky neuspokojivé. [1]

Pasivace elektrod je chemický jev, při kterém se po určitém časovém úseku, kdy dochází ke kontaktu kovových elektrod s elektrolytem nebo jeho rozpouštědlem, vytvoří na jejich povrchu kompaktní vrstva sloučenin. Tato vrstva pak zabraňuje, aby ionty elektrolytu mohli přistupovat k povrchu elektrody. [2]

Mezi další problém patří to, že lithium má snahu vytvářet jehličky při nabíjení malým proudem. Tyto jehličky pak perforují separátor a dochází tím k vnitřním zkratům akumulátoru. Lithium také při nabíjení tvořilo vysoce reaktivní houbovitou hmotu, což mělo za následek teplotní pochody, které nebylo možné předvídat. [1]

Počátkem osmdesátých let přicházejí pokusy s články, kde se využívá sloučenin  $\text{LiWO}_2$ ,  $\text{Li}_6\text{Fe}_2\text{O}_3$  nebo  $\text{Li}_9\text{MoSe}_6$  jako zdroj lithiových iontů  $\text{Li}^+$  na záporné elektrodě. Naopak na kladné elektrodě se používají sloučeniny niobu, wolframu, vanadia, wolframu či molybdenu. Uspokojivé výsledky však nepřichází ani v tomto případě, protože články mají nízkou kapacitu, nízké napětí (1,8 V, 2,7 V), energeticky náročnou, drahou nebo také komplikovanou výrobu. [1]

Největší pokrok přichází od zástupců firmy Sony v roce 1990, kdy představují novou technologii, která využívá na záporné elektrodě jako aktivní materiál směs grafitu obohaceného lithiem a polyolefinů. [3]



Obrázek 1: Pohyb iontů  $\text{Li}^+$  při nabíjení a vybíjení (převzato z [1]).

Na obrázku 1 je zachycen pohyb iontů  $\text{Li}^+$ , které při nabíjení cestují z kladné elektrody na zápornou a při vybíjení ze záporné elektrody na kladnou. Od toho vznikl název Li-ion akumulátoru. Tento název zavedl výkonný ředitel firmy Sony Energytec pan K. Tozawa. [1]

Mimo Li-ion akumulátorů je možné se taky setkat s označením jako je lithiový akumulátor, akumulátor Li nebo akumulátor Lithium-polymer (Li-Pol.). [1]

První komerčně dostupná aplikace s Li-ion technologií se objevuje již v lednu roku 1991, kdy firma Sony přichází na trh s mobilním telefonem s názvem „Handyphone HP-211“, což přináší firmě okamžitý úspěch. Li-iontový akumulátor je použit o rok později v září i u videokamer Sony. [3]

Největší produkcí Li-iontových akumulátorů je Japonsko, které přišlo na trh s vlastními verzemi válcových a prizmatických akumulátorů. Zhruba 98 % světové produkce se vyrobí právě v této zemi. [1]

## 1.2 Výhody Li - iontových akumulátorů

- Vysoká energie – Li-ion 4/3AF – až 12330 mWh (3425 mAh/3,6 V), NiCd 4/3AF – 2400 mWh (2000 mAh/1,2 V), NiMH 4/3AF – 5400 mWh (4500 mAh/1,2 V).
- Vysoké jmenovité napětí - typicky 3,6 V (je možné se setkat i se jmenovitým napětím 3,2 V, 3,0 V, 2,0 V, 1,5 V).
- Dlouhá životnost - zhruba 500 až 1500 cyklů.

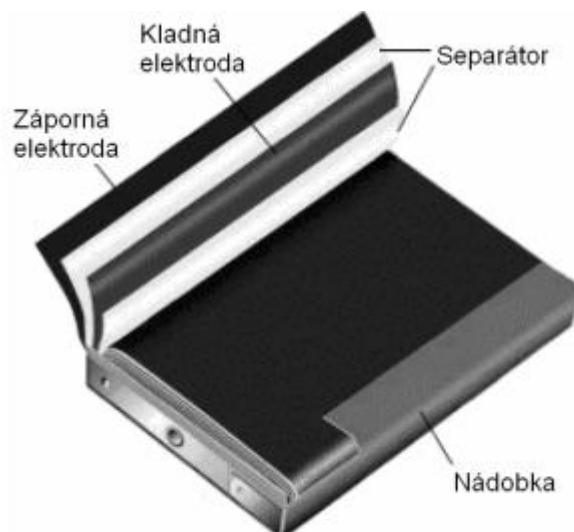
- Nízká hmotnost – Li-ion 4/3AF – 40 g, NiCd 4/3AF – 45 g, NiMH 4/3AF – 60 g.
- Nízké samovybíjení – zhruba 8 % za měsíc při +20 °C (u NiCd a NiMH akumulátorů je to cca 25 % za měsíc).
- Nemají tzv. paměťový efekt.
- Nejsou závadné pro životní prostředí (neobsahují kadmium, rtuť ani olovo).
- Dobrá bezpečnost při pozemní a námořní dopravě (problémy s leteckou dopravou).
- Díky změně napětí, které je v průběhu vybíjení větší než u NiCd nebo NiMH akumulátorů, lze lépe stanovit zbytkovou kapacitu akumulátoru. [4]

### 1.3 Nevýhody Li - iontových akumulátorů

- Nabíjecí proud omezen na 1,5 It. Akumulátor je konstantním napětím plně nabit do 3 hodin, nicméně je možné nabít Li-ion akumulátor během jedné hodiny i na 80 až 85 %. (Akumulátor NiCd je možné nabýt i za 15 minut).
- Vybíjecí proud maximálně do 2 It, ale existují i speciální lithiové akumulátory, kde je vybíjecí proud několikrát větší. (U akumulátoru NiCD je vybíjecí proud do 20 It).
- Pracovní teplota Li-ion akumulátorů většinou do -20 °C. (Akumulátory NiCd až 40 °C).
- Oproti NiCd nebo NiMH mají Li-ion akumulátory velký vnitřní odpor - 10x větší. U speciálních lithiových akumulátorů je vnitřní odpor malý. Jedná se však o akumulátory, které mají vybíjecí proud 15 až 30 It.
- Li-ion akumulátory musí obsahovat řídicí elektrický obvod, protože jsou náchylné na přebíjení a podvybíjení. Pokud při vybíjení nastane, že napětí klesne pod povolenou mez, dochází ke zničení akumulátoru.
- Vysoká prodejní cena - ceny však rok od roku klesají. [4]

### 1.4 Složení Li - ion akumulátoru

Z čeho se skládá takový Lithium - Iontový akumulátor nám ukazuje obrázek níže.



Obrázek 2: Složení Li-ion akumulátoru (převzato z [5]).

### 1.4.1 Kladná elektroda

Kladná elektroda (Katoda) je tvořena lithiem kovovými oxidy (jako jsou  $\text{LiCoO}_2$ ,  $\text{LiMn}_2\text{O}_2$ ,  $\text{LiMn}_2\text{O}_4$ , nebo  $\text{LiNiO}_2$ ), oxidy vanadu, olivínu a dobíjecími oxidy lithia. Nejvíce studovanými materiály Li - ion baterií jsou vrstvené oxidy, které obsahují kobalt a nikl. Ty vykazují vysokou stabilitu v rozsahu vysokého napětí. Bohužel kobalt má omezenou dostupnost v přírodě a je toxický. Oxidy vanadu mají velkou kapacitu a vynikající kinetiku. Olivíny jsou netoxické, ale mají nízkou vodivost. Proto se kombinují různé směsi kobaltu, niklu a manganu, aby vznikly co nejlepší vlastnosti a minimalizovaly se nevýhody. [6]

### 1.4.2 Záporná elektroda

Záporná elektroda (Anoda) je tvořena materiály, jako je například lithiem, grafit (uhlík), křemík, či dalšími jinými intermetalickými materiály. Lithium je velmi reaktivní prvek, který dosahuje vysokého záporného napětí, ale problémem je, že za přítomnosti vzduchu hoří. Křemík má zase extrémně vysokou kapacitu (4,199 mAh/g). Dnes se převážně využívají uhlíkaté anody, protože mají dobrou dostupnost a nízkou cenu. [6]

### 1.4.3 Separátor

Separátor je akumulátorová přepážka, která odděluje obě elektrody od sebe, čímž se zabráňuje zkratu. V případě kapalného elektrolytu se používá pěnový materiál jako separátor, který se ponoří do elektrolytu a drží jej na místě. Je potřeba,

aby separátor byl elektrický izolant, zároveň měl minimální odpor elektrolytu, maximální mechanickou stabilitu a chemickou odolnost vůči degradaci ve vysoce elektrochemicky aktivním prostředí. [6]

#### 1.4.4 Elektrolyt

Elektrolytem je nejčastěji lithná sůl (LiPF<sub>6</sub>, LiBF<sub>4</sub>, LiClO<sub>4</sub>) nebo organické rozpouštědlo (ether, různé směsi etylen-, propylen-, dimethyl- nebo diethyl-karbonát apod.). Elektrolyt musí být vodivý pro lithiové ionty, které při vybíjení a nabíjení putují mezi anodou a katodou. [5]

### 1.5 Katodové materiály

#### **LiNi<sub>0,33</sub>Mn<sub>0,33</sub>Co<sub>0,33</sub>O<sub>2</sub>**

Tento materiál již spadá do druhé generace katodových materiálů, které mají vrstvenou strukturou, stejně jako LiCoO<sub>2</sub>. LiNi<sub>0,33</sub>Mn<sub>0,33</sub>Co<sub>0,33</sub>O<sub>2</sub> můžeme považovat za pevný roztok LiMnO<sub>2</sub>, LiNO<sub>2</sub> a LiCoO<sub>2</sub>. Tento materiál nahrazuje v dnešní době katodové materiály, jako jsou LiCoO<sub>2</sub> nebo LiMn<sub>2</sub>O<sub>4</sub>. Teoretická kapacita materiálu LiNi<sub>0,33</sub>Mn<sub>0,33</sub>Co<sub>0,33</sub>O<sub>2</sub> je zhruba 280 mAh/g, nicméně dosažitelná kapacita se pohybuje v rozmezí od 160 mAh/g do 200 mAh/g. Mezi hlavní výhody tohoto materiálu patří velmi vysoká kapacita a vysoký potenciál vůči lithiu. Obě tyto výhody zajišťují materiálu vysokou gravimetrickou hustotu energie, která se pohybuje kolem 630 Wh/kg. Jako další výhody můžeme zmínit vysokou teplotní stabilitu nebo malou reakci s elektrolyty. Naopak mezi hlavní nevýhody patří jednoznačně cena materiálů, omezenost zdrojů a proces výroby, který způsobuje vyšší náklady při výrobě tohoto materiálu. [27]

#### **LiCoO<sub>2</sub>**

Tento materiál patří mezi nejpoužívanější katodové materiály, které se používají pro výrobu lithium iontových akumulátorů. Stejně jako LiNi<sub>0,33</sub>Mn<sub>0,33</sub>Co<sub>0,33</sub>O<sub>2</sub> se tento materiál vyznačuje vrstvenou strukturou. Teoretická kapacita tohoto materiálu je zhruba 274 mAh/g, nicméně dosažitelná je zhruba 140 mAh/g. Gravimetrická hustota energie je u LiCoO<sub>2</sub> zhruba 550 Wh/kg. Nevýhodou tohoto materiálu je použití kobaltu, který patří mezi poměrně drahé materiály. Z tohoto důvodu je použit hlavně v menších akumulátorech. Mezi další nevýhody patří teplotní nestabilita, kdy při překročení teploty nad 180 °C dochází k uvolňování kyslíku ze struktury. Tento materiál navíc nesmí být vybíjen a nabíjen větším proudem než je 1 C, protože při použití většího proudu dochází k nadměrnému zahřívání. [27]

## LiMn<sub>2</sub>O<sub>4</sub>

Na základě výzkumu v devadesátých letech minulého století bylo zjištěno, že se tento materiál vyznačuje strukturou stechiometrického spinelu a má kubickou krystalografickou soustavu. Teoretická kapacita je zhruba 148 mAh/g, nicméně dosažitelná kapacita je okolo 110 až 120 mAh/g. Mezi hlavní výhodu materiálu LiMn<sub>2</sub>O<sub>4</sub> patří nízká cena, která je způsobena dostupností materiálů pro jeho výrobu. Jako další výhody můžeme zmínit schopnost snášet vysoké zatížení, vysoký potenciál a poměrně vysokou teplotní stabilitu. Výhodou tohoto materiálu je také trojrozměrná spinelová vnitřní struktura, která mezi elektrodami zlepšuje přesun iontů, a tím je docíleno menšího vnitřního odporu a zatížitelnosti. Mezi nevýhody patří nižší kapacita a zvětšování objemu v důsledku změny struktury. Gravimetrická hustota energie je zhruba 480 Wh/kg. [27]

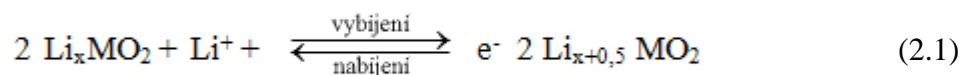
## 1.6 Anodové materiály

### Grafit

Mezi hlavní používaný anodový materiál můžeme zařadit uhlík, který tvoří amorfni i krystalickou formu. Grafit má velmi vysoký bod tání, zhruba kolem 3500 °C a je do určité míry chemicky stálý. Většina dnes běžně používaných lithium-iontových akumulátorů používá právě grafit jako aktivní elektrodovou hmotu. Grafit můžeme rozdělit na dva typy, a to na přírodní a syntetický. Každý typ má pak specifické vlastnosti, které se vhodně používají při konkrétní aplikaci. Běžný syntetický grafit nemá požadované vlastnosti, aby mohl být použit v lithium-iontových akumulátorech. Při zpracování přírodního grafitu lze vyprodukovat vysoce krystalizovaný přírodní grafit, který má velmi dobrou elektrickou a tepelnou vodivost. Teoretická kapacita grafitu je zhruba 372 mAh/g. Přírodní grafit můžeme rozdělit do tří základních typů, jedná se o vločkový grafit, žilní grafit a v poslední řadě mikrokrytalický (amorfni) grafit. [28]

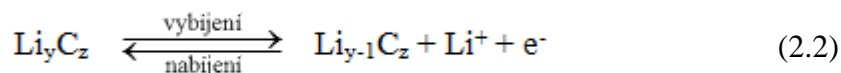
## 1.7 Chemické reakce Li - ion baterie při nabíjení a vybíjení

Elektrochemické procesy, které probíhají při nabíjení a vybíjení můžeme vyjádřit pomocí následujících rovnic zobrazených na obrázku (viz rovnice 2.1 a 2.2).



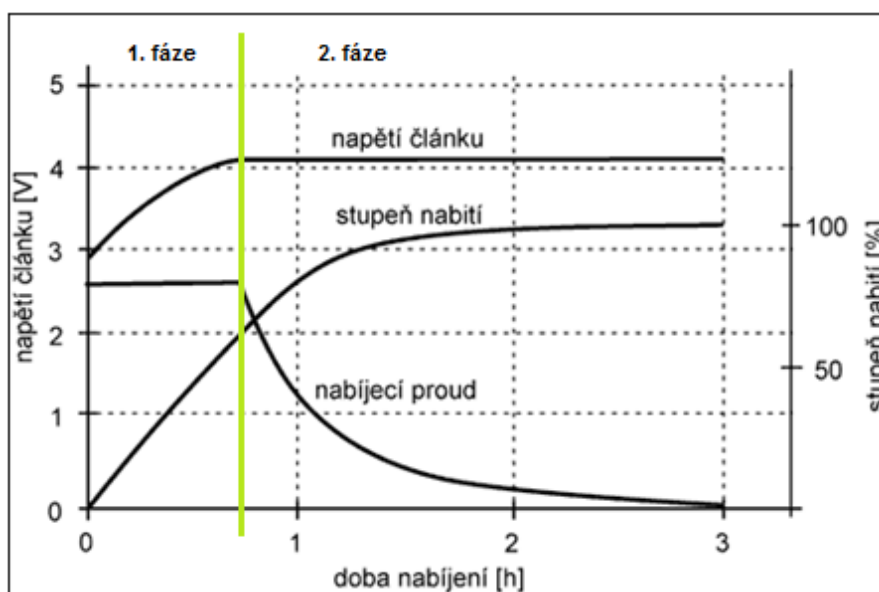


Při chemickém procesu se v článku přemísťují ionty lithia. Lithiové ionty směřují během nabíjení od kladné elektrody směrem k záporné, kde se ukládají v uhlíkové struktuře do volných míst. Během vybíjení se pak tento proces opakuje, ale probíhá opačně. [5]



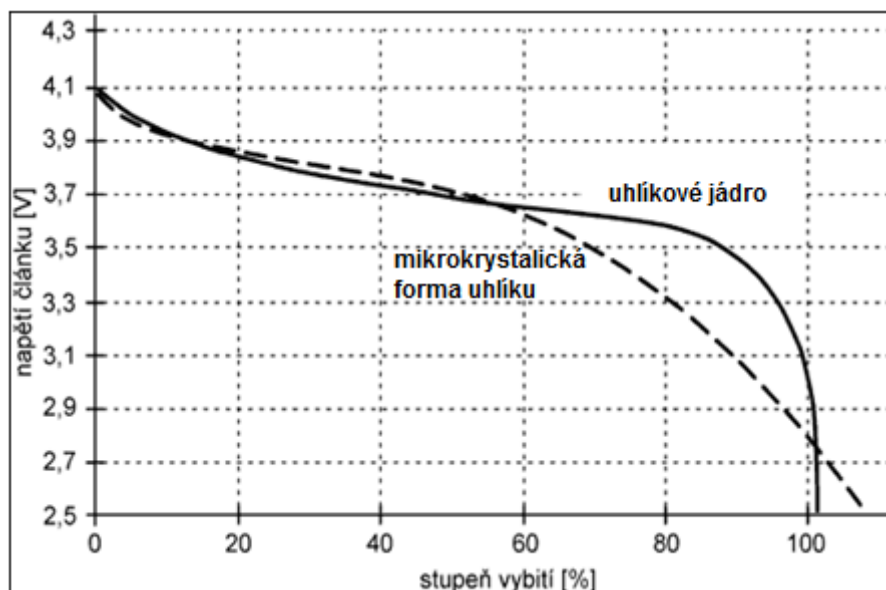
## 1.8 Nabíjecí a vybíjecí charakteristiky Li - ion baterie

Následující obrázek (viz obr. 3) ukazuje, jak vypadá nabíjecí charakteristika Li-on baterie. Charakteristika je rozdělena do dvou fází. V první fázi se akumulátor nabíjí konstantním proudem velmi rychle, až do doby, dokud není dosaženo konečné nabíjecí napětí (4,2 V). V tomto okamžiku je akumulátor nabit přibližně na 70 až 80 % a následuje fáze 2, ve které se akumulátor nabíjí konstantním napětím a nabíjecí proud pomalu klesá až k nule. Pokud nabíjecí proud klesne až na hodnotu 0,05 It, tak je akumulátor plně nabit. Jelikož nabíjecí proud postupně klesá, není třeba nabíjení akumulátoru nijak hlídat. [8]



Obrázek 3: Nabíjení Li - ion baterie (převzato z [8]).

Na dalším obrázku (viz obr. 4) je znázorněna vybíjecí charakteristika Li-ion baterie. Z obrázku je patrné, že se napětí na akumulátoru během vybíjení moc nemění. V okamžiku, kdy je stupeň vybití zhruba 80%, začíná napětí akumulátoru rychle klesat.



Obrázek 4: Vybití Li - ion baterie (převzato z [8]).

## 1.9 Bezpečnost lithium iontových akumulátorů

V dnešní době je kladen velký důraz na bezpečnost lithium iontových baterií, které přinášejí řadu rizik. Každý lithium iontový článek obsahuje řadu látek, které mají různé vlastnosti a přinášejí riziko vznícení. Materiály pro kladné elektrody jsou látky, které obsahují velký podíl chemicky vázaného kyslíku a díky tomu velmi dobře podporují hoření. Co se týče materiálu pro záporné elektrody, tak ty jsou hořlavé a na vzduchu samozápalné. K hoření dobře přispívá i fakt, že elektrolyt je tvořený roztokem lithné soli v organické. Mimo tato rizika můžeme zmínit ještě další, jako je proudové zatížení, mechanické poškození, přehřátí nebo i proražení. Všechny tyto fakty sebou nesou riziko, že dojde ke vznícení baterie. Samotné hašení poté bývá problematické. [26]

Pro minimalizaci vzniku požárů se používají tři základní druhy ochrany. První z nich je dodržování předepsaných pracovních podmínek. To znamená, že by se měl dodržovat předepsaný způsob nabíjení, aby byly všechny články při sestavování baterie stejné apod. Nezbytnou součástí je také bezpečná manipulace s články a bateriemi. Druhou ochranou je tzv. aktivní ochrana, kdy jsou v baterii použity ochranné obvody. Většinou se používají alespoň dva elektronické obvody, přičemž jeden je řídicí a druhý slouží jako výkonový spínač. Ve výkonových bateriích obsahují články dokonce ochranné obvody, které hlídají teplotu článku a při překročení této teploty se daný článek odpojí. Jako poslední druh ochrany můžeme zmínit vhodný návrh geometrie. [26]


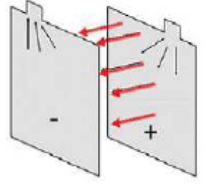

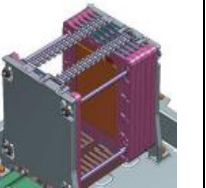

## 2 NUMERICKÉ MODELOVÁNÍ LITHIUM IONTOVÝCH BATERIÍ

V této kapitole jsou rozebrány jednotlivé druhy modelů a jejich submodely, které jsou dostupné v programu ANSYS Fluent. Je zde zmíněn jedno potenciálový empirický model i dvou potenciálový MSMD model. Dále jsou zde zobrazeny rovnice nutné pro výpočet komplexních vlastností baterie, počítačová dynamika tekutin nebo i metoda konečných objemů.

### 2.1 Úrovně numerického modelování Li-Ion baterií

Možností modelování baterií je obecně celá řada, liší se svojí složitostí a použitelností pro reálné aplikace. Proto je v prvním kroku důležité se správně rozhodnout o tom, co od numerického modelu očekáváme a podle toho zvolit správnou metodu a strategii při tvorbě numerického modelu. Celou situaci komplikují materiálové modely a jejich správná volba. U materiálů se projevují silné nelinearity, způsobené například závislostí na teplotě a mnohé koeficienty jsou obtížně identifikovatelné.

Z hlediska kategorizace použitelných numerických modelů můžeme provést následující rozdělení:

				
Molekulární úroveň	Úroveň elektrod	Úroveň baterie	Úroveň více baterií	Úroveň rozsáhlejšího systému
<b>Využití:</b>	Elektrochemie	ECM, CFD, FEA	ECM, CFD, ROM, FEA	ECM, ROM

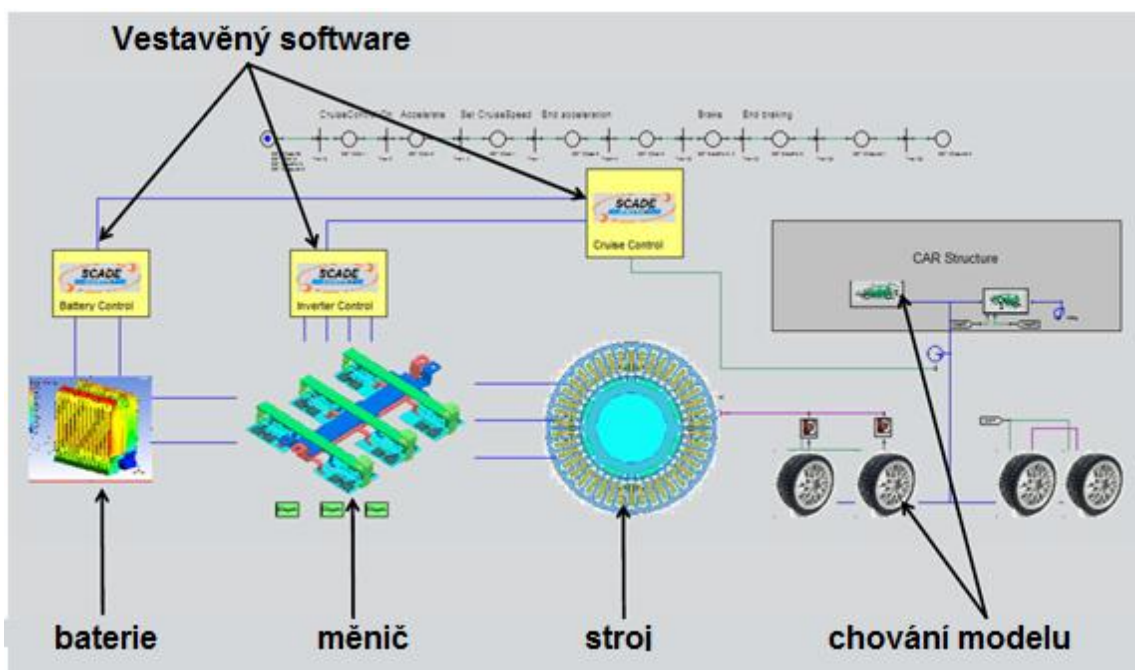
Obrázek 5: Úrovně baterie

- Na začátku celého cyklu zkoumáme na molekulární úrovni, kdy se hledají správné materiály, které budou použity pro výrobu. Výstupem mohou být například koncentrační profily.
- Na úrovni elektrod se řeší celý proces, tloušťka elektrod, doba života apod. Slouží ke korektnímu návrhu elektrodového systému z hlediska proudové zatížitelnosti.

- Na úrovni baterie zkoumáme nabíjení baterie, vybíjení baterie, tepelné profily a hlavně také bezpečnost.
- Na úrovni více baterií se pozorují tepelné profily, životnost, **NVH** (hluk, vibrace, tvrdost), **EMI** - elektromagnetická interference, **EMS** - elektromagnetická susceptibilita.

Bateriovou a článkovou úroveň lze v numerickém modelování považovat v podstatě za rovnocennou, jelikož dochází k homogenizaci materiálových parametrů pro geometrický model, takže je v podstatě jedno zda řešíme baterii nebo článek.

- Na úrovni rozsáhlejších systému se pak řeší systémová integrace. Příkladem takové systémové integrace může být následující obrázek:



Obrázek 6: Úrovně baterií

Celý systém na obrázku je v podstatě virtuální model, který charakterizuje celý systém. Jako napájecí člen je baterie, respektive její konečně-objemový model v ANSYS Fluent, který napájí silovou elektroniku (měniče, v tomto případě jsou to IGBT tranzistory, jejichž konečně-prvkové modely jsou řešeny v ANSYS Maxwell). Dále je vazba na točivý stroj (elektromotor) – ANSYS RMXprt. A chování modelu sleduje ANSYS Dynamics.

## 2.2 Druhy modelů

Použití lithium iontových akumulátorů se velmi rychle rozšířilo, od elektrických spotřebičů a elektronických zařízení, až po hybridní elektrická vozidla (HEV)

a elektrická vozidla (EDS), a to hlavně z důvodu jejich velmi vysoké hustoty energie. Mezi hlavní obavy při navrhování Li-ion baterie patří to, aby baterie měla dostatečný výkon, životnost a bezpečnost. V ANSYS Fluent je možné simulovat jeden článek baterie či akumulátor za pomoci technologie CFD a tím studovat její tepelné a elektrochemické chování.

V ANSYS Fluent se nám nabízí dva modely baterií, které lze použít pro simulaci chemických, tepelných a elektrických procesů. Konkrétně se jedná o modely:

- Jedno potenciálový empirický model
- Dvou potenciálový (MSMD) model

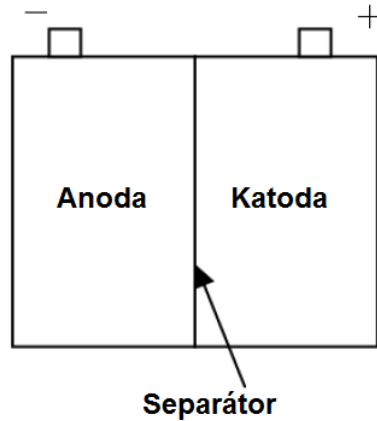
ANSYS Fluent přijal přístup modelování, který byl založený na modelu 1D původně navrhovaného od pánů Tiedemanna a Newmana, který později použili pánové Gu a Kim. [9]

## **2.3 Jedno potenciálový empirický model**

Vzhledem k použití Li-ion baterií v elektrických i hybridních automobilech existuje v ANSYSu řada modelů, které lze použít pro simulování přechodového chování opakovaně nabíjitelných baterií. Jednotlivé modely se liší ve složitosti, a proto je dobré pečlivě zvážit, který model pro naši simulaci použijeme. Jedno potenciálový empirický model je možné použít pouze na zjednodušené obvody, protože nedokáže nahlížet na baterii jako na komplexní celek. [9]

### **2.3.1 Výpočet elektrického potenciálu a proudové hustoty**

V tomto modelu se pro výpočet elektrického potenciálu a proudové hustoty uvažuje pouze elektroda anody, elektroda katody, separátor a jejich kolektory. Separátor je modelován jako nekonečně tenké rozhraní mezi dvěma elektrodami. Model baterie je schematicky znázorněn na následujícím obrázku (viz obr. 7).



Obrázek 7: Model baterie (převzato z [9]).

Integrální rovnice elektrického potenciálu může vypadat následovně,

$$\int_V \nabla(\sigma \nabla \phi) dV = \int_S j dS \quad (2.1)$$

kde  $j$  odpovídá proudové hustotě,  $S$  značí plochu rozhraní a  $\sigma$  je elektrická vodivost. [9]

## 2.4 Dvou potenciálový MSMD model

Dvou potenciálový (MSMD) bateriový model překonává omezení za použití homogenního modelu, který je založen na MSMD metodě. Dvou potenciálový MSMD bateriový model má oproti jedno potenciálovému modelu výhodu v tom, že má lepší výpočetní parametry a nahlíží na baterku jako na ortotropní kontinuum. Model zahrnuje tři elektrochemické dílčí modely:

- Newmanův, Tiedemannův, Guův, a Kimův (NTGK) empirický model
- Model ekvivaletních obvodů (ECM)
- Newmanův Pseudo-2D (P2D) model

### 2.4.1 Limitace modelů

Pro dvou potenciálový MSMD model baterie je nutné brát v potaz následující omezení:

- Pro simulaci více baterií musí platit, že dané baterie jsou identické a musí mít stejný typ a stejné okrajové podmínky.
- Při simulaci více baterií musí mít baterie vzor propojení nPmS, což znamená, že  $n$  baterie jsou propojeny paralelně a poté  $m$  články jsou spojené do série.

- Vodivá oblast musí být spojitá. Odpojené oblasti (zóny) nemohou být seskupeny jako jeden celek.
- Pozitivní a negativní kolektory (proudové sběrače) systému musí být souvislé plochy. Odpojené plochy nemohou být seskupeny dohromady jako jeden celek.
- Pozitivní a negativní konektory musí být připojeny buď k reálné přípojnici vodivých svazků, nebo k virtuálnímu propojení definovaného prostřednictvím souboru.
- Článek baterie nelze přímo kontaktovat jiným článkem baterie. Musí být spojeny vodičem. [9]

## 2.4.2 MSMD Metoda

Při numerickém modelování lithium - iontové baterie nastává potíže již v samém geometrickém modelu, jelikož baterie je složena s oblastí s různými fyzikálními vlastnostmi. Komplikací je také diametrálně rozdílné délkové měřítko. Při provádění termální analýzy je cílem určit rozložení teploty v baterii. MSMD metoda se zabývá sdružením fyzikálních vlastností na různých úrovních modelu baterie. [9]

Teplotní a elektrické pole baterie je řešeno v oblasti CFD v měřítku bateriového článku pomocí následujících parciálních diferenciálních rovnic CFD:

$$\frac{\partial \rho C_p T}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla T) = \sigma_+ |\nabla \phi_+|^2 + \sigma_- |\nabla \phi_-|^2 + \dot{q}_{ECh} + \dot{q}_{short} \quad (2.2)$$

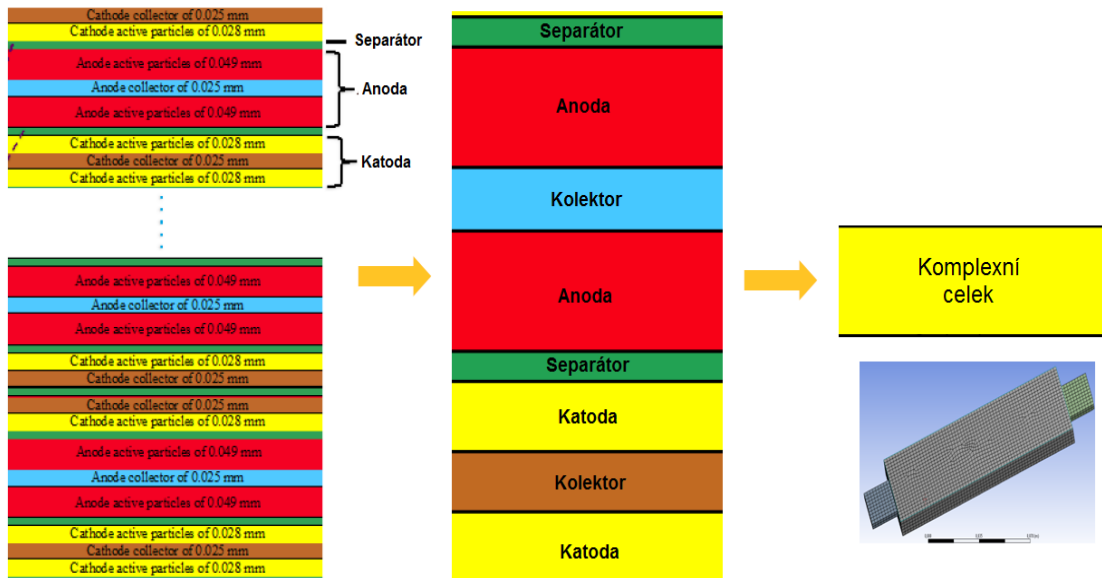
$$\nabla \cdot (\sigma_+ \nabla \phi_+) = -(j_{ECh} - j_{short}) \quad (2.3)$$

$$\nabla \cdot (\sigma_- \nabla \phi_-) = j_{ECh} - j_{short} \quad (2.4)$$

kde  $\sigma_+$  a  $\sigma_-$  označuje efektivní elektrickou vodivost kladné a záporné elektrody,  $\phi_+$  a  $\phi_-$  jsou fázové potenciály kladné a záporné elektrody,  $j_{ECh}$  a  $q_{ECh}$  jsou rychlosti přenosu proudu v prostoru a teplo způsobené elektro-chemickými reakcemi,  $j_{short}$  je proudová hustota vzniklá při zkratu a  $q_{short}$  je teplo,  $j_{ECh}$  a  $q_{ECh}$  se počítají pomocí elektrochemického submodelu,  $j_{short}$  a  $q_{short}$  jsou rovné nule v případě, pokud nedojde k vnitřnímu spojení nakrátko. [10]

Reálná baterie se skládá ze sendvičové struktury, která se periodicky opakuje. Tato struktura může být vinuta do kulata nebo skládaná. Pro účely modelování je to velmi složité, protože se zde nachází mnoho tenkých struktur (řádově mikrometry) a kdybychom vrstviili tyto struktury přesně, jak jsou v reálu, tak by bylo vykreslování modelu velmi složité. Určitou možností je nechat model ve 2D a použít Newmanův

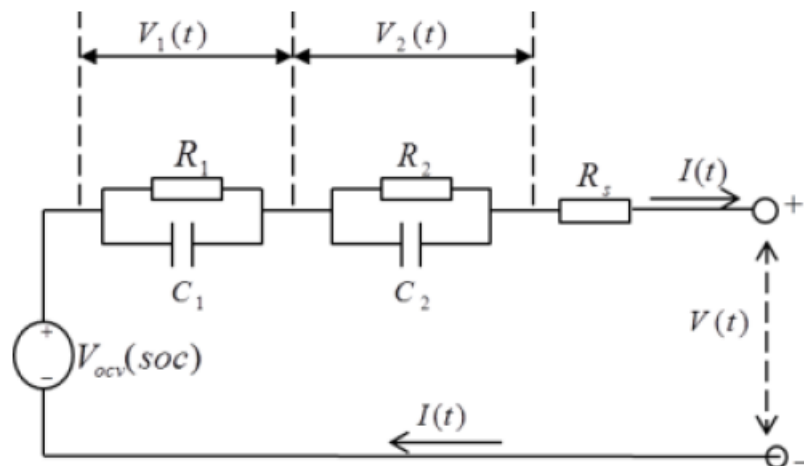
P2D model nebo model zjednodušit a dané vrstvy „pronásobit“ (použití MSMD metody). Tím získáme jakýsi komplexní celek, se kterým je možné dále pracovat.



Obrázek 8: Zjednodušení modelu

### 2.4.3 ECM Model

V modelu ekvivalentních obvodů (ECM) je elektrické chování baterie napodobeno elektrickému obvodu. ANSYS Fluent přijal šesti parametrový ECM model zahrnující práci pana Chena. V ECM modelu je obvod složen ze tří odporů a dvou kondenzátorů. Tento model je znázorněn na následujícím obrázku (viz obr. 3.1). [12]



Obrázek 9: Použití elektrického obvodu v ECM modelu (převzato z [10]).



## 2.4.4 NTGK Model

NTGK je jednoduchý semi-empirický elektrochemický model, který byl navržen panem Kwonem. Následně tento model použili i ostatní pánové. V modelové formulaci, objemový proud přenosové rychlosti se vztahuje k potenciálu poli v následující algebraické rovnici:

$$j_{ECh} = SY * [U - (\varphi_+ - \varphi_-)] \quad (2.5)$$

kde  $S$  odpovídá ploše elektrodové desky v baterii a  $Y$  a  $U$  jsou modelové parametry [11]. Dále je potřeba zmínit ještě některé vzorce nutné pro pozdější výpočty, které budou potřeba pro simulaci.

$$DoD = \frac{\text{Volume}}{3600 Q_{Ah}} \left( \int_0^t j \, dt \right) \quad (2.6)$$

kde  $\text{Volume}$  označuje objem baterie a  $Q_{Ah}$  je celková elektrická kapacita baterie v ampérhodinách.

Pro danou baterii lze získat křivky napětí a proudu pomocí experimentování a určit tak  $Y$  a  $U$  pomocí získaných dat z jednotlivých křivek. Formulace pro funkce  $Y$  a  $U$  jsou následující:

$$Y = \sum_{n=0}^5 (a_n (DoD)^n) \exp \left[ -C_1 \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref.}} \right) \right] \quad (2.7)$$

$$U = \sum_{n=0}^3 (b_n (DoD)^n) - C_2 (T - T_{ref.}) \quad (2.8)$$

kde  $C_1$  and  $C_2$  jsou Newmanovy, Tiedemannovy, Guovy a Kimovy modelové konstanty.

Rovnice 2.7 a 2.8 lze rozložit do jednotlivých polynomů, které jsou vidět v rovnicích 2.9 a 2.10.  $U$  a  $Y$  byly vyjádřeny jako následující funkce, které označují hloubky vybití:

$$U = u_0 + u_1(DOD) + u_2(DOD)^2 + u_3(DOD)^3 + u_4(DOD)^4 + u_5(DOD)^5 \quad (2.9)$$

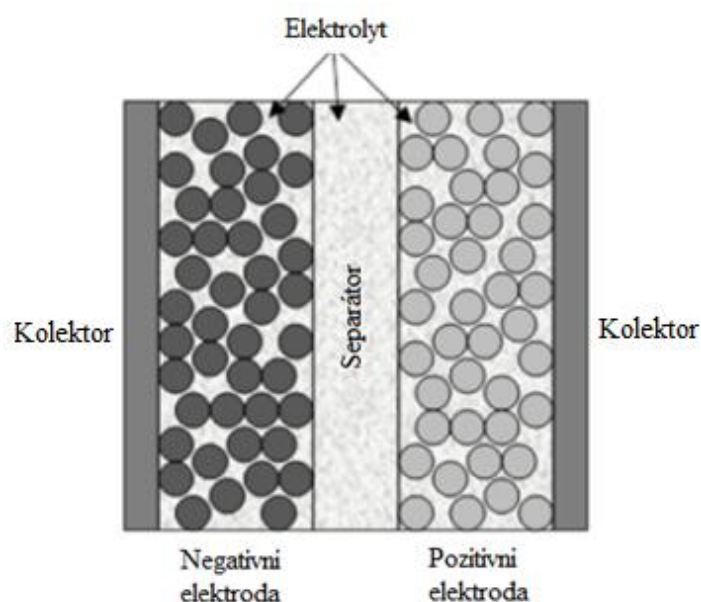
$$Y = y_0 + y_1(DOD) + y_2(DOD)^2 + y_3(DOD)^3 + y_4(DOD)^4 + y_5(DOD)^5 \quad (2.10)$$

kde  $u_0 - u_5$  a  $y_0 - y_5$  jsou konstanty určené pomocí experimentálního měření.

## 2.4.5 Newmanův P2D Model

Newmanova skupina vyvinula fyzikálně založený model, který využívá porézní elektrodu a koncentrovaný roztok. Tento model může přesně zachytit lithium-iontové migrace v baterii. Model také nabízí flexibilitu v případě studování fyzických a elektrochemických jevů. [13]

Následující obrázek (viz obr. 10) schematicky ukazuje dvojici elektrodových desek v Li-ion baterii. Kompozitní elektroda se skládá z aktivních materiálů a elektrolytického roztoku. Elektrolytická fáze je kontinuální po celé negativní elektrodě, separátoru i pozitivní elektrodě. Aktivní pevný materiál je modelován jako matice sférických částic. [13]



Obrázek 10: Elektrody a částicové domény v Newmanově modelu (převzato z [10]).

Během vybíjení difunduje Li na povrch záporné elektrody a podstupuje elektrochemickou reakci. Tato reakce poté uvolňuje elektron, který přenáší Li do fáze elektrolytu. Dokud se článek nabíjí, je Li uloženo uvnitř kladných částic elektrody. [9]

## 2.5 Vazba mezi CFD a dílčími modely

Během výpočtu je elektrochemický dílčí model konstruován a řešen pro každý článek CFD na každé iteraci (pro ustálenou simulaci) nebo jako časový krok (pro přechodovou simulaci). V ECM modelu to má za následek řešení souboru čtyř algebraických diferenciálních rovnic. Pro Newmanův model to může zahrnovat řešení systému stovek algebraických diferenciálních rovnic, v závislosti na počtu diskretizace

a bodů použitých na elektrody a částice. To je však podmíněno obrovskými náklady na výpočetní techniku, na které je simulace prováděna. [9]

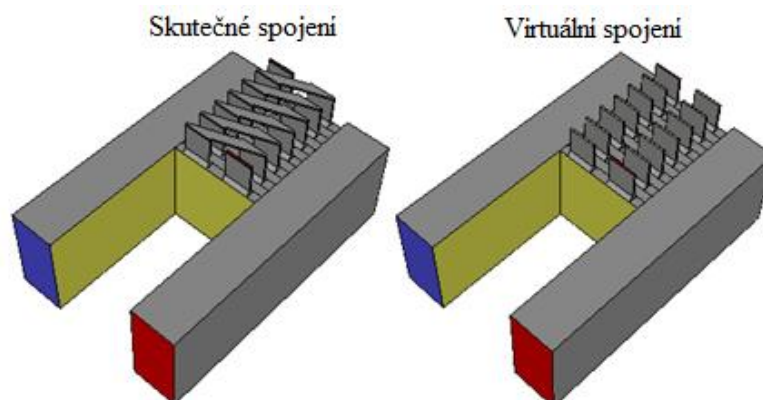
## 2.6 Baterie obecně

Mnoho aplikací využívá bateriové systémy, ve kterých jsou jednotlivé baterie spojené za sebou (sériově) nebo vedle sebe (paralelně). V ANSYS Fluentu byla rozšířena metoda MSMD, aby bylo možné pomocí ní simulovat bateriové systémy.

ANSYS Fluent využívá při simulaci baterie kontinuální metodu zóny, ve které jsou dvě potenciální rovnice řešeny přes všechny vodivé zóny kontinuálně. [9]

## 2.7 Propojení baterií

Více baterií lze propojit buď prostřednictvím skutečného spojení, nebo pomocí virtuálního spojení (viz obr. 10).



Obrázek 11: Propojení baterií (převzato z [10]).

Skutečné spoje jsou přípojnice, které jsou fyzicky vyřešeny a „zamešovány“ v modelu. Naproti tomu virtuální spoje jsou také přípojnice, které nejsou explicitně vyřešeny v modelu. Při použití virtuálních spojů se dá ušetřit výpočetní čas. Nevýhodou je však elektrický odpor a Joulovo teplo, se kterými tento model nepočítá. [9]

## 2.8 Simulace článku baterie za použití MSMD modelu

Materiálové vlastnosti článku baterie lze odhadnout pomocí následujících rovnic (pro hustotu, tepelnou kapacitu a tepelnou vodivost):

$$x_{eff} = \frac{0,5 x_c^p \delta_c^p + x_e^p \delta_e^p + x_s \delta_s + x_e^n \delta_e^n + 0,5 x_c^n \delta_c^n}{\delta_{total}} \quad (2.11)$$

$$\delta_{total} = 0,5 \delta_c^p + \delta_e^p + \delta_s + \delta_e^n + 0,5 \delta_c^n \quad (2.12)$$

kde  $x_{eff}$  je efektivní hodnota vlastnosti materiálu (značená tloušťku). Indexy  $c$ ,  $e$  a  $s$  odkazují v daném pořadí na kolektory, elektrody a separátor. Indexy  $p$  a  $n$  jsou pak pozitivní a negativní. [11, 14]

Pro elektrickou vodivost se používají následující vzorce.

$$\sigma_p = \frac{0,5 \sigma_c^p \delta_c^p + \sigma_e^p \delta_e^p}{\delta_{total}} \quad (2.13)$$

$$\sigma_{np} = \frac{0,5 \sigma_c^n \delta_c^n + \sigma_e^n \delta_e^n}{\delta_{total}} \quad (2.14)$$

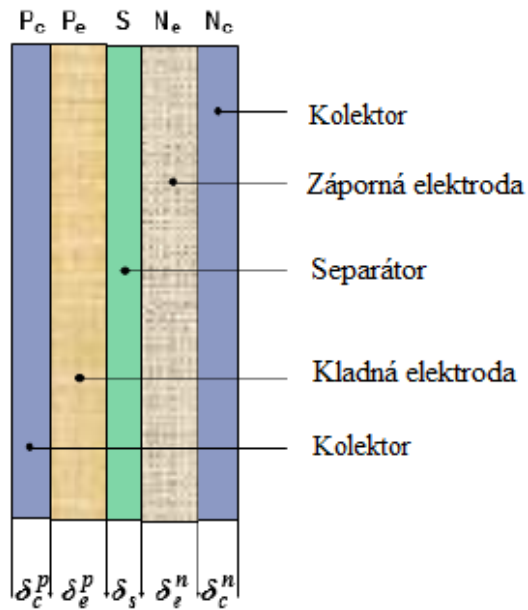
Vlastnosti materiálů jsou převzaty z dokumentů pana Kima. Vypočtené vlastnosti materiálů pro bateriový článek jsou uvedeny v následující tabulce (viz tab. 1.)

Tabulka 1: Hodnoty materiálů pro bateriový článek

Oblast	P <sub>c</sub>	P <sub>e</sub>	S	N <sub>e</sub>	N <sub>c</sub>	Celkem
$\delta$ [um]	20	150	12	145	10	322
$\rho$ [kg/m <sup>3</sup> ]	2700	1500	1200	2500	8960	2092
C <sub>p</sub> [J/kg-K]	900	700	700	700	385	701
K [W/m-K]	238	5	1	5	398	18,2
$\sigma$ [S/m]	3,83e7	13,9		100	6,33e7	$\sigma_p = 1,19e6$ $\sigma_n = 9,83e5$

Hodnoty z tabulky (hustota, tepelná kapacita, tepelná vodivost a elektrická vodivost) jsou vkládány do ANSYSu při vytváření materiálu, který komplexně poté popisuje baterii a program tak nahlíží na baterii jako na jeden celek. [9]

Průřez článku baterie je znázorněn na následujícím obrázku (viz obr. 12)



Obrázek 12: Průřez článku baterie (převzato z [10]).

### 2.8.1 Výpočet celkových parametrů

Dosažením hodnot z tabulky pana Kima do výše uvedených rovnic dostaneme celkové hodnoty, které jsou použity pro simulaci akumulátoru a dosaženy v ANSYSu [10].

$$\delta_{total} = (0,5 * 20) + 150 + 12 + 145 + (0,5 * 10) = 322 \mu\text{m} \quad (2.15)$$

$$\rho = \frac{(0,5 * 2700 * 20) + (1500 * 150) + (1200 * 12) + (2500 * 245) + (0,5 * 8960 * 10)}{322} \quad (2.16)$$

$$= 2092 \text{ kg/m}^3$$

$$C_p = \frac{(0,5 * 900 * 20) + (700 * 150) + (700 * 12) + (700 + 145) + (0,5 * 385 * 10)}{322} \quad (2.17)$$

$$= 701 \text{ J/kg}\cdot\text{K}$$

$$K = \frac{(0,5 * 238 * 20) + (5 * 150) + (1 * 12) + (5 * 145) + (0,5 * 385 * 10)}{322} \quad (2.18)$$

$$= 18,2 \text{ W/m}\cdot\text{K}$$

$$\sigma_p = \frac{[(0,5 * 20 * 3,83 * 10^7) + (13,9 * 150)]}{322} = 1,19 * 10^6 \text{ S/m} \quad (2.19)$$

$$\sigma_n = \frac{[(0,5 * 10 * 6,33 * 10^7) + (100 * 145)]}{322} = 9,83 * 10^5 \text{ S/m} \quad (2.20)$$

Z výpočtu je patrné, že hodnoty odpovídají hodnotám uvedených v Kimově tabulce [10], až na jediný rozdíl, který byl u tepelné kapacity. Zde byla hodnota 701 J/kg·K a byla do tabulky nahrazena místo původní hodnoty 678 J/kg·K.

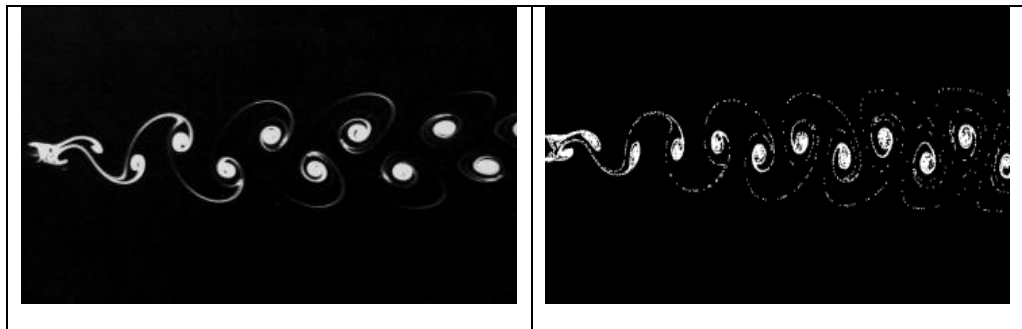
## 2.9 Computation fluid dynamics (CFD)

Počítačová dynamika tekutin (CFD) je moderní metoda, která se zabývá prouděním tekutin, přenosem tepla a hmoty, průběhem chemických reakcí a dalšími souvisejícími jevy v definovaném prostředí. Pro použití CFD je třeba nejprve vytvořit model (virtuální prototyp zkoumaného systému), na který jsou následně aplikovány matematické postupy tak, aby byly ze zadaných okrajových a počátečních podmínek získány vybrané údaje o dějích probíhajících v celé zkoumané oblasti při respektování fyzikálních zákonů. Rychlost simulací závisí na daném objektu, který zkoumáme, ale také na hardwarových částech našeho počítače. S vysokorychlostními superpočítači lze dosáhnout lepších řešení. Typickým zástupcem CFD je Flow Simulation v SolidWorks nebo Fluent a CFX v ANSYS. [15]

Výpočetní dynamika kapalin (CFD) poskytuje kvalitativní a někdy i kvantitativní předpovídání proudění tekutin pomocí třech základních prvků. Jedná se o:

- Matematické modelování (parciální diferenciální rovnice).
- Numerické metody (diskretizace a techniky řešení).
- Softwarové nástroje (řešitele, nástroje před a po zpracování).

CFD umožňuje vědcům a inženýrům provádět numerické experimenty neboli tzv. počítačové simulace ve virtuálních laboratořích.



Obrázek 13: Porovnání reálného experimentu (vlevo) oproti CFD simulaci (vpravo)

### **Toky tekutin, které se vyskytují v každodenním životě, zahrnují:**

- Meteorologické jevy (déšť, vítr, hurikány, záplavy, požáry).
- Nebezpečí pro životní prostředí (znečištění ovzduší, přeprava kontaminantů).
- Vytápění, větrání a klimatizace budov, automobilů apod.
- Spalování v automobilových motorech a jiných pohonných systémech.
- Interakce různých předmětů s okolním vzduchem a vodou.

- Komplexní toky v pecích, výměníků tepla, chemických reaktorech apod.
- Procesy v lidském těle (průtok krve, dýchání, pití). [15]

#### Numerické simulace toku tekutin umožňují například, aby:

- Architekti navrhli pohodlné a bezpečné životní prostředí.
- Konstrukteři vozidel zlepšili aerodynamické charakteristiky.
- Chemičtí inženýři maximalizovali výnos z jejich zařízení.
- Inženýři z oblasti ropy navrhli optimální strategie na obnovu ropy.
- Chirurgové léčili arteriální nemoci (výpočetní hemodynamika).
- Meteorologové předpovídali počasí a varovali před přírodními katastrofami.
- Bezpečnostní experti snížili zdravotní rizika z radiace a jiných rizik.
- Vojenské organizace vyvíjely zbraně a odhadovaly škody apod. [15]

### 2.9.1 Navier - Stokesova rovnice

Laminární proudění nastává, když tekutina proudí v rovnoběžných vrstvách. Tohoto proudění můžeme dosáhnout za použití dostatečně úzké a dlouhé trubice. Zajímáme se tedy o 3D laminární proudění v potrubí jakéhokoli průřezu. To může být popsáno Navier-Stokesovou rovnicí pro stlačitelnou tekutinu (bez působení vnějších sil): [24]

	$\rho \left( \frac{\partial c_i}{\partial t} + c_j \frac{\partial c_i}{\partial x_j} \right) - \mu \frac{\partial^2 c_i}{\partial x_j \partial x_j} - \left( b + \frac{\mu}{3} \right) \frac{\partial^2 c_i}{\partial x_i \partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} = 0$	(2.21)
--	--	--------

kde  $b$  je viskozita,  $c$  je rychlost tekutiny,  $p$  odpovídá tlaku,  $t$  je čas,  $x$  je prostorová souřadnice,  $\mu$  se značí dynamická viskozita,  $\rho$  je hustota a indexy  $i$  a  $j$  nabývají hodnot 1, 2 a 3.

### 2.9.2 Rovnice kontinuity

Základní rovnicí pro řešení problémů spojených s prouděním tekutin se využívá rovnice kontinuity, která je založena na bilanci hmotnosti proudící tekutiny. Jak taková rovnice vypadá, ukazuje následující rovnice. [25]

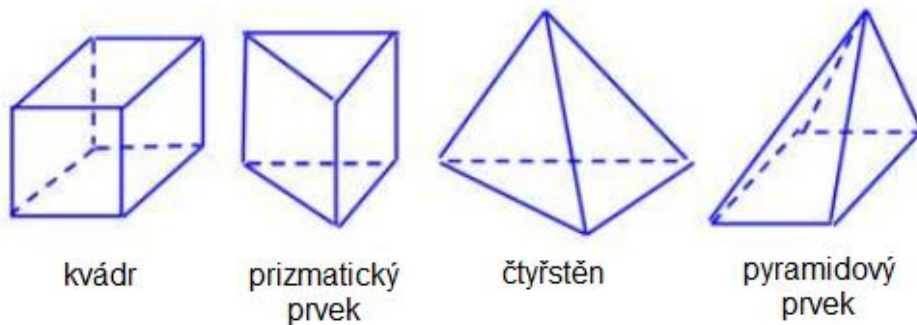
	$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot j = s$	(2.22)
--	---	--------

kde  $\rho$  je prostorová hustota,  $j$  vyjadřuje hustotu toku,  $\nabla \cdot j$  je divergence této hustoty a  $s$  je zdrojový člen, vyjadřující rychlost přibývání zachovávaných se veličiny.

## 2.10 Metoda konečných objemů (MKO)

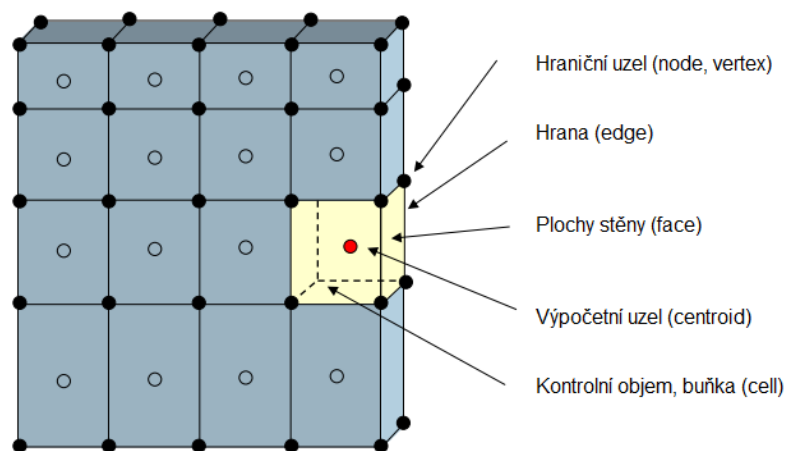
Numerická metoda konečných objemů je založena na vytvoření systému, který je složen z navzájem se nepřekrývajících elementů, tedy konečných prvků. Původně byla metoda konečných objemů ve dvourozměrném případě postavena na konečných objemech tvaru obdélníků a čtyřúhelníků. Ve trojrozměrném případě pak pomocí kvádrů a šestištěnů.

Pomocí těchto prvků dojde k vytvoření tzv. strukturované sítě, pro kterou platí, že hranice prvků musí sousedit pouze s jedinou hranicí sousedního elementu. Z toho vyplývá, že nelze libovolně zhušťovat danou síť, což může být pro některé simulace problém. Proto se v současné době hodně prosazuje tzv. nestrukturovaná síť, která je tvořena ve 3D kvádry, čtyřštěny nebo prizmatickými a pyramidovými prvky. Tyto prvky je navíc možné různě kombinovat, aby byla vytvořena optimální síť. [16]



Obrázek 14: Tvary konečných objemů

U metody konečných objemů se využívají některé základní rovnice, jako jsou rovnice kontinuity, pohybové, energie, transportní apod., které nám popisují spojitě prostředí a jsou převedeny do soustavy algebraických rovnic.



Obrázek 15: Základní označení výpočetní sítě



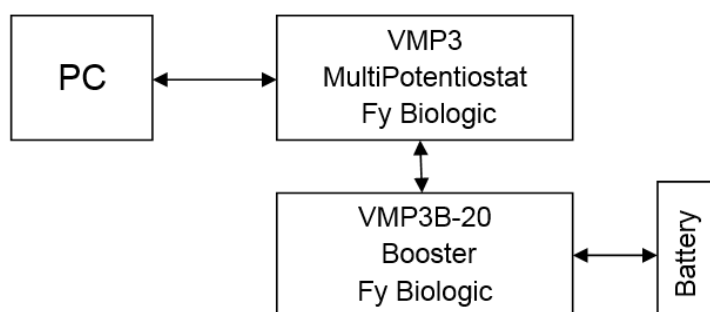
## 3 PRAKTICKÁ ČÁST

V této kapitole se nachází experimentální měření včetně rozebrání baterie a získání jednotlivých parametrů nutných pro provedení simulace. Dále se zde nachází vše ohledně nastavování simulace, ať už se jedná o samotnou geometrii či síťování modelu apod. Nezbytnou součástí je porovnání jednotlivých výsledků mezi reálnou baterií a samotnou simulací. V poslední řadě je proveden průraz baterie a simulace s tím spojené.

### 3.1 Experimentální měření

Pro elektrochemické testování a přípravu matematicko-fyzikálního modelu jsem použil baterii s kapacitou 4 Ah s označením SLPB9543140H5 vyrobenou společností KOKAM.

Jedna baterie byla rozebrána proto, aby byly zjištěny její rozměry a parametry, které byly dále použity pro přípravu modelu. Druhá baterie byla připojena k Biologic Science Instruments® VMP3® s posilovačem (viz obr. 16).



Obrázek 16: Blokový diagram Biologic Science Instruments® VMP3® s posilovačem

Nabíjení baterie pak probíhalo pomocí metody CCCV. Nabíjecí proud byl nastaven na 0,2 C (800 mA) a hraniční napětí na 4,2 V. Jakmile bylo dosaženo 4,2 V, potenciostat byl přepnut do režimu CV a čekalo se, než proud klesne pod 200 mA. Následně byla testovaná baterie postupně vybíjena ostatními proudy, konkrétně proudy 0,2 C (0,8 A), 0,5 C (2 A), 1 C (4 A), 2 C (8 A) a 4 C (16 A). Během vybíjení byly vždy zaznamenány hodnoty pro vybíjecí charakteristiky. Stejně tak byla baterie průběžně fotografována pomocí termokamery, aby se zjistil ohřev baterie během toho, co v ní procházel proud. Výsledné vybíjecí charakteristiky a teploty baterie zjištěné při vybíjení pro jednotlivé C (1C, 2C a 4C) byly porovnány s výsledky získanými pomocí simulace.

## 3.2 Rozebrání baterie

Na následujících obrázcích je zobrazen postup rozebírání testované baterie KOKAM. Před samotným rozebráním musela být baterie zcela vybitá, jinak by se začaly projevovat elektrochemické reakce a baterie by mohla začít hořet. Po úplném vybití proběhlo opatrné narušení pláště baterie s tím, aby se nepoškodila žádná vnitřní struktura baterie. Z rozebrané baterie byly následně zjištěny jednotlivé parametry baterie, které byly použity pro numerický model.









Obrázek 17: Rozebírání reálné baterie KOKAM

### 3.3 Složení akumulátoru

Jednotlivé materiály, které jsou použity v naší testované baterii, jsou zobrazeny v následující tabulce. Nezbytnou součástí tabulky je také Youngův modul a Poissonova konstanta, se kterými je pracováno v pozdější části „nail“ testu.

Tabulka 2: Složení akumulátoru

Část baterie	Použitý materiál	Youngův modul [GPa]	Poissonova konstanta [-]
Anoda	Hliník	70	0,33
Katoda	Měď	130	0,35
Separátor	PE	0,235	0,38
Elektrolyt	$\text{LiNi}_{0,33}\text{Mn}_{0,33}\text{Co}_{0,33}\text{O}_2$	0,0011	0,33

#### 3.3.1 Hliník

Hliník se vyznačuje chemickou značkou Al, je nepolymorfní a krystaluje v krychlové, plošně středěné soustavě. Vyznačuje se velmi dobrou stabilitou ve velkém množství oxidačních prostředí. Mimo jiné má také výbornou tepelnou a elektrickou vodivost. Mechanické vlastnosti jsou velmi závislé na obsahu nečistot a na tepelném zpracování. Uplatnění hliníku je hned několik, nejčastěji se používá na výrobu plechovek, nicméně se hojně využívá také v automobilovém průmyslu, elektrotechnice, stavebnictví a částečně i v leteckém průmyslu. [19]

Tabulka 3: Fyzikální vlastnosti hliníku

Vlastnost	Hodnota	Jednotka
Hustota	2700	kg/m <sup>3</sup>
Tepelná kapacita	903	J/kg-K
Tepelná vodivost	238	W/m-K
Elektrická vodivost	3,83e7	S/m

### 3.3.2 Měď

Měď patří spolu s hliníkem a železem mezi nejdůležitější technické kovy. Označuje se chemickou značkou Cu a vyznačuje se velmi dobrou elektrickou a tepelnou vodivostí. Měď se nejvíce využívá k výrobě elektrických vodičů a trubek ve výměnících tepla. V poslední době se také hojně využívá ve fotovoltaice při výrobě moderních tenkovrstvých fotoelektrických článků CIGS. [20]

Tabulka 4: Fyzikální vlastnosti mědi

Vlastnost	Hodnota	Jednotka
Hustota	8900	kg/m <sup>3</sup>
Tepelná kapacita	385	J/kg-K
Tepelná vodivost	398	W/m-K
Elektrická vodivost	6,33e7	S/m

### 3.3.3 Polyethylen (PE)

Největším zástupcem separátoru v oblasti lithium-iontových baterií je polyethylen. Separátor baterie obsahuje mikro a nano póry, které poskytují vynikající kapacitu pro přenos iontů v li-iontové baterii. Existují také separátory s keramickým potahem, díky kterým se docílí zvýšení odolnosti proti tepelné deformaci a mechanické pevnosti. Polyethylenové separátory se široce používají při výrobě baterií pro spotřební elektroniku a také pro baterie s vysokým výkonem a vysokou energií. Polyethylen má velmi vysokou hustotou pro dosažení vynikající poréznosti, homogenní struktury nanopórů a vynikajících pevnostních charakteristik. Dalšími výhodami jsou například dobrá pronikavost iontů, vynikající míra odolnosti proti propíchnutí, nízká tepelná vodivost a vysoká chemická odolnost. [18]

Tabulka 5: Fyzikální vlastnosti polyethylenu

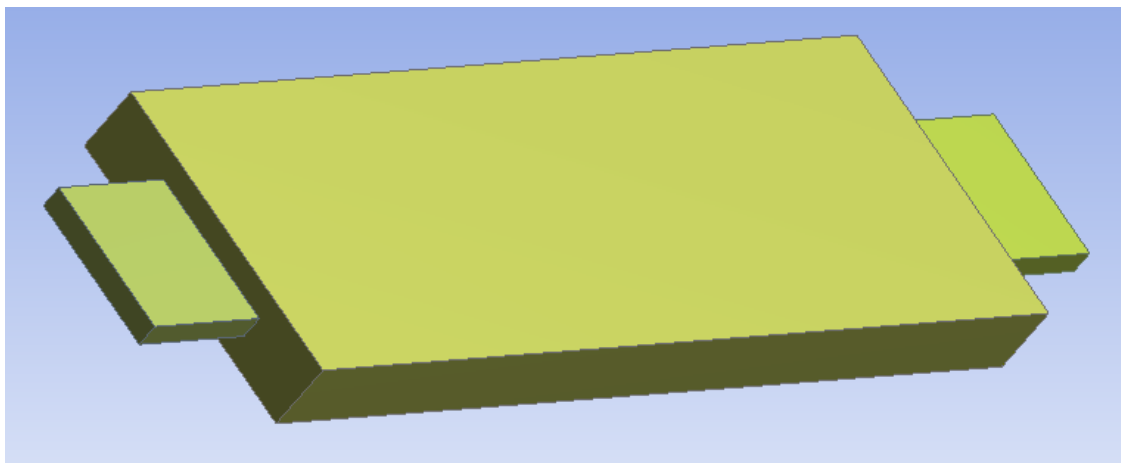
Vlastnost	Hodnota	Jednotka
Hustota	492	kg/m <sup>3</sup>
Tepelná kapacita	1978	J/kg-K
Tepelná vodivost	0,334	W/m-K
Elektrická vodivost	-	S/m

### 3.3.4 Elektrolyt

Lithium nikel mangan kobalt oxid je jedním z nejběžnějších materiálů katodových oxidů pro lithium-iontové baterie.  $\text{LiNi}_{0,33}\text{Mn}_{0,33}\text{Co}_{0,33}\text{O}_2$  je velmi slibný kandidát, který kombinuje velmi dobrou kapacitu s vysokou rychlostí a zvýšenou tepelnou stabilitou ve srovnání s jinými pozitivními materiály elektrod, jako jsou substituované  $\text{LiNiO}_2$ ,  $\text{LiCoO}_2$  a další substituované lithium manganové spinely. [21]

## 3.4 Geometrie modelu baterie

Proto, aby bylo možné nějakým způsobem odsimulovat baterii a porovnat ji s baterií skutečnou, bylo zapotřebí vytvořit geometrii, která by odpovídala skutečné baterii. Moji geometrii jsem si vytvořil v programu SolidWorks a následně ji použil v programu ANSYS Fluent pro další práci. Geometrie se skládá ze třech kvádrů, které jsou propojené a tvoří tak jeden celek (viz obr. 18).



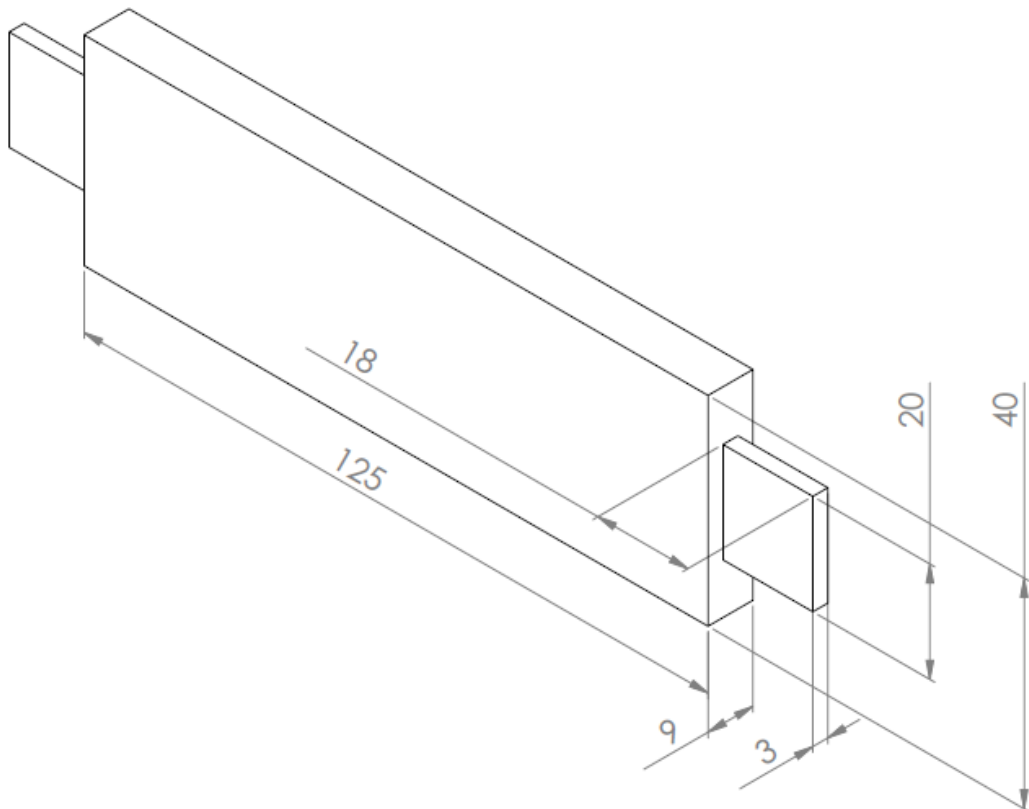
Obrázek 18: Geometrie modelu baterie

### 3.4.1 Rozměry geometrie

Na následujících obrázcích jsou popsány jednotlivé rozměry baterie. Rozměry baterie odpovídají baterii reálné s jedinou výjimkou, což je tloušťka kladné a záporné elektrody, která byla zvolena z důvodu simulace o něco větší.



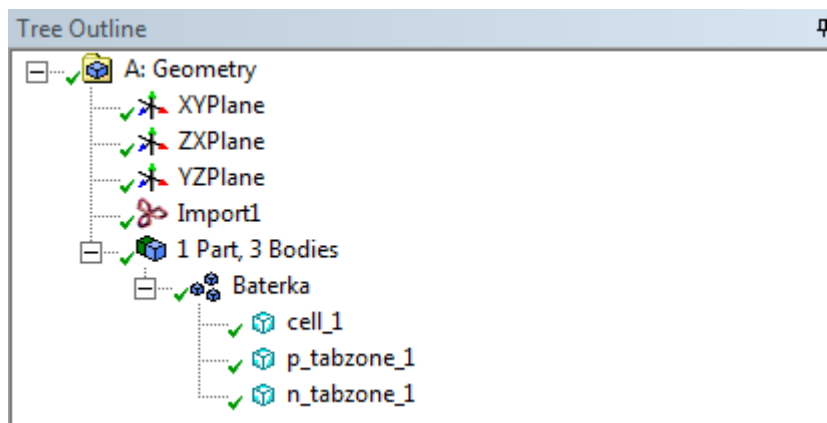
Obrázek 19: Reálná geometrie testované baterie



Obrázek 20: Rozměry geometrie celé baterie v milimetrech

### 3.4.2 Označení částí baterie

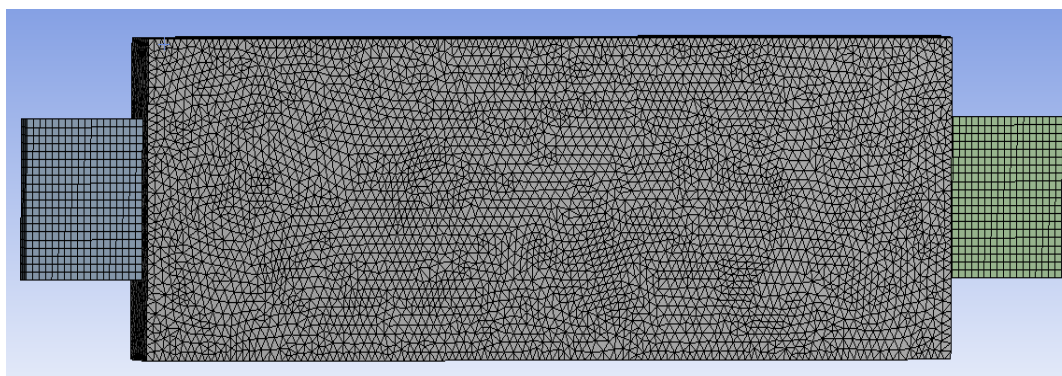
Z důvodu, aby bylo možné baterii nějakým způsobem odsimulovat, je potřeba sloučit baterii do jednoho celku a označit jednotlivé části baterie tak, aby je bylo možné v simulaci přiřadit k jednotlivým částem. V mé geometrii je to řešeno tím způsobem, že jsou vytvořeny 3 části, které jsou přejmenovány a sloučeny do jedné (viz obr. 21).



Obrázek 21: Sloučení a pojmenování jednotlivých částí

## 3.5 Vytvoření výpočetní sítě na geometrii

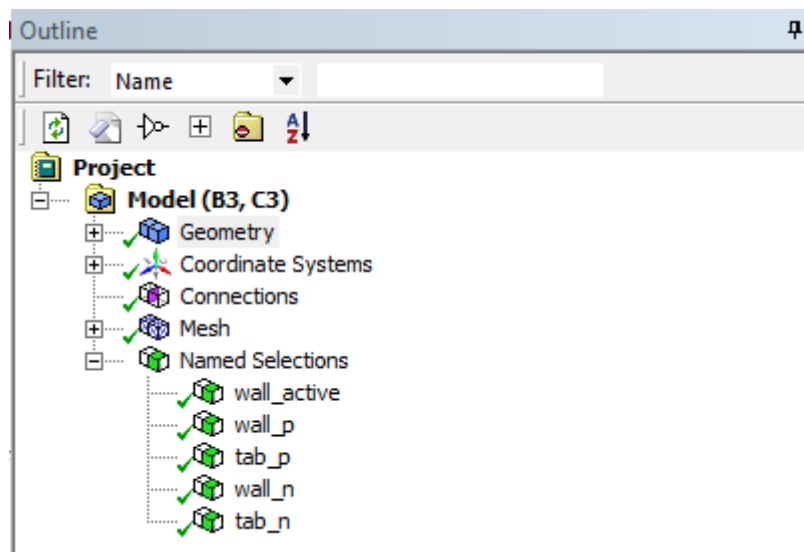
Proto, aby bylo možné s modelem dále pracovat, musela být geometrie „zamešována“ a vytvořena tak výpočetní síť, na které byly prováděny výpočty. Moje výpočetní síť se skládala z 14 114 uzlů a 61 452 prvků. Jak taková síť vypadá, nám zobrazuje následující obrázek (viz obr. 11).



Obrázek 22: Výpočetní síť baterie

Po vytvoření výpočetní sítě je potřeba, z důvodu dalšího nastavování modelu, vytvořit tzv. Named Selections. To se udělá tak, že označíme jednotlivé plochy baterie a danou selekci vytvoříme.

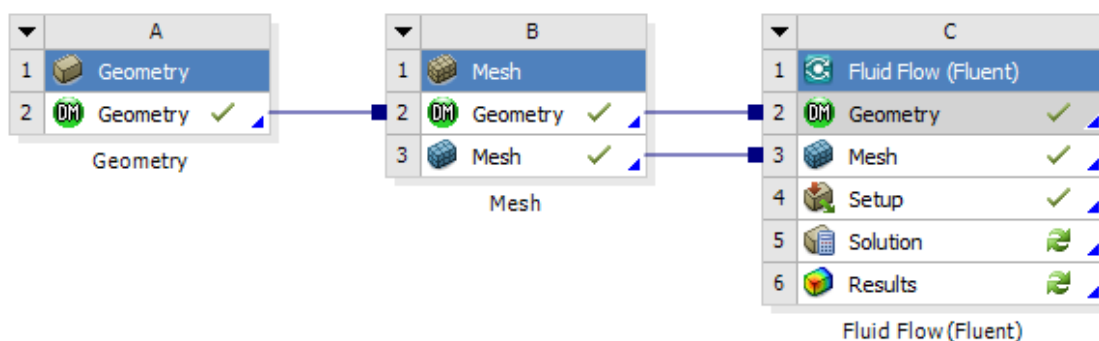




Obrázek 23: Vytvořené "Named Selections"

### 3.6 Schéma propojení v Ansysu

Po vytvoření geometrie je potřeba ji přenést do programu ANSYS a zde ji načíst. Následně se geometrie propojí s blokem "B" a vytvoříme na ní výpočetní síť. V poslední části už jen stačí propojit výpočetní síť s fluentem a udělat update.



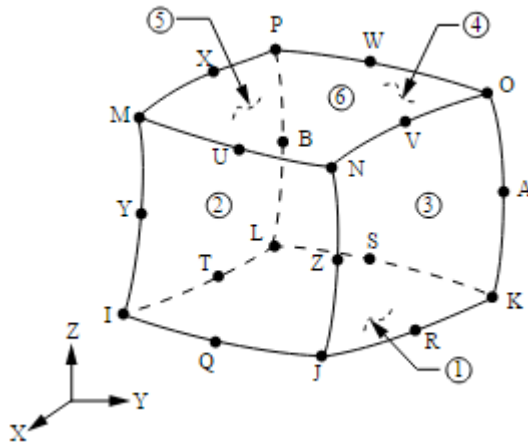
Obrázek 24: Schéma propojení v ANSYSu

### 3.7 Solid 186

Solid 186 se používá pro 3-D modelování pevných struktur. Je definován dvaceti uzly, které mají tři stupně volnosti v každém uzlu a překlady v uzlových směrech x, y, a z.

Prvek má vlastnosti jako jsou plasticita, hyperelasticita, stresové vyztužení, tečení,

velký průhyb a velké deformační schopnosti. Má také smíšené schopnosti formulace pro simulaci deformací téměř nestlačitelných elastoplastických materiálů a plně nestlačitelných hyperelastických materiálů. Tento prvek je použit pro vymodelování elektrod. [23]

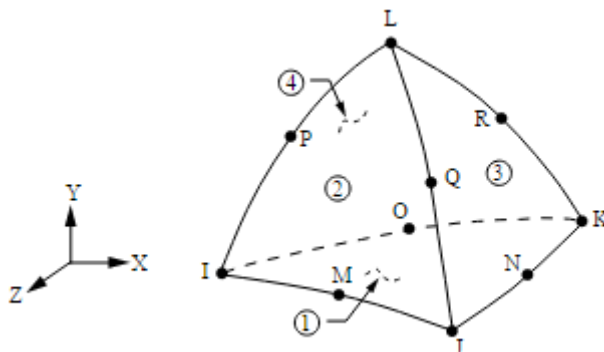


Obrázek 25: Popis homogenního prvku Solidu 186

Geometrie a uzly umístění tohoto prvku jsou znázorněny na výše uvedeném obrázku (viz obr. 25).

### 3.8 Solid 187

Solid 187 je 3-D prvek, který má kvadratické chování a je vhodný pro modelování nepravidelných sítí (například sítí vyrobených z různých systémů). Solid 187 je použit pro vymodelování baterie. [29]

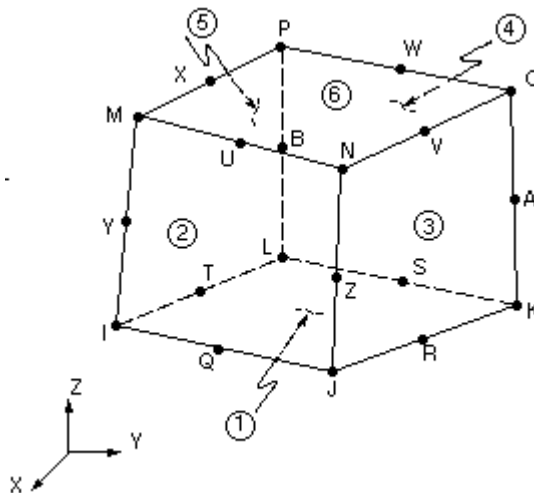


Obrázek 26: Popis geometrie Solidu 187

Prvek je definován 10 uzly, a stejně jako Solid 186 má v každém uzlu tři stupně volnosti a překlady v uzlových směrech x, y a z. Jeho vlastnosti jsou stejné jako u výše zmiňovaného Solidu 186. [29]

### 3.9 Solid 117

Pomocí solidu 117 se modeluje trojrozměrné elektrické a elektromagnetické pole. Prvek je definován 20 uzly a podporuje nelineární magnetické modely materiálů pro modelování křivek B-H nebo demagnetizačních křivek permanentních magnetů pro statické a přechodové analýzy. Pomocí tohoto prvku se řeší elektrická pole v baterii. [30]



Obrázek 27: Popis geometrie Solid 117

### 3.10 Vyvolání MSMD metody

Nezbytnou součástí pro nastavení MSMD metody je nutné nejprve tuto metodu vyvolat. Metoda se vyvolá tak, že se v příkazovém řádku při nastavování modelu zadá text „define/models/addon-module“ a vybere se číslo 8 pro MSMD metodu.

```
Console
define/models/addon-module
Fluent Addon Modules:
  0. None
  1. MHD Model
  2. Fiber Model
  3. Fuel Cell and Electrolysis Model
  4. SOFC Model with Unresolved Electrolyte
  5. Population Balance Model
  6. Adjoint Solver
  7. Single-Potential Battery Model
  8. Dual-Potential MSMD Battery Model
  9. PEM Fuel Cell Model
  10. Macroscopic Particle Model
Enter Module Number: [0] 8
```

Obrázek 28: Vyvolání MSMD metody

### 3.11 Výpočet parametrů baterie

Výpočty celkových parametrů počítáme obdobně jako u předchozí tabulky. Rozměry baterie odpovídají velikosti baterie, která počítá s 42 závitů.

$$\delta_{total} = ((0,5 * 840) + 2440 + 920 + 428 + (0,5 * 110)) * 2 = 8522 \mu\text{m} \quad (2.23)$$

$$\rho = \frac{(0,5 * 2700 * 840) + (1500 * 2440) + (492 * 920) + (2660 * 430) + (0,5 * 8960 * 110)}{8522} = 804 \text{ kg/m}^3 \quad (2.24)$$

$$C_p = \frac{(0,5 * 903 * 840) + (1260 * 2440) + (1978 * 920) + (1437 + 428) + (0,5 * 385 * 110)}{8522} = 694 \text{ J/kg-K} \quad (2.25)$$

$$K = \frac{(0,5 * 238 * 840) + (1,48 * 2440) + (0,334 * 920) + (1,04 * 428) + (0,5 * 398 * 110)}{8522} = 17,4 \text{ W/m-K} \quad (2.26)$$

$$\sigma_p = \frac{[(0,5 * 840 * 3,83 * 10^7) + (1,07 * 10^{-7} * 2440)]}{8522} = 1,92 * 10^6 \text{ S/m} \quad (2.27)$$

$$\sigma_n = \frac{[(0,5 * 110 * 6,33 * 10^7) + (10000 * 428)]}{8522} = 3,9 * 10^5 \text{ S/m} \quad (2.28)$$

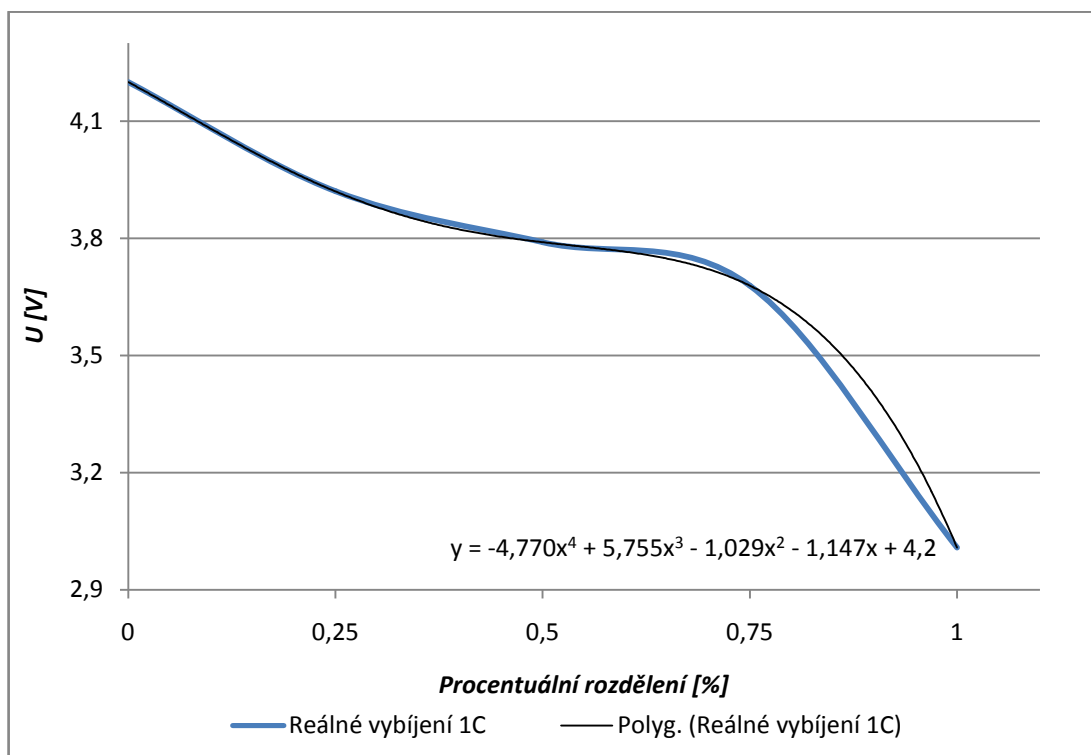
Tabulka 6: Geometrické a materiálové vlastnosti článku

Oblast	P <sub>c</sub>	P <sub>e</sub>	S	N <sub>e</sub>	N <sub>c</sub>	Celkem
δ [μm]	840	2440	920	428	110	8522
ρ [kg/m <sup>3</sup> ]	2700	1500	492	2660	8900	804
C <sub>p</sub> [J/kg-K]	903	1260	1978	1437	385	694
K [W/m-K]	238	1,48	0,334	1,04	398	14,7
σ [S/m]	3,83e7	1,0e-7		10000	6,33e7	σ <sub>p</sub> = 1,92e6 σ <sub>n</sub> = 3,90e5

### 3.12 Počáteční podmínky simulace

Před samotnou simulací je potřeba nastavit ještě několik okrajových podmínek. Je potřeba zapnout NTGK empirický model, povolit energii v baterii a zvolit tranzientní úlohu. Dále nastavit kapacitu baterie, v našem případě 4 Ah a nastavit specifický C-Rate pro jednotlivé vybíjení na hodnoty 1, 2 a 4. Pro správné vykreslení charakteristik je třeba si vhodně zvolit minimální napětí, na kterém bude simulace zastavena.

Nezbytnou součástí bylo také zjistit modelové parametry baterie a zadat je při nastavování simulace.



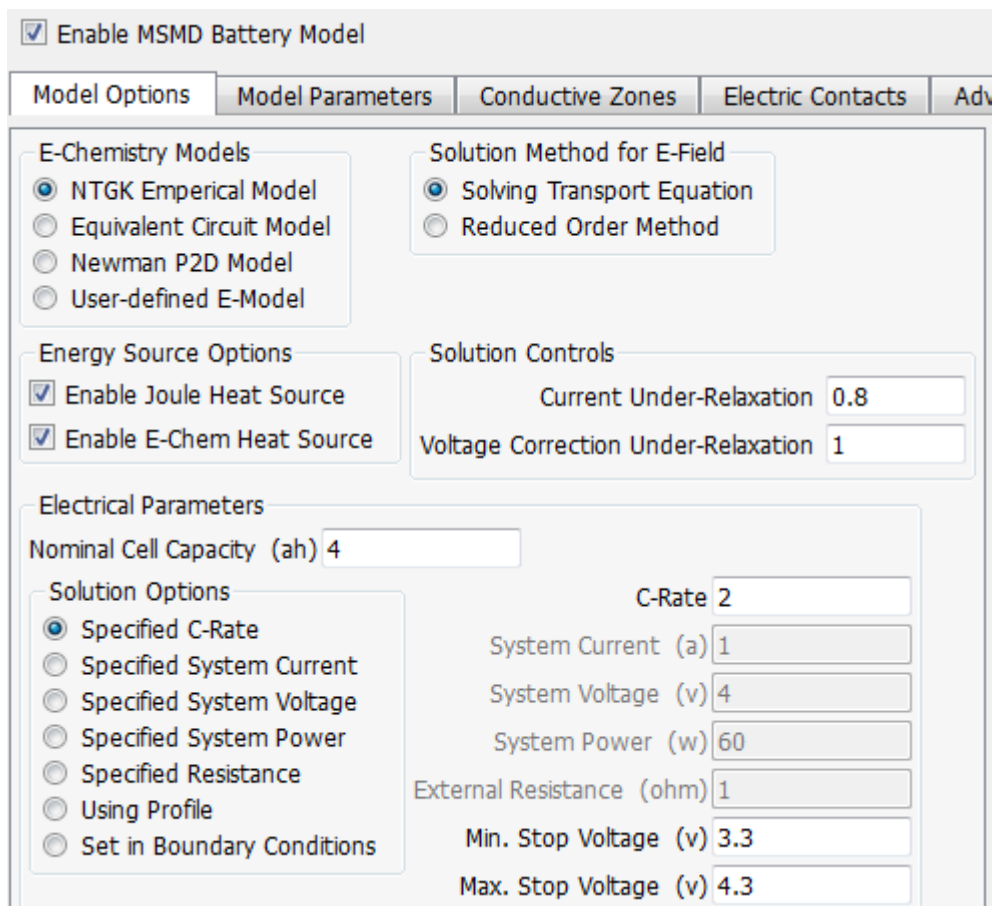
Obrázek 29: Zjištění modelových parametrů z polynomu 5 stupně

The screenshot shows the 'NTGK Model Polarization Parameters' dialog box. It has four tabs: 'Model Options', 'Model Parameters', 'Conductive Zones', and 'Electric Contacts'. The 'Model Parameters' tab is active. The parameters are as follows:

- Initial DoD: 0.1
- Reference Capacity (ah): 4
- U Coefficients:
  - a0: 4.2
  - a1: -1.147
  - a2: -1.029
  - a3: 5.755
  - a4: -4.77
  - a5: 0
- Y Coefficients:
  - b0: 1168.59
  - b1: -8928
  - b2: 52504.6
  - b3: -136231
  - b4: 158531.7
  - b5: -67578.5
- Temperature Corrections:
  - C1: 1800
  - C2: -0.00095

Obrázek 30: Zadání modelových parametrů baterie

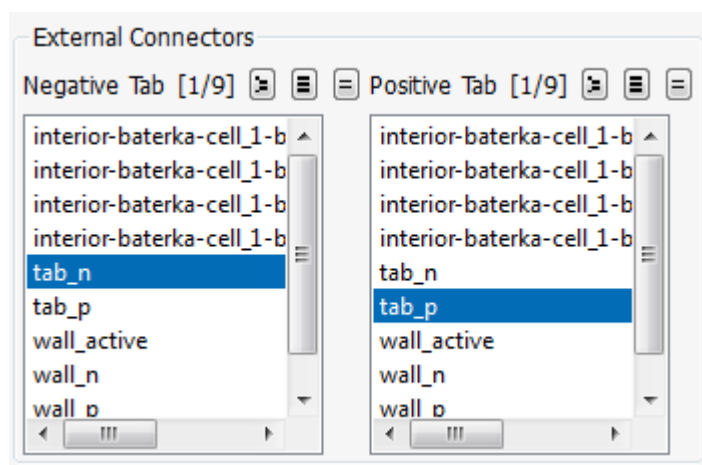
V modelových parametrech je také počítáno s nějakým počátečním vybitím. Byla zvolena hodnota 0.1, což odpovídá 10 % počátečnímu vybití.



Obrázek 31: Nastavení počátečních podmínek simulace

### 3.12.1 Přidělení elektrických kontaktů

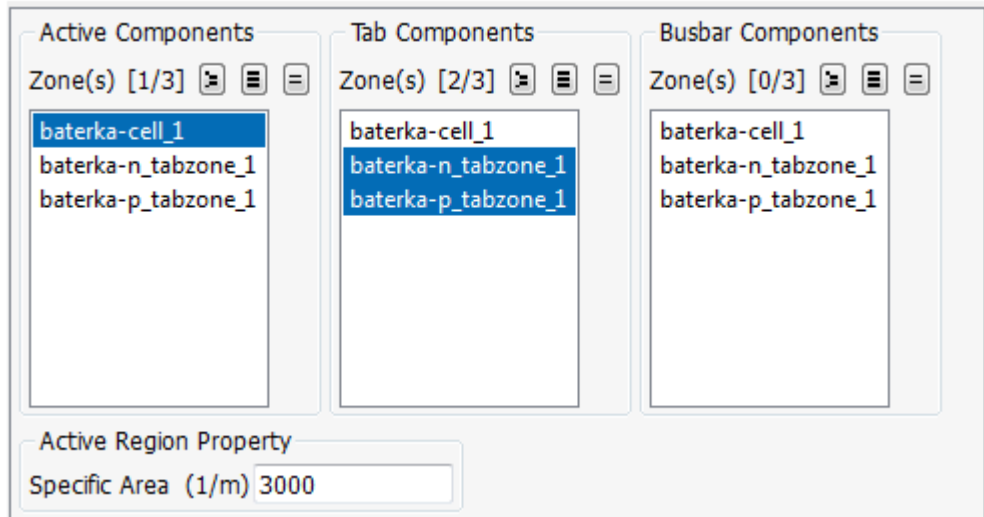
Vytvořené selekce ve výpočetní síti (viz obr. 23) se poté přidělují při nastavování MSMD modelu v záložce elektrických kontaktů, jak můžeme vidět na následujícím obrázku (viz obr. 32).



Obrázek 32: Přidělení elektrických kontaktů

### 3.12.2 Přidělení vodivých zón

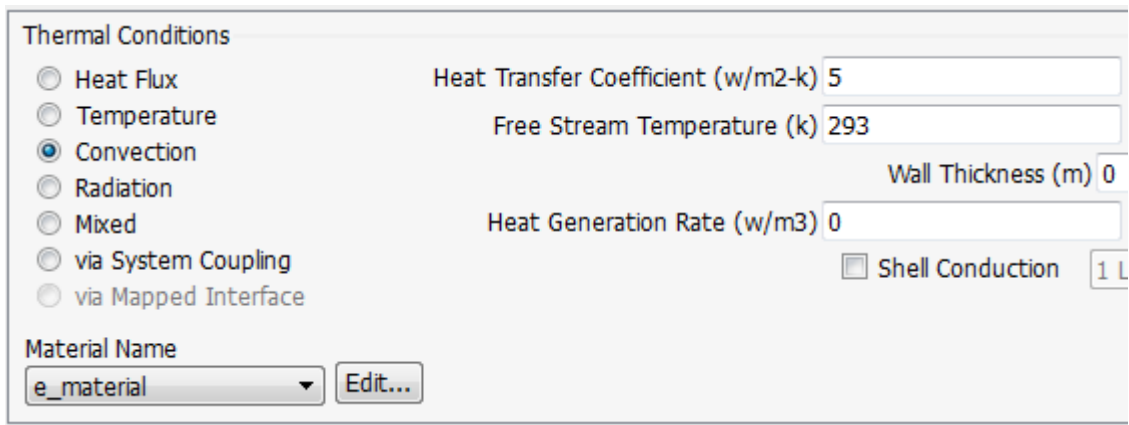
Jednotlivé části vytvořené v geometrii (viz obr. 21) se poté přidělují v nastavování MSMD modelu k vodivým zónám. Jako aktivní komponenta byla v mém případě zvolena „baterka-cell\_1“. Zbylé dvě části se potom přidělily do vedlejší záložky k „Tab komponentám“ (viz obr. 33).



Obrázek 33: Přidělení vodivých zón

### 3.12.3 Nastavení teplotních podmínek

V poslední části nastavování je potřeba nastavit teplotní podmínky jako je počáteční teplota a koeficient pro přestup tepla do okolí (viz obr. 31).

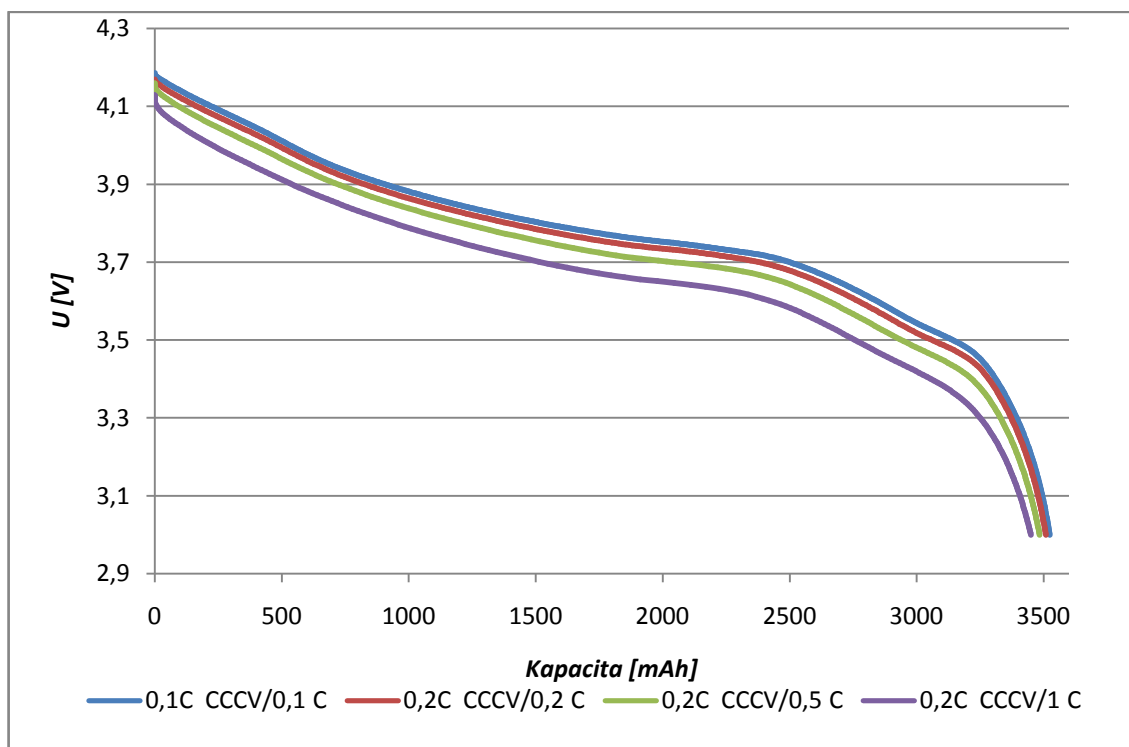


Obrázek 34: Nastavení teplotních podmínek

Moje simulace začínala na teplotě (293 K), což odpovídá zhruba pokojové teplotě (20 °C). Nezbytnou součástí je také zvolit konvekci pro přestup tepla a vhodně nastavit koeficient přestupu tepla.

### 3.13 Porovnání odsimulovaných a naměřených výsledků

Na následujícím obrázku (viz obr. 35) jsou porovnány vybíjecí charakteristiky reálné baterie KOKAM pro různá C. Z grafu je patrné, že baterie je velmi stabilní a vybíjecí charakteristiky mají stejný průběh, pro všechny C. Se zvyšujícím se proudovým zatížením se potenciál vybíjení snižuje, avšak i při nejvyšším zatížení není tento pokles příliš významný. Stejně tak i pokles kapacity není příliš významný. Dosažené kapacity jsou v rozmezí 3523 mAh a 3450 mAh, což představuje snížení kapacity o 2,07 %. Z těchto výsledků vyplývá, že v různých etapách aktuálního zatížení se testované baterie chovají po celou dobu velmi stabilně.

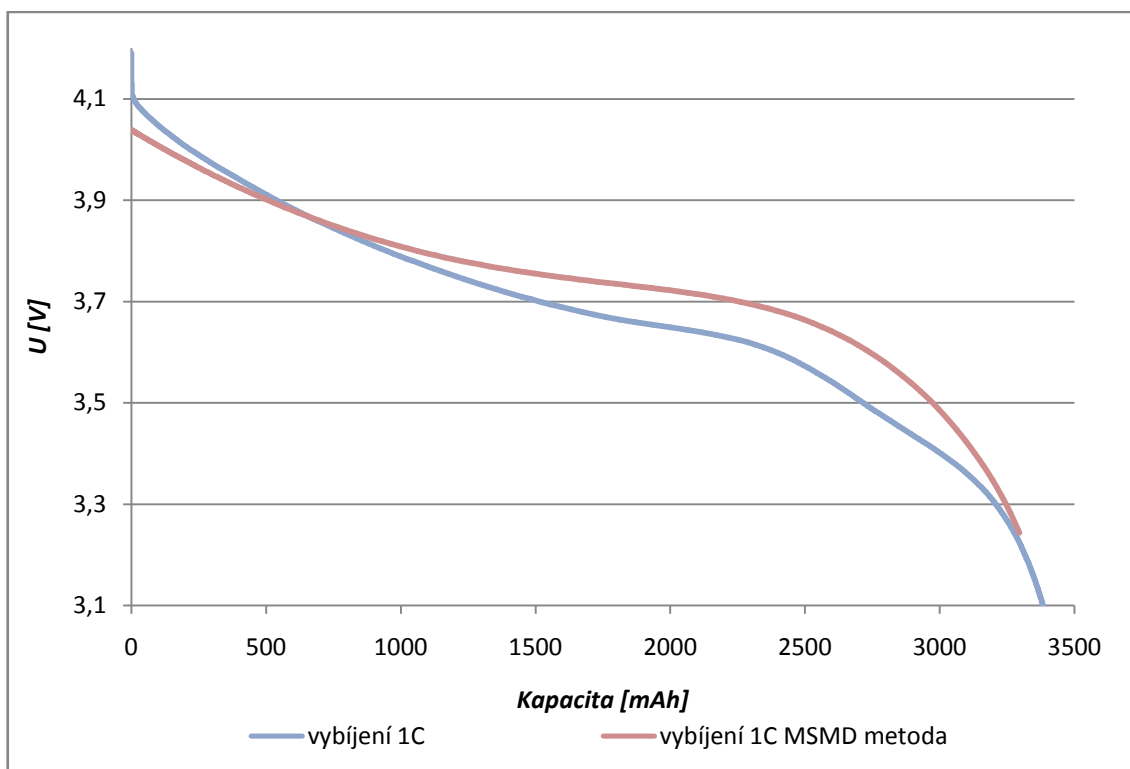


Obrázek 35: Porovnání vybíjecích charakteristik reálné baterie KOKAM pro různá C

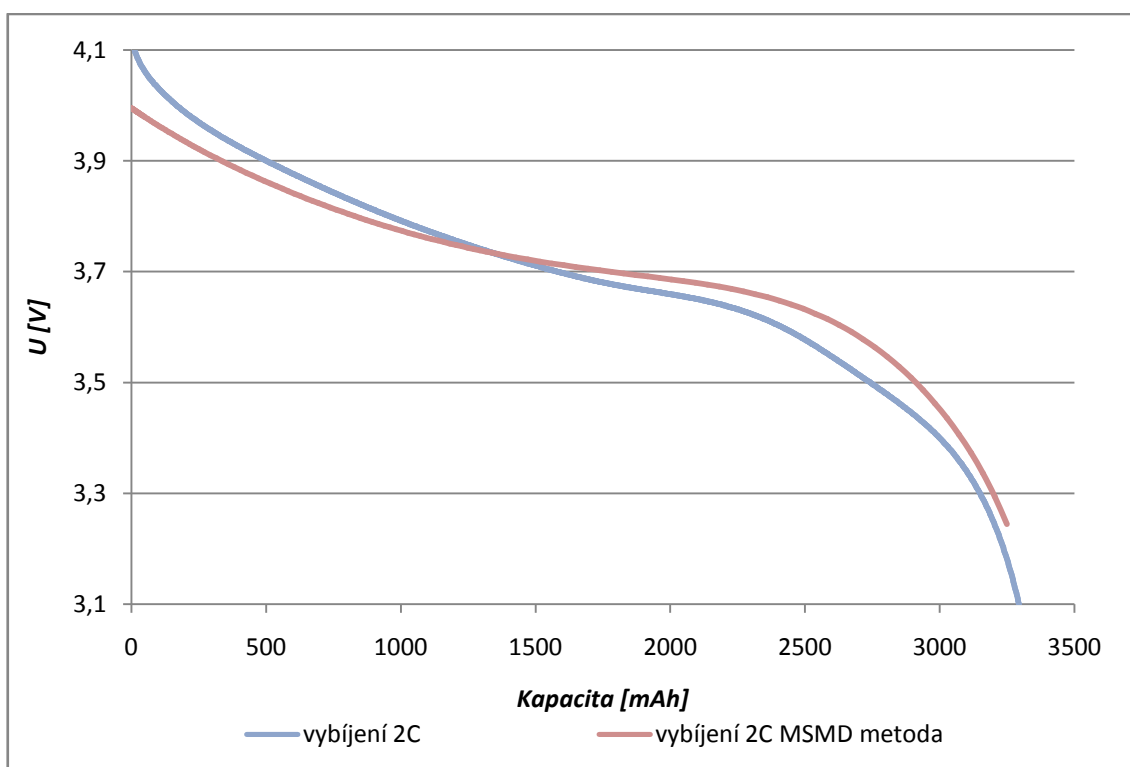
Na následujícím obrázku (viz obr. 36) můžeme vidět rozdíl vybíjecích charakteristik pro 1 C mezi reálnou KOKAM baterií a MSMD modelem. Z grafu je evidentní, že potenciál vybíjení pořízený simulací je mírně vyšší než u reálného měření. Stejně tak i kapacita je v simulaci naměřena vyšší a rozdíl těchto kapacit činí zhruba 9,2 %.

Vybíjecí charakteristiky pro vybíjení 2 C jsou zobrazeny na obrázku (viz obr. 37). Při tomto vybíjení se výsledné charakteristiky dosažené pomocí MSMD modelu nejvíce podobají reálné baterii. Rozdíl kapacity u tohoto měření je nejmenší, než u ostatních dvou měření a činí zhruba 5,4 %.

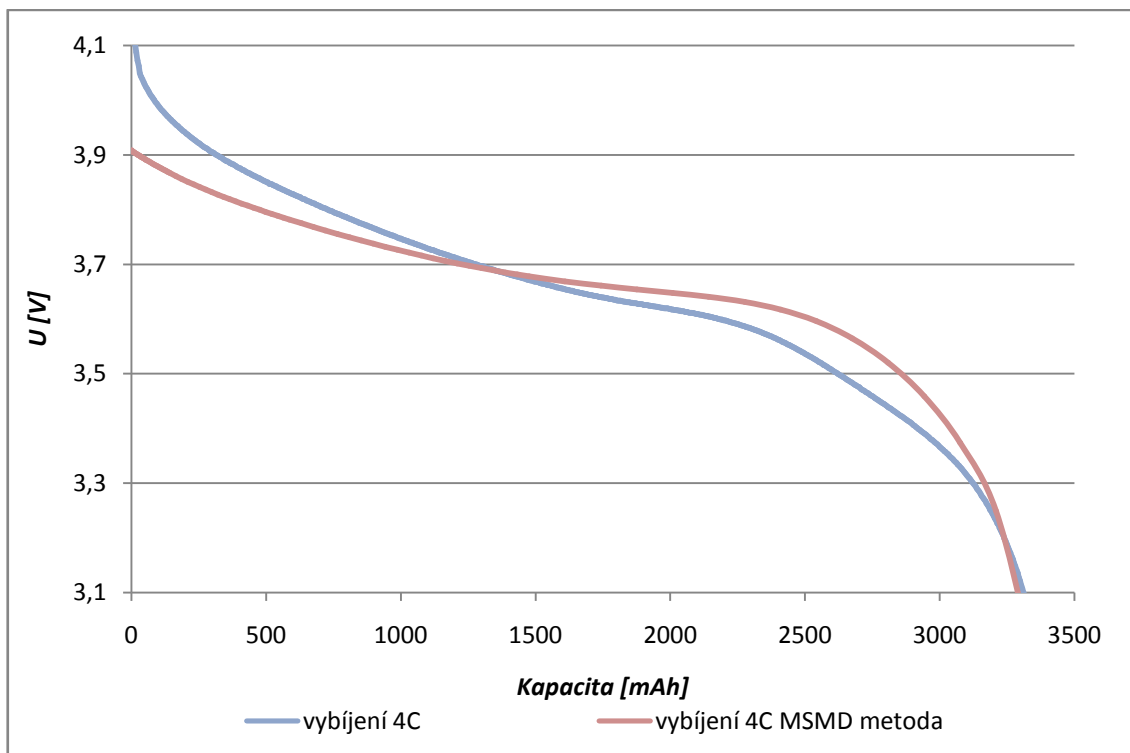




Obrázek 36: Porovnání vybíjecích křivek pro vybíjení 1 C mezi reálnou baterií Kokam (modrá) a MSMD modelem (červená).



Obrázek 37: Porovnání vybíjecích křivek pro vybíjení 2 C mezi reálnou baterií Kokam (modrá) a MSMD modelem (červená).



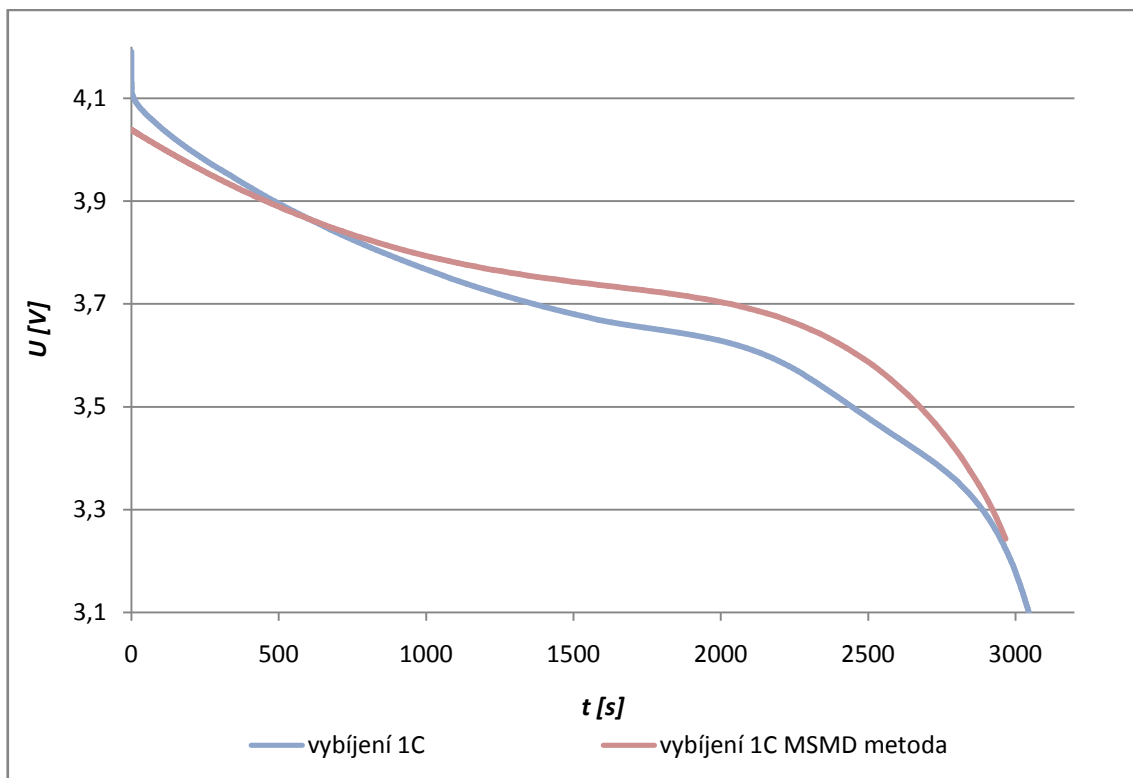
Obrázek 38: Porovnání vybíjecích křivek pro vybíjení 4 C mezi reálnou baterií Kokam (modrá) a MSMD modelem (červená).

Vybíjecí charakteristiky pro vybíjení 4 C jsou porovnány mezi reálnou baterií KOKAM a MSMD modelem ve výše uvedeném obrázku (viz obr. 38). Při tomto vybíjení se výsledky dosažené pomocí MSMD modelu více přibližují reálné baterii, nicméně pořád je potenciál naměřen trochu vyšší, než byl naměřen u reálné baterie. Rozdíl kapacity je zde o trochu větší než u předchozího obrázku a činí zhruba 8,7 %.

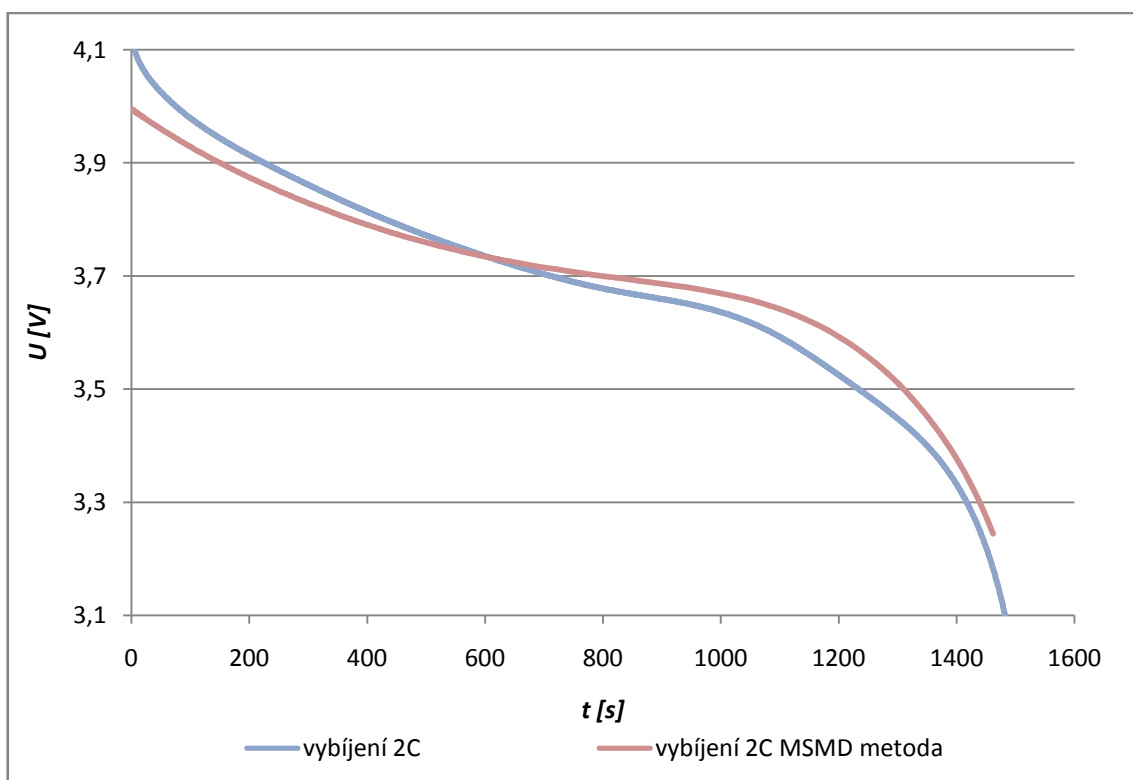
Pro jednotlivé vybíjecí charakteristiky byly také sestrojeny grafické závislosti napětí na čase. Z následujících obrázků je patrné, že čím větším vybíjecím proudem danou baterii vybíjíme, tím rychleji se nám baterie vybíjí. V tabulce 7 jsou porovnány jednotlivé doby vybíjení pro jednotlivá C.

Tabulka 7: Doba vybíjení pro jednotlivá C

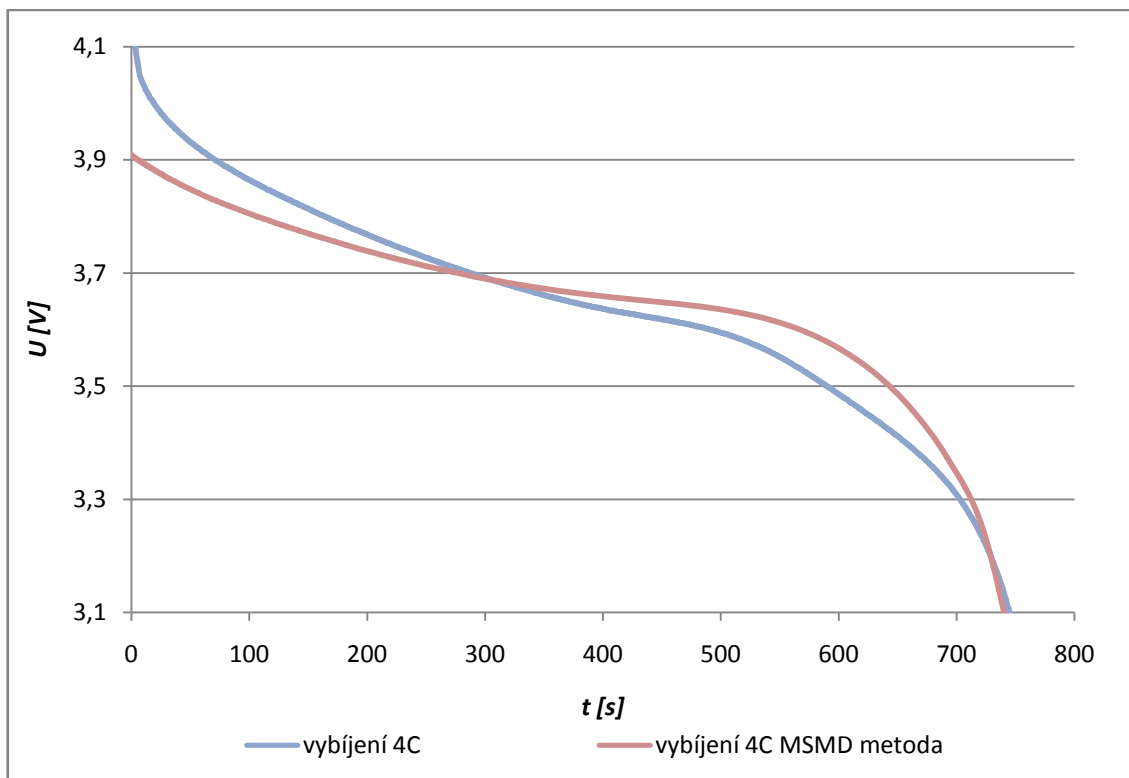
Vybíjecí proud [A]	Doba vybíjení [s]
1 C	3086
2 C	1529
4 C	775



Obrázek 39: Porovnání vybíjecích křivek pro vybíjení 1 C v závislosti napětí na čase.



Obrázek 40: Porovnání vybíjecích křivek pro vybíjení 2 C v závislosti napětí na čase.



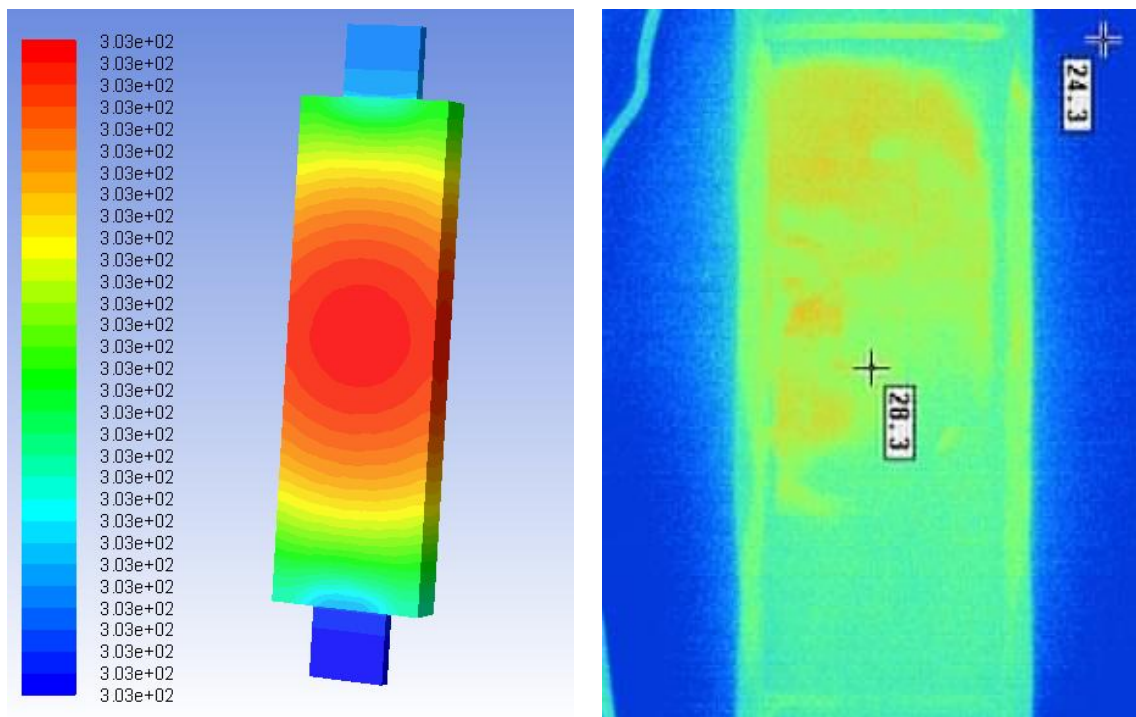
Obrázek 41: Porovnání vybíjecích křivek pro vybíjení 4 C v závislosti napětí na čase.

Na následujících obrázcích jsou porovnány jednotlivé výsledky z rozložení teploty uvnitř baterie během vybíjení. Vždy jsou porovnány teploty získané v simulaci (v kelvinech) a teploty získané pomocí termografické kamery (ve stupních Celsia).

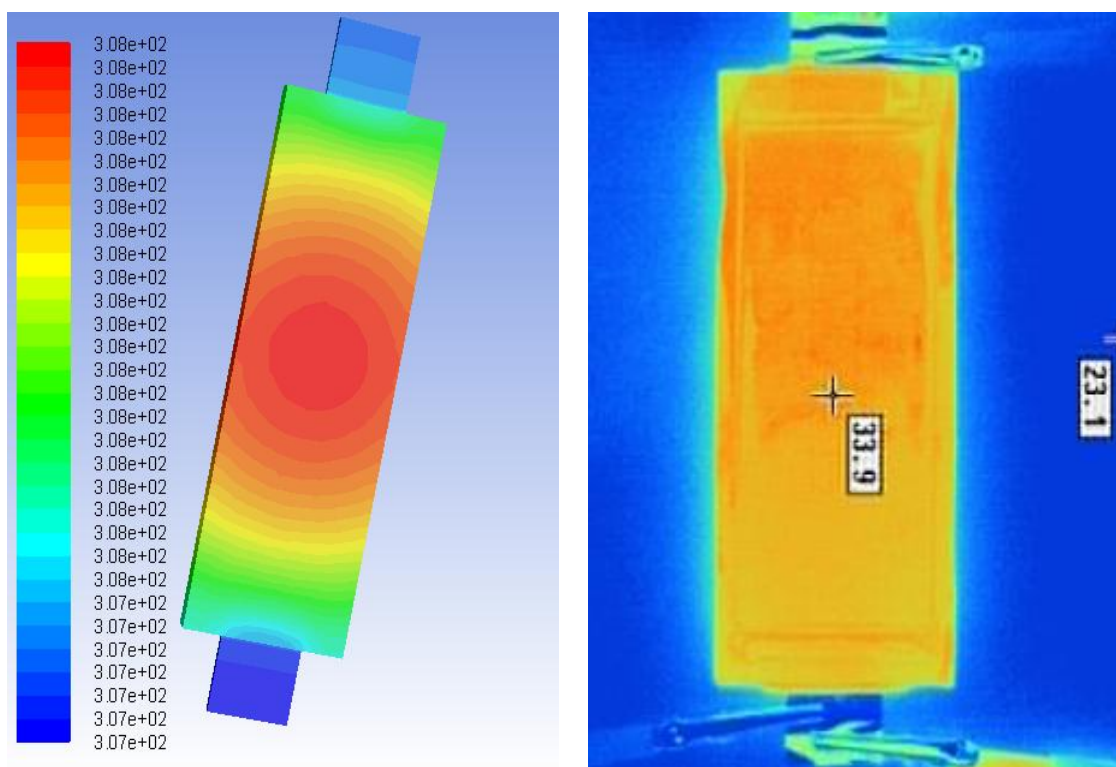
Při vybíjení se v baterii projevují jednotlivé elektrochemické děje, díky kterým se nám generuje teplo, a tím pádem se nám baterie od středu zahřívá. Ačkoliv jsou zde difference mezi rozložením teploty u simulace a reálného měření, numerický model podává velice uspokojiv výsledky. Největší teplotní rozdíl byl naměřen při vybíjení 1 C, kde rozdíl teplot činil 4,87 %.

Tím, že se koukáme na baterii jako na komplexní celek a nepočítáme každou oblast zvlášť, vnášíme do celého systému určitou chybu, která právě může způsobit naši teplotní odchylku. Teplotní profil pro vybíjení 1 C nám zobrazuje obrázek (viz obr. 42).

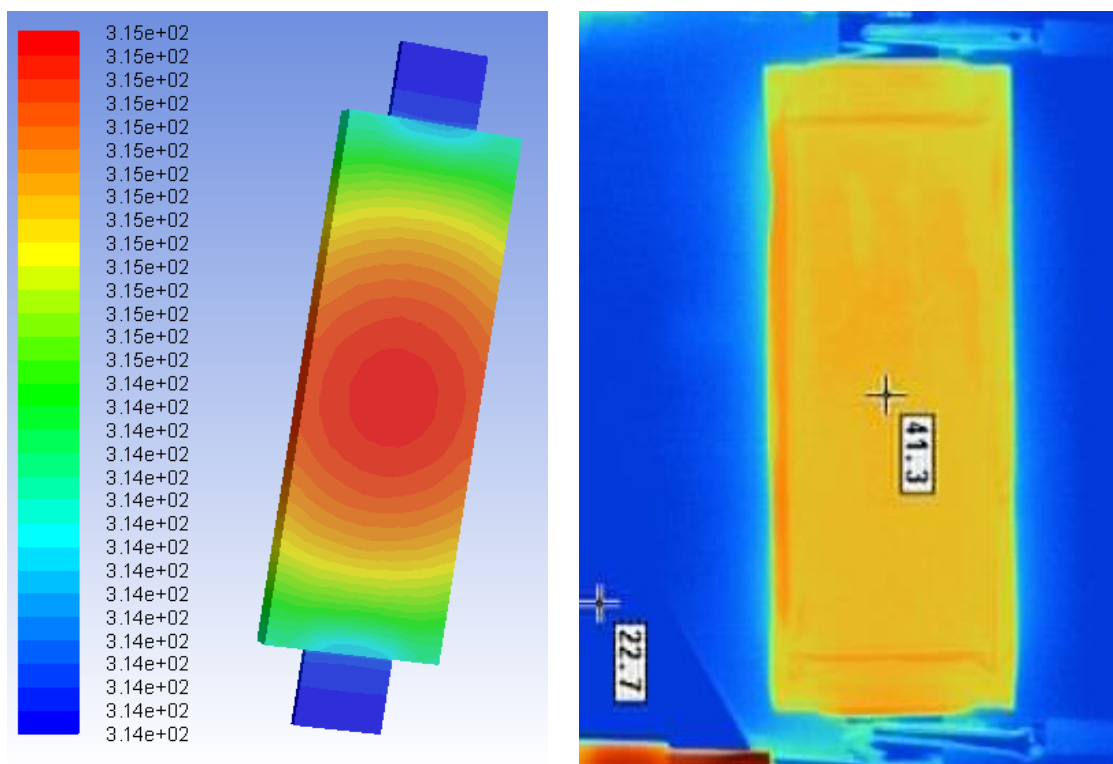
Teplotní profily získané termokamerou pro vybíjení 2 C a 4 C už více korespondují s teplotními profily získanými při simulaci. Na obrázcích je už více patrná generace tepla ze středu baterie, než na teplotním profilu pro 1 C.



Obrázek 42: Rozložení teploty pro vybíjení 1 C mezi MSMD modelem (vlevo) a reálnou baterií (vpravo)



Obrázek 43: Rozložení teploty pro vybíjení 2 C mezi MSMD modelem (vlevo) a reálnou baterií (vpravo)



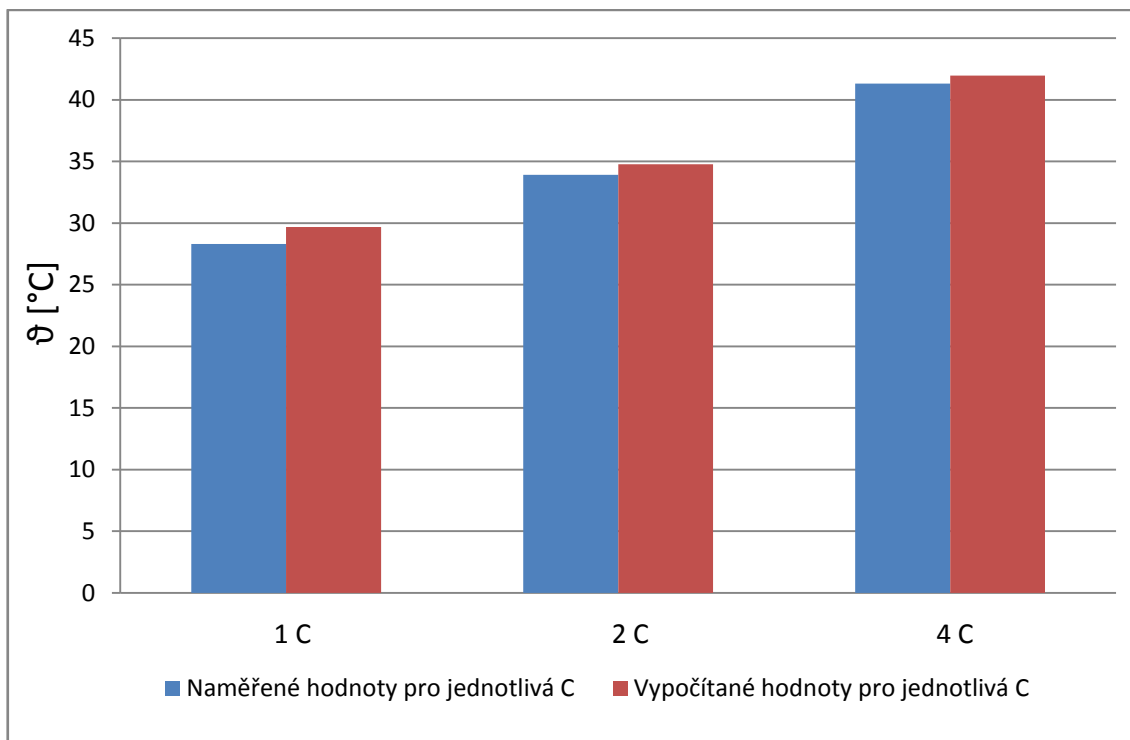
Obrázek 44: Rozložení teploty pro vybíjení 4 C mezi MSMD modelem (vlevo) a reálnou baterií (vpravo)

Tabulka 8: Porovnání naměřených a nasimulovaných teplot během vybíjení pro různá C

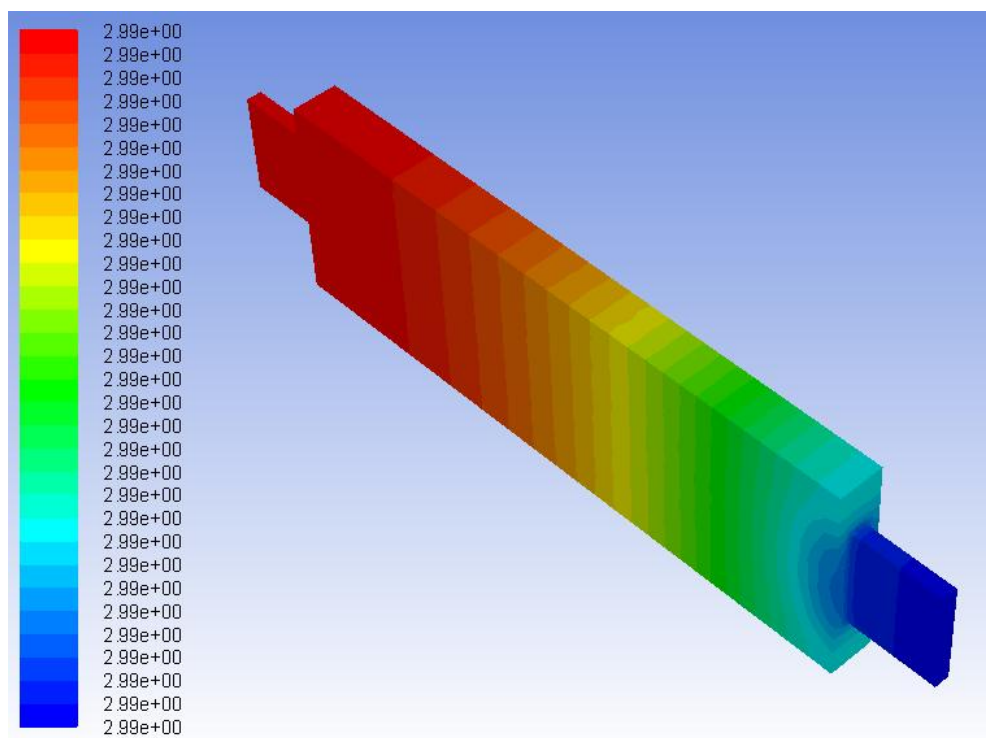
Vybíjecí proud [A]	Naměřená maximální teplota [°C]	Vypočítaná maximální teplota [°C]	Relativní odchylka [%]
1 C	28,3	29,68	4,87
2 C	33,9	34,77	2,51
4 C	41,3	41,97	1,6

Z výše uvedené tabulky je patrné, že naměřené a nasimulované teploty spolu s minimální odchylkou korespondují. Nejvyšší odchylka je naměřena u vybíjení 1 C (4,87 %), naopak nejmenší rozdíl je zaznamenán u vybíjení 4 C (1,6 %).

Na následujícím obrázku můžeme vidět, jak se mění teplota při reálném měření baterie a při simulaci, za použití numerického modelu, v závislosti na jednotlivých vybíjecích proudech.

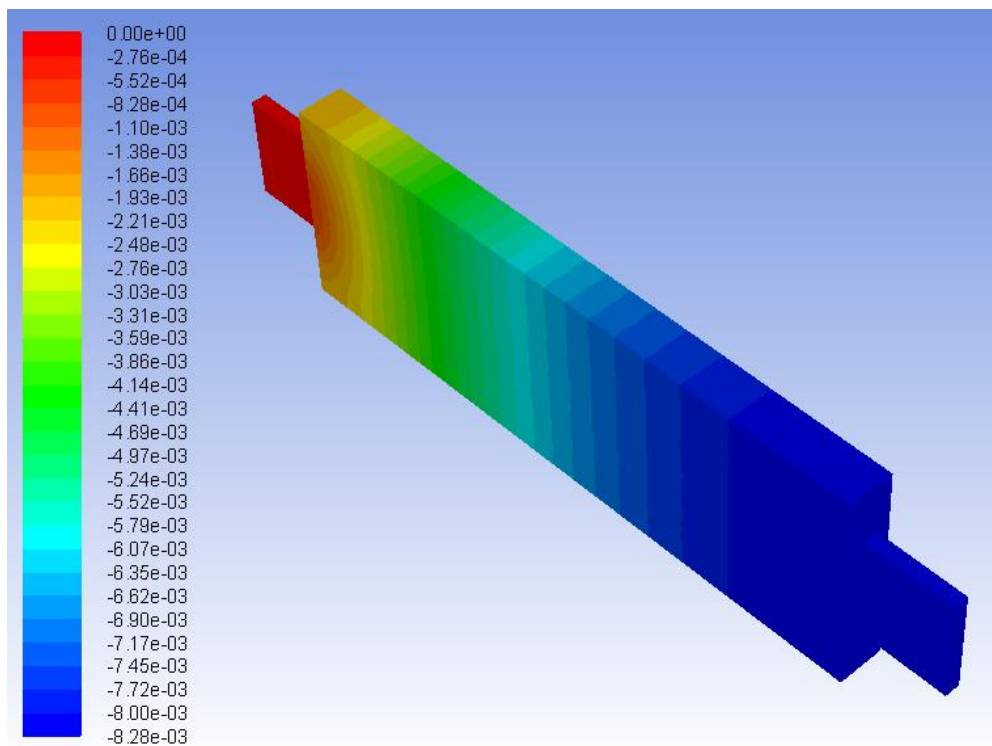


Obrázek 45: Porovnání naměřených a nasimulovaných teplot během vybíjení pro různá C



Obrázek 46: Rozložení potenciálu pro kladnou elektrodu

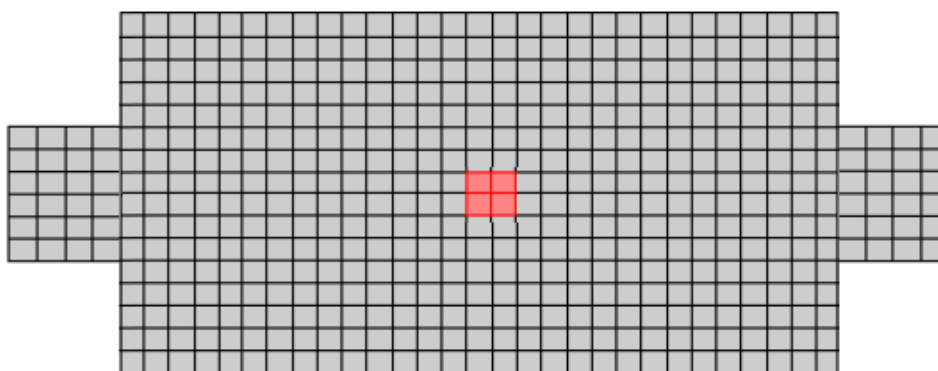
Obrázky 46 a 47 pak ukazují rozložení potenciálu  $\varphi^+$  a  $\varphi^-$  podle rovnice (2.5) pro kladnou a zápornou elektrodu.



Obrázek 47: Rozložení potenciálu pro zápornou elektrodu

### 3.14 Nail test

Pro simulaci vnitřního a vnějšího zkratu v baterii lze použít NTGK model. Principiálně se jedná tedy o záměrné narušení nebo protržení obalu baterie a tím dosažení zkratu uvnitř baterie. V ANSYSu to funguje tak, že v námi vytvořené geometrii si označíme oblast, ve které chceme baterii narušit (viz červený čtvereček). Tím vlastně řekneme ANSYSu, že v této části bude simulovat protržení baterie.



Obrázek 48: Označená oblast pro simulaci vnitřního a vnějšího zkratu

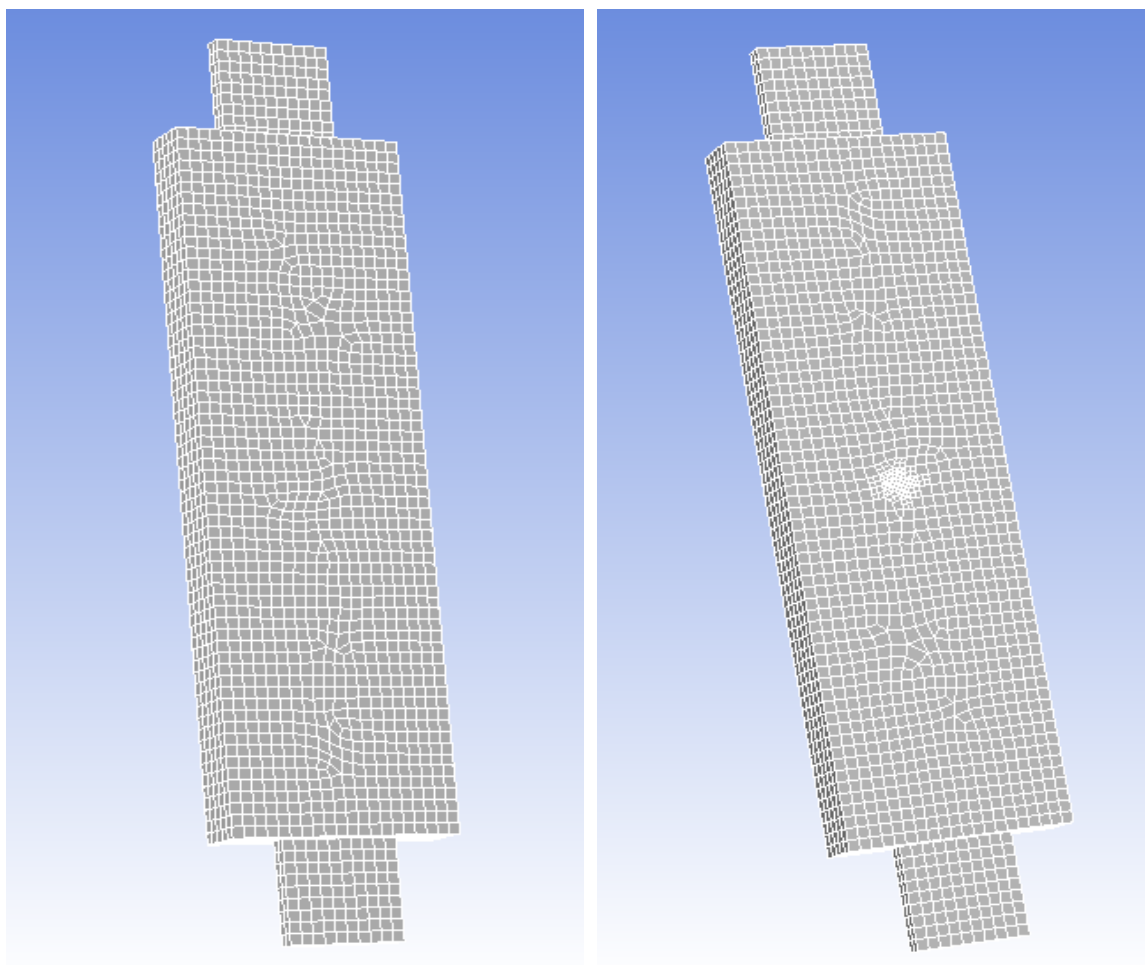
Než bylo možné vůbec danou simulaci provést, bylo třeba upravit geometrii baterie. Namísto původních čtyřstěnných prvků (tetrahedronů) byly použity prvky



šestistěnné (hexaedry) a zvolena hrubší síť, která byla ještě v místě průrazu adaptována. Výpočetní síť tedy vypadá následovně (viz obr. 49).

### 3.14.1 Adaptivní metoda síťování

Adaptace sítě je důležitou součástí efektivního využívání simulace. Selektivní vylepšení sítě usnadňuje uživatelům získávat vysoce kvalitní výsledky bez zbytečně velkých časových investic během procesu řešení. Jedním z nástrojů, které mohou pomoci v tomto procesu, je adaptivní síťování, což je nástroj, který se používá pro iterační změnu nastavení sítě pro váš model bez aktivního zásahu uživatele. [17]

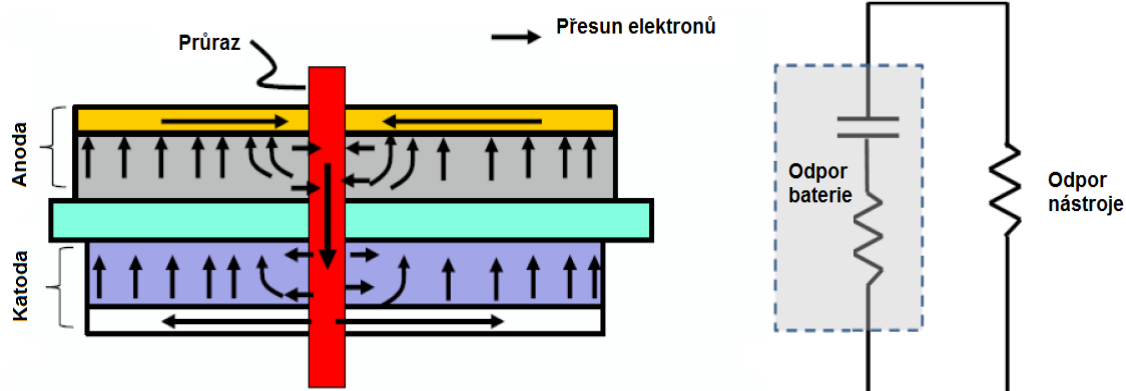


Obrázek 49: Výpočetní síť baterie pro „nail“ test před adaptací (vlevo) a po adaptaci (vpravo).

ANSYS používá dvě různé metody síťování: h-adaptivní a p-adaptivní. H-adaptivní síťování fyzicky upravuje velikost sítě buňky v oblastech modelu, kde je zapotřebí menších buněk, zatímco p-adaptivní síťování nastavuje pořadí polynomů sítě pro zvýšení přesnosti. To vše se provádí automaticky softwarem na základě požadované přesnosti definované uživatelem. Software dosáhne cílové přesnosti měřením změny

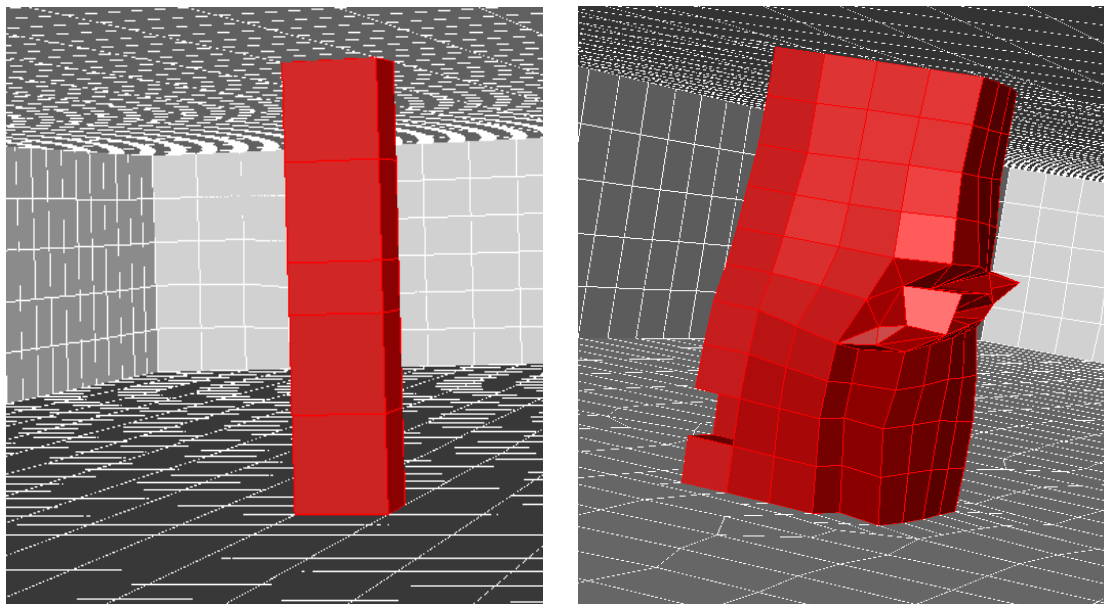
napětí a zastaví iterace, pokud se dvě po sobě jdoucí hodnoty liší o méně než danou hodnotu. [17]

Schéma vnitřního zkratu si můžeme představit jako náhradní obvod, který se skládá z odporu baterie a elektrického odporu nástroje, kterým do baterie pronikáme.



Obrázek 50: Schéma vnitřního zkratu (vlevo) a náhradního obvodu (vpravo)

Jak vypadá vybraná oblast (červeně označený kvádr) pro testování průrazu v ANSYSu ukazuje následující obrázek, kde je vidět pohled zevnitř baterie. Tato vyznačená oblast nám tedy říká, že přesně tímto místem baterie daný průraz půjde.



Obrázek 51: Vyznačená oblast uvnitř baterie pro simulaci průrazu před adaptací (vlevo) a po adaptaci (vpravo)

Za normálního stavu je kladná a záporná elektroda od sebe oddělena separátorem, obvykle z tenkého polymerního materiálu, který neumožňuje pohyb elektronů přímo mezi elektrodami, ale je iontově propustný.

V případě vnitřního zkratu, vzniklého penetrací nějakého nástroje v důsledku havárie, je separátor lokálně protržen a elektrony tak lokálně cestují přímo mezi elektrodami. Kromě proudu, který je k dispozici na elektrodách, tak vzniká i sekundární proud vzniklý z elektrochemických reakcí, který teče zkratovou oblastí.

Intenzita zkratového proudu se tak dá fundamentálně popsat přes proměnu volumetrického kontaktního odporu, který je popsán jako  $rc/a$ , kde  $rc$  je kontaktní odpor elektrodového plátku [ $\Omega\text{m}^2$ ], a  $a$  je specifická plocha elektrodového plátku v objemu celé baterie [1/m].

Přenesená proudová hustota z rovnic (2.3, 2.4) a teplo vzniklé zkratem je:

$$j_{\text{short}} = a j'_{\text{short}} = a(\Phi_+ - \Phi_-)/r_c \quad (2.29)$$

$$\dot{q}_{\text{short}} = a(\Phi_+ - \Phi_-)^2/r_c \quad (2.30)$$

V následujících tabulkách můžeme vidět jednotlivé bilance získané během simulace.

Tabulka 9: Odporová bilance

Externí odpor	$R_{ext.}$	0,5 $\Omega$
Odpor ocelového nástroje	$R_{nast.}$	5e-08 $\Omega$

Tabulka 10: Proudová bilance

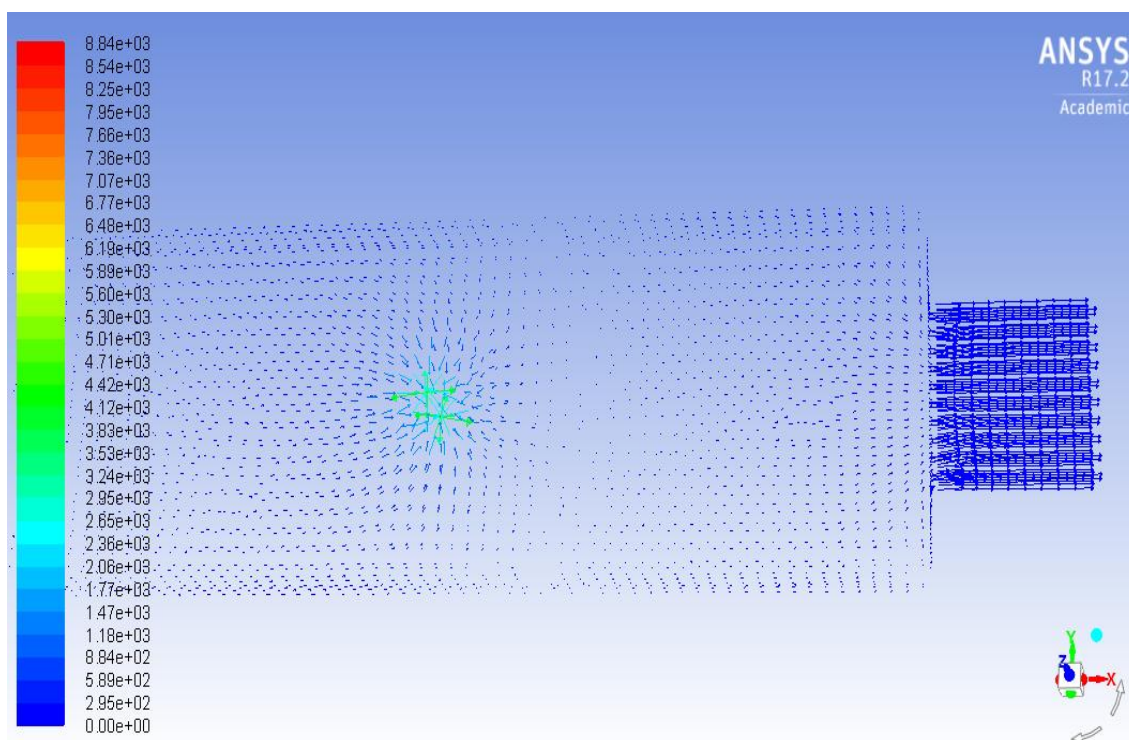
Proud vzniklý zkratem	$I_{zkrat}$	2,7616 A
Proud z echem. reakce	$I_{echem.}$	10,7017 A

Tabulka 11: Tepelná bilance

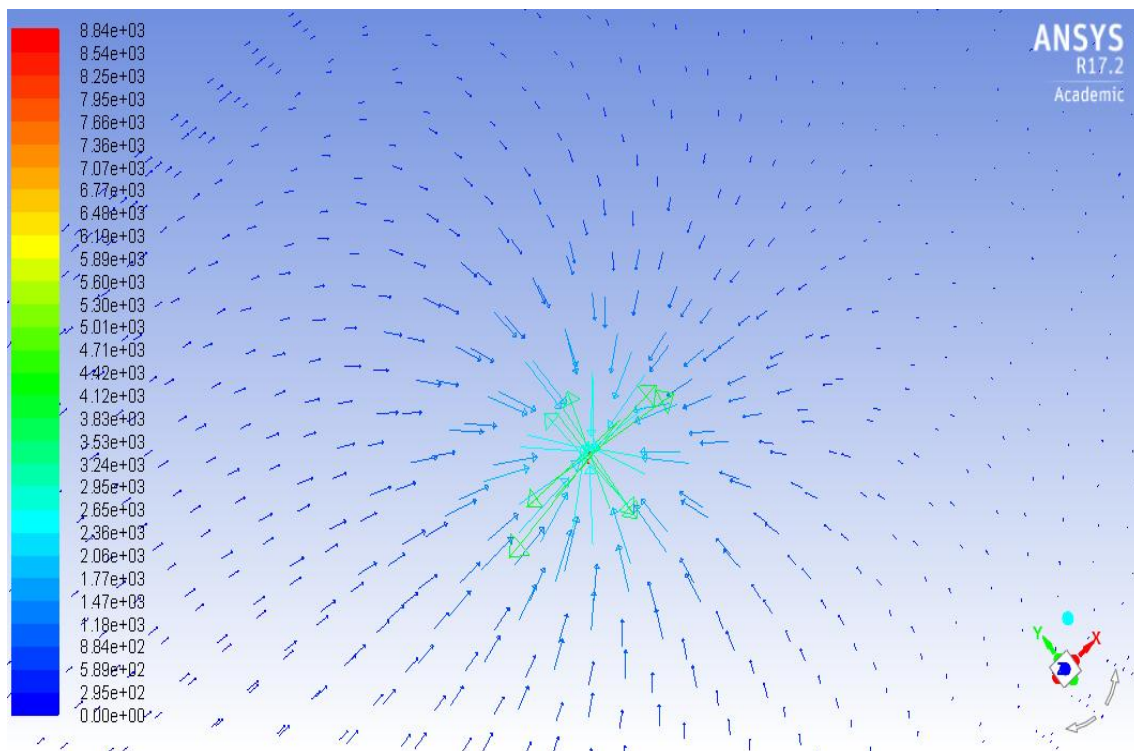
Ohmické ztráty	$Q_{ohm}$	0,0274 W
Elektrochemické ztráty	$Q_{echem.}$	1,1606 W
Zkratové ztráty	$Q_{zkrat.}$	10,9705 W
Celkové ztráty	$Q_{celk.}$	12,1585 W

Můžeme si všimnout, jak při zkratu nárazově lokálně roste teplota baterie a ta se pak může nadále nekontrolovaně zvyšovat, až může dojít k požáru. Dochází k rozkladným exotermickým reakcím. Uvědomme si, že lithiovou baterii nemůžeme hasit vodou!

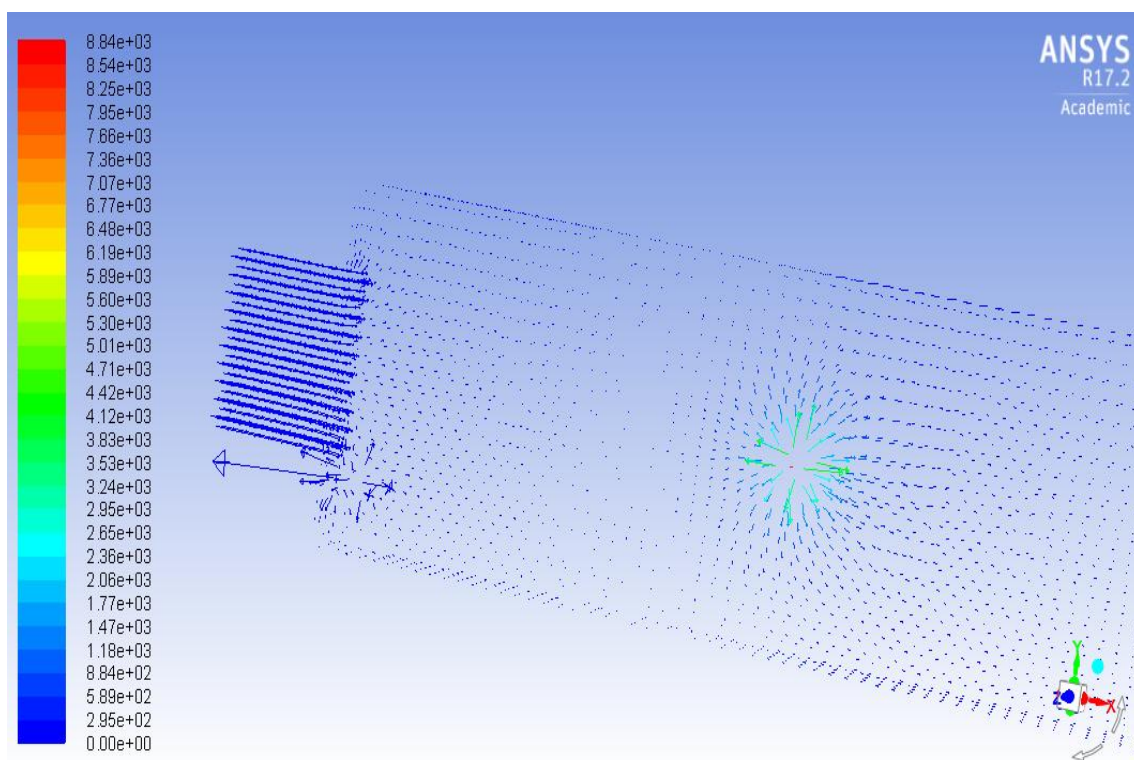
Testy mechanického průrazu jsou velmi obtížně reprodukovatelné. K prozkoumání tepelného managementu při tomto testu můžeme s výhodou použít nekonvenční metody počítačové simulace a můžeme tak tyto procesy, alespoň základně, popsat. Je třeba brát na zřetel, že výsledek simulace je vždy jen přibližným řešením, nicméně pro zjištění, jak bude vypadat teplotní pole při zkratu, jsou tyto modely více než postačující.



Obrázek 52: Proudová hustota na kladné elektrodě

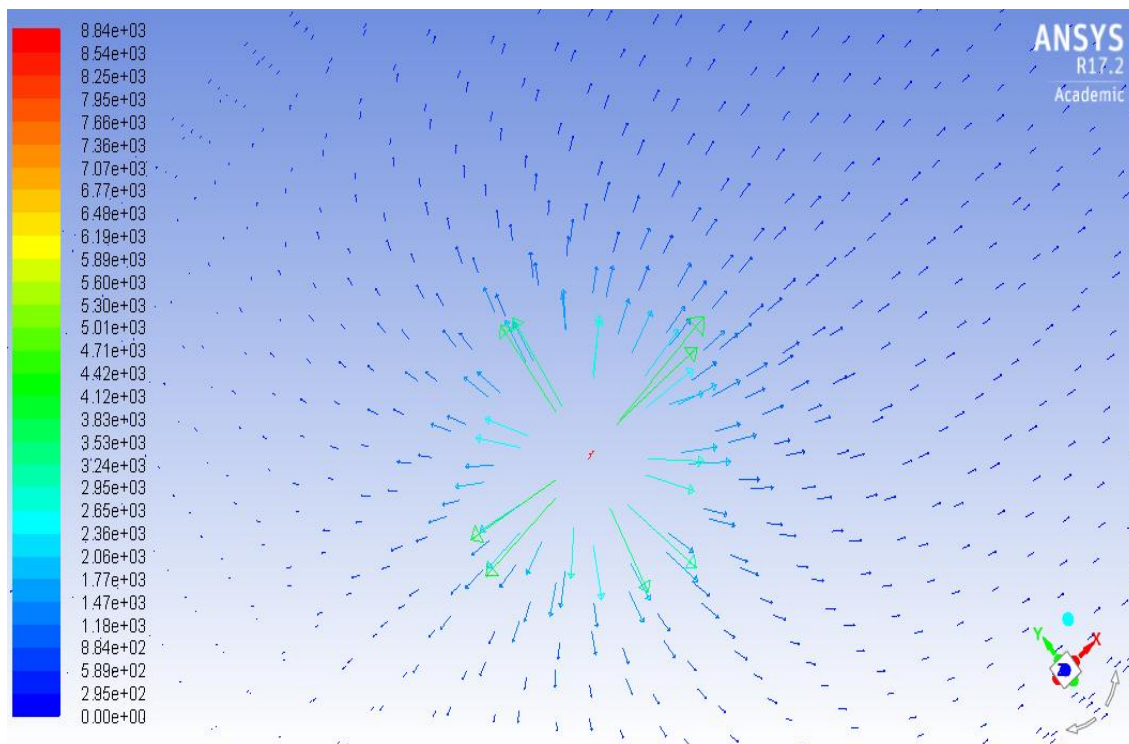


Obrázek 53: Detail proudové hustoty na kladné elektrodě v místě průniku



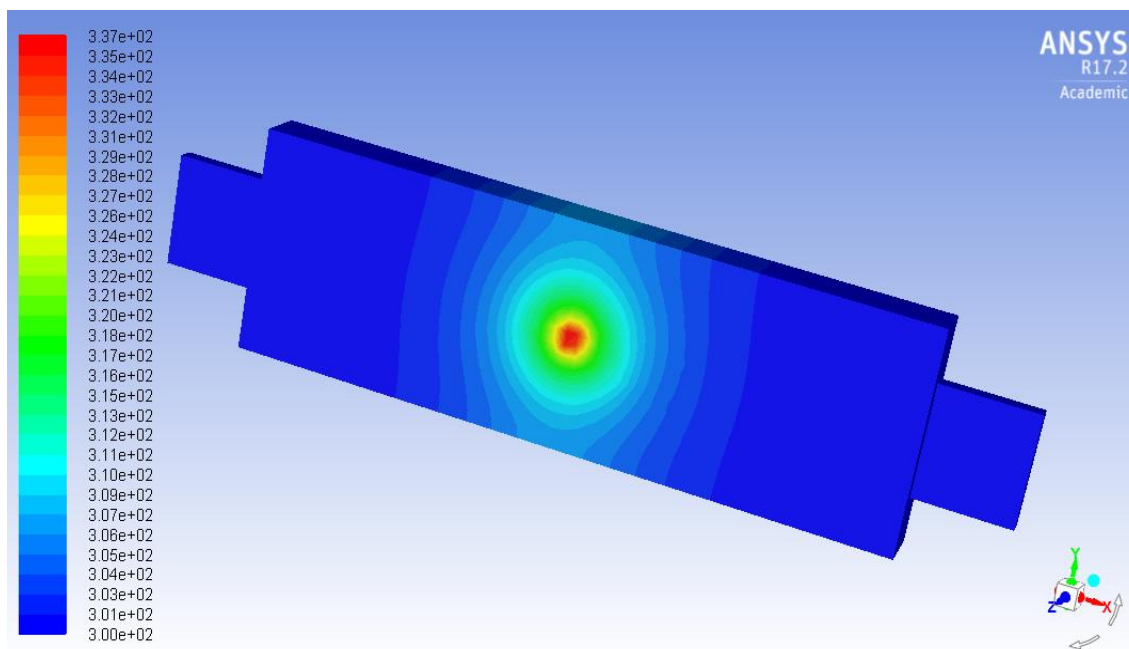
Obrázek 54: Proudová hustota na záporné elektrodě





Obrázek 55: Detail proudové hustoty na záporné elektrodě v místě průniku

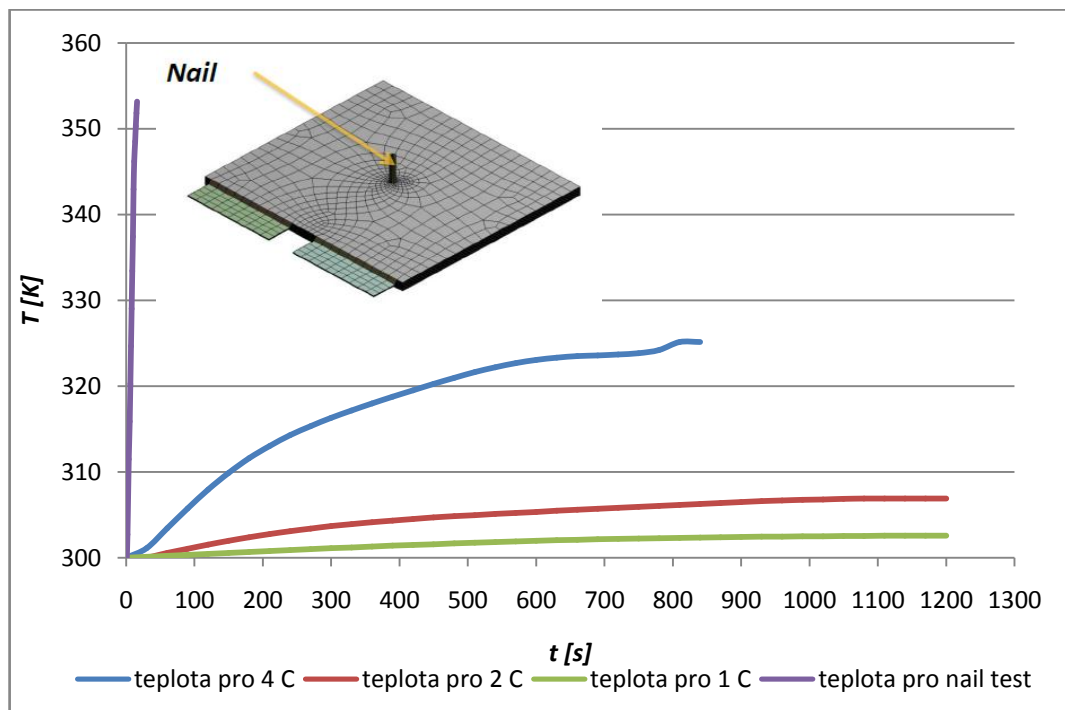
Při provádění „nail“ testu dochází k protržení a narušení struktury baterie. Toto narušení způsobí, že se nám začne baterie okamžitě rapidně zahřívat a tím pádem začne i hořet, což je vidět na následujícím obrázku (viz obr. 56).



Obrázek 56: Rozložení teploty při „nail“ testu

Následující obrázek zobrazuje porovnání teplot při vybíjení pro jednotlivá C

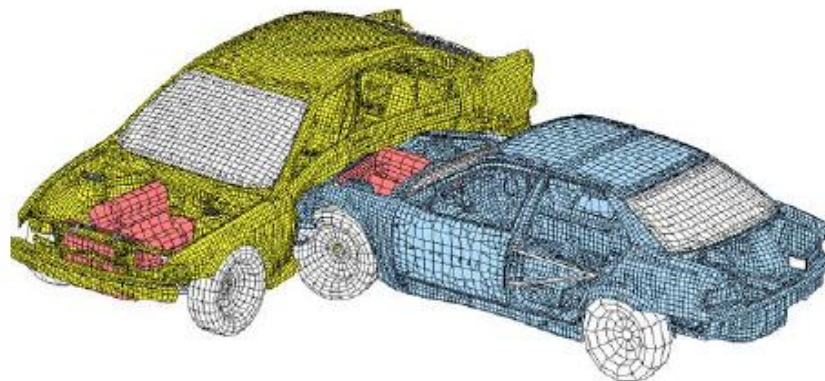
a „nail“ test. Z obrázku je patrné, že čím větším vybíjecím proudem baterii vybíjíme, tím více se nám baterie zahřívá. Zahřívání při „nail“ testu je znázorněno pouze do určitého časového okamžiku. Teplota jinak stále rapidně stoupala.



Obrázek 57: Porovnání teplot pro jednotlivé vybíjení a „nail“ test

### 3.15 Metoda konečných prvků (MKP)

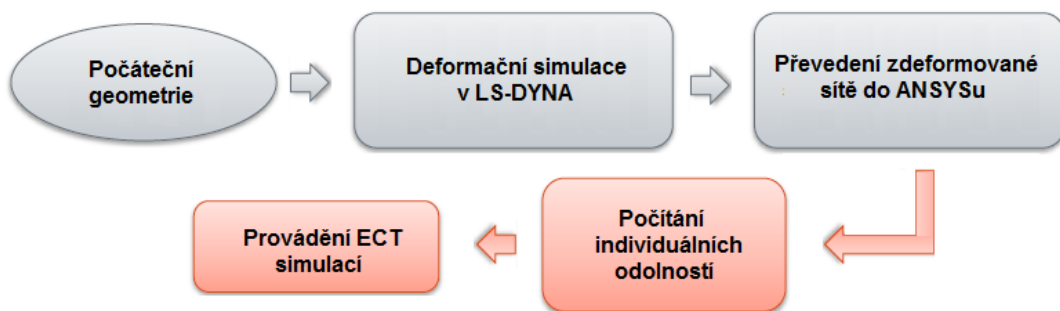
Metoda konečných prvků (MKP) je numerická metoda určená pro výpočtáře sloužící k různým simulacím na vytvořeném fyzikálním modelu. Jedná se například o deformace, rozložení napětového pole, proudění tepla, proudění tekutin, stabilitu konstrukcí apod.



Obrázek 58: „Crash“ test

Metoda konečných prvků tedy vlastně umožňuje daný výrobek odzkoušet, aniž by byl vyrobený jeho prototyp. Díky tomu je možné zjistit parametry v jednotlivých uzlových bodech a tím tak odhalit například nedostatečně dimenzovaná místa apod. Počítačové ověření vlastností výrobku je vždy levnější variantou, než daný test zkoušet přímo na daném prototypu či hotovém výrobku. Proto se tato metoda hojně využívá. [22]

Při vytváření simulace pro „crash“ test je prvním krokem nutné udělat počáteční geometrii, na které bude deformace provedena. Vytvořenou geometrii poté importujeme do LS-DYNA, ve kterém „crash“ test provedeme. Zdeformovanou síť je třeba převést do programu ANSYS, což bývá problematické, protože LS-DYNA a ANSYS nejsou zcela kompatibilní. Z deformované sítě lze poté počítat individuální odolnosti a provádět ECT simulace.



Obrázek 59: Přístup pro mechanické propojení s ECT

### 3.15.1 Rovnice rovnováhy

Tyto rovnice jsou podmínkami rovnováhy elementárního vnitřního prvku, na které kromě složek napětí působí vnější objemová síla (např. gravitační) o složkách  $o_x$ ,  $o_y$ ,  $o_z$  [ $\text{N}\cdot\text{m}^{-3}$ ]. Představují vzájemnou vazbu mezi složkami napětí, která musí být splněna vždy bez ohledu na typ materiálu, velikost deformací apod. Uvádíme je pro případ statického zatěžování:

$$\frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z} + o_x = 0 \quad (2.31)$$

$$\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_y}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial z} + o_y = 0 \quad (2.32)$$

$$\frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_z}{\partial z} + o_z = 0 \quad (2.33)$$



### 3.15.2 Rovnice geometrické

Jedná se o vztahy vytvářející vazbu mezi složkami posuvů a přetvoření a uvedeme je ve tvaru, použitelném v případě malých přetvoření (řádu 10<sup>-2</sup> a menším):

$$\varepsilon_x = \frac{\partial u}{\partial x} \quad (2.34)$$

$$\varepsilon_y = \frac{\partial v}{\partial y} \quad (2.35)$$

$$\varepsilon_z = \frac{\partial w}{\partial z} \quad (2.36)$$

$$\gamma_{xy} = \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \quad (2.37)$$

$$\gamma_{yz} = \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \quad (2.38)$$

$$\gamma_{zx} = \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \quad (2.39)$$

### 3.15.3 Konstitutivní vztahy

Představují vztah mezi deformací a napjatostí. Opět je uvedeme v nejběžnějším tvaru pro lineárně pružný, izotropní Hookovský materiál, jehož vlastnosti jsou určeny dvěma nezávislými materiálovými konstantami - modulem pružnosti v tahu  $E$  a Poissonovým číslem  $\mu$ :

$$\varepsilon_x = \frac{1}{E} [\sigma_x - \mu(\sigma_y + \sigma_z)] \quad (2.40)$$

$$\varepsilon_y = \frac{1}{E} [\sigma_y - \mu(\sigma_x + \sigma_z)] \quad (2.41)$$

$$\varepsilon_z = \frac{1}{E} [\sigma_z - \mu(\sigma_x + \sigma_y)] \quad (2.42)$$

$$\gamma_{xy} = \frac{1}{G} \tau_{xy} \quad (2.43)$$

$$\gamma_{yz} = \frac{1}{G} \tau_{yz} \quad (2.44)$$

$$\gamma_{zx} = \frac{1}{G} \tau_{zx} \quad (2.45)$$

Modul pružnosti ve smyku  $G$  není nezávislou materiálovou veličinou a můžeme jej určit ze vztahu:

$$G = \frac{E}{2(1 + \mu)} \quad (2.46)$$

### 3.16 Výpočet tepelné roztažnosti a Youngova modulu

V ANSYSu je možné také simulovat „nafouknutí“ baterie. Proto, aby tato simulace mohla být provedena, bylo zapotřebí vypočítat některé další parametry pomocí stejné rovnice, jako byla použita pro tepelnou vodivost, tepelnou kapacitu a elektrickou vodivost (viz 2.45). To nám umožní tedy získat komplexní parametry tepelné roztažnosti a Youngova modulu.

$$x_{eff} = \frac{0,5 x_c^p \delta_c^p + x_e^p \delta_e^p + x_s \delta_s + x_e^n \delta_e^n + 0,5 x_c^n \delta_c^n}{\delta_{total}} \quad (2.47)$$

#### 3.16.1 Výpočet celkových parametrů

Dosazením do rovnice (2.45) získáme celkové parametry:

$$\alpha = \frac{(0,5 * 0,0000238 * 840) + (0,0000086 * 2440) + (0,00002 * 920) + (0,0000086 * 430) + (0,5 * 0,0000167 * 110)}{8522} \quad (2.48)$$

$$= 6,335 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$$

$$E = \frac{(0,5 * 70 * 840) + (0,0011 * 2440) + (0,235 * 920) + (0,0011 * 430) + (0,5 * 130 * 110)}{8522} \quad (2.49)$$

$$= 4,28 \text{ GPa}$$

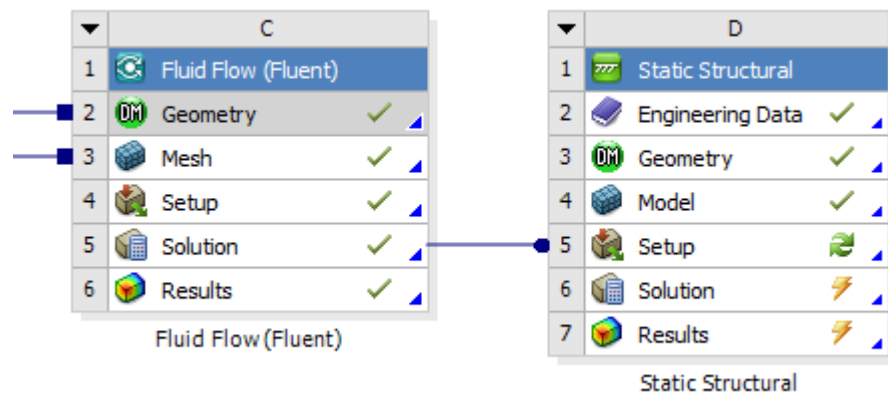
Pro Poissonovu konstantu byl zvolen průměr materiálových hodnot. Celková hodnota tedy vyšla 0,35. Materiálové vlastnosti článku včetně výpočtů celkových parametrů jsou zobrazeny v následující tabulce (viz tab. 12).

Tabulka 12: Materiálové vlastnosti článku

Oblast	P <sub>c</sub>	P <sub>e</sub>	S	N <sub>e</sub>	N <sub>c</sub>	Celkem
tepelná roztažnost [K <sup>-1</sup> ]	2,38E-05	8,60E-06	2,00E-05	8,60E-06	1,67E-05	6,335E-06
Youngův modul [GPa]	7,0E+01	1,10E-03	2,35E-01	1,10E-03	1,30E+02	4,28E+00
Poissonova konstanta [-]	0,33	0,33	0,38	0,33	0,35	0,35

### 3.17 Schéma propojení

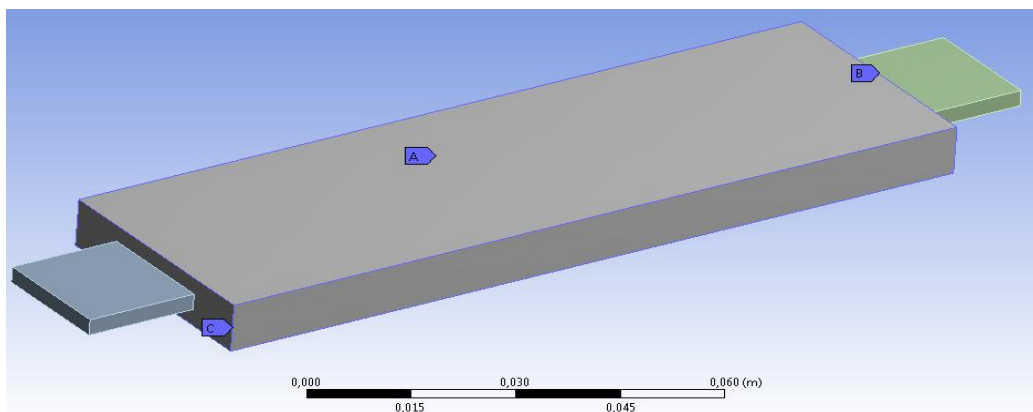
Schéma zapojení je obdobné jako u předchozího modelování s tím rozdílem, že je zde navíc použit blok „Static Structural“, do kterého je přenesena celá geometrie včetně výpočetní sítě apod. V tomto bloku (blok D) je tedy možné simulovat „nafouknutí“ celé baterie.



Obrázek 60: Schéma propojení

#### 3.17.1 Geometrie a síť modelu

Výpočetní síť a geometrie zůstává úplně stejná jako u předchozího modelování s tím rozdílem, že jsou z důvodu tepelné roztažnosti v geometrii modelu zafixované hrany baterie. Následující obrázek ukazuje geometrii baterie včetně zafixovaných hran.

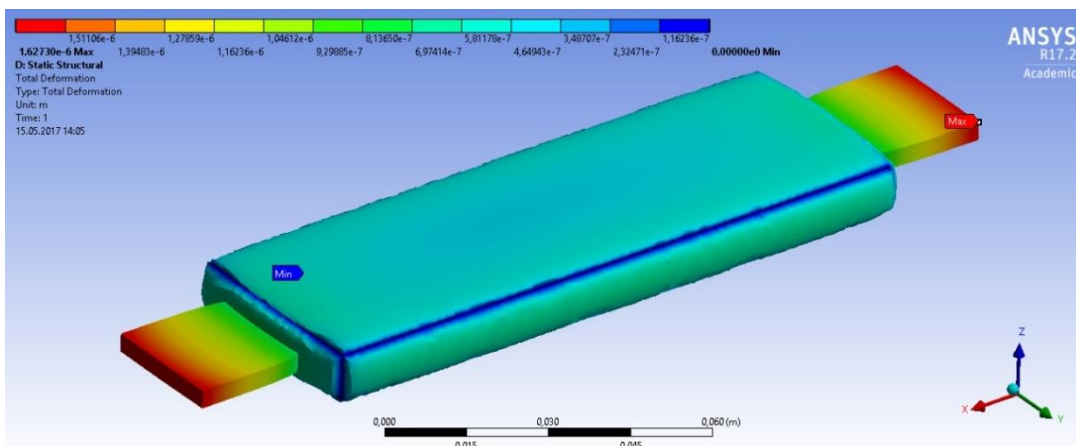


Obrázek 61: Geometrie baterie se zafixovanými hranami

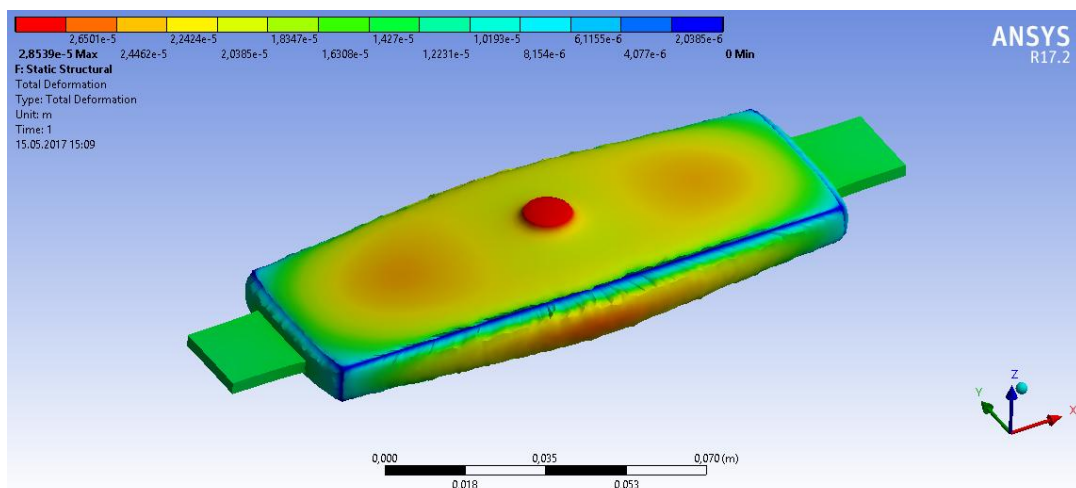
#### 3.17.2 Simulace modelu baterie

Na následujících obrázcích jsou zobrazeny jednotlivé deformační stavy v modelu pro baterii, která je zatížena standardně 1C, a baterii, která je zatížena „nail“ testem při 80 °C. Z obrázků je patrné, že deformace vzniklé během průrazu více ovlivňují vnitřek

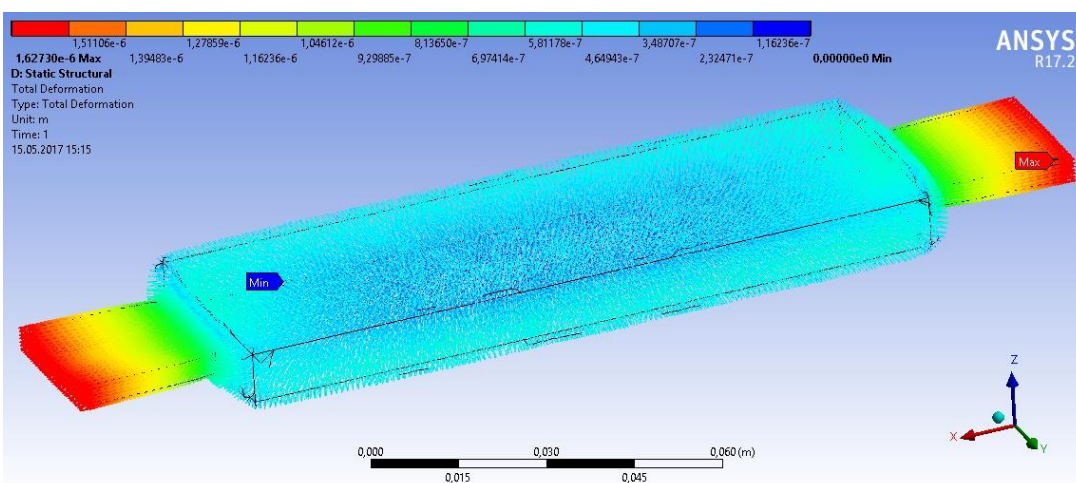
baterie. To je způsobeno rapidním nárůstem teploty uvnitř baterie v místě průrazu a spuštěním spontánních reakcí v baterii.



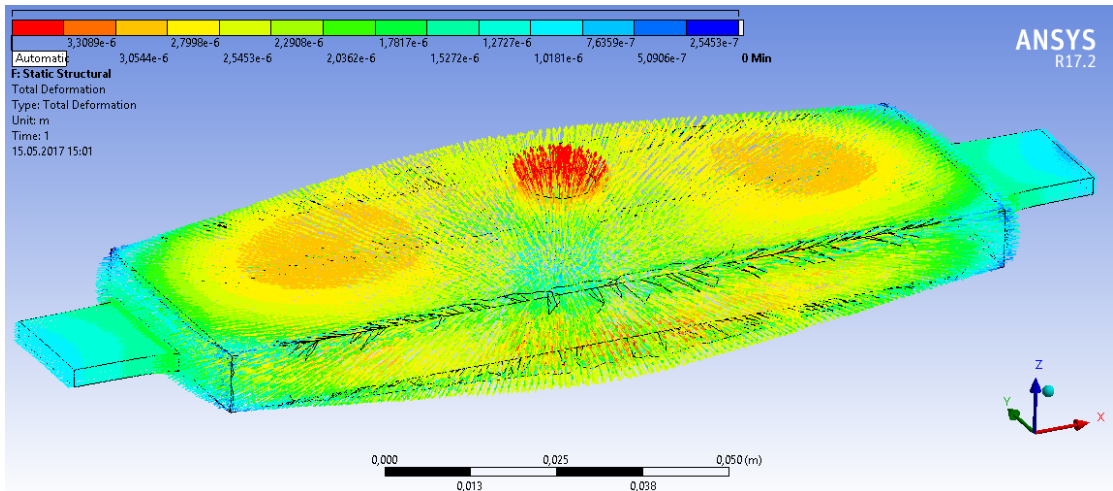
Obrázek 62: Deformace modelu



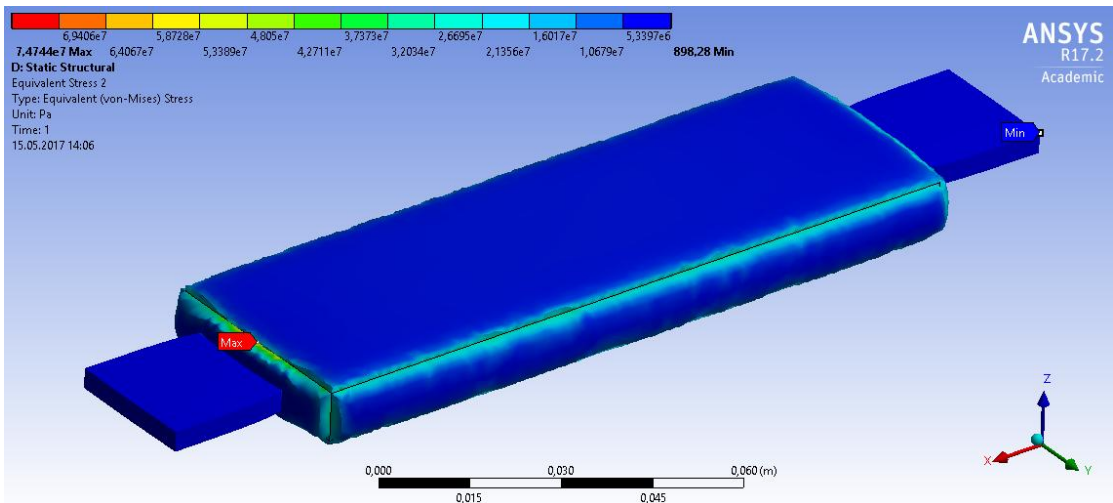
Obrázek 63: Deformace modelu při „nail“ testu (80 °C)



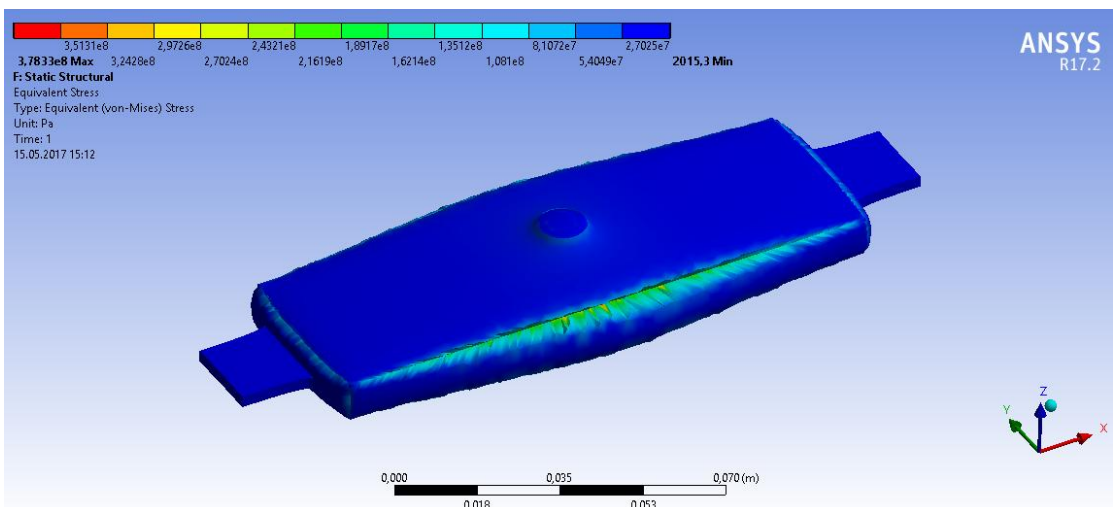
Obrázek 64: Vektorová deformace modelu



Obrázek 65: Vektorová deformace modelu při „nail“ testu (80 °C)



Obrázek 66: Mechanické napětí modelu



Obrázek 67: Mechanické napětí modelu při „nail“ testu (80 °C)

Pro vyhodnocení toho, zda tyto teploty budou mít pro baterii katastrofální následky je využito sledování mechanického napětí v baterii. Pokud by její hodnoty přesáhli mez pevnosti jednotlivých materiálů, došlo by k nevratnému procesu a destrukci baterie.

Tabulka 13: Hodnoty mezí pevnosti

<b>Název</b>	<b>Mez pevnosti [MPa]</b>
Polyethylen	8 - 35
Hliník	70
Měď	220

Tyto hodnoty, uvedené ve výše zmiňované tabulce, jsou srovnávací s hodnotami mechanického napětí v modelu.

# ZÁVĚR

Obsahem mé práce bylo nastudovat možnosti modelování lithium iontových baterií metodou MSMD v programu ANSYS Fluent, proměřit potřebné charakteristiky akumulátoru a pomocí termokamery proměřit teplotní pole vzniklé vybíjením. Součástí práce bylo také porovnat výsledky s numerickým modelem. Všechny tyto požadavky byly úspěšně vyřešeny a zpracovány v mé diplomové práci.

V první části je diplomová práce zaměřena na lithium iontové akumulátory obecně, je zmíněna stručně jejich historie, jejich výhody, a nevýhody, ale také složení, chemické rovnice, anodové a katodové materiály, nabíjecí a vybíjecí charakteristiky. V poslední řadě se práce věnuje také bezpečnosti lithium iontových akumulátorů.

Prvním požadavkem bylo nastudovat možnosti modelování lithium iontových akumulátorů v programu ANSYS Fluent. V této části byly popsány a porovnány jednotlivé modely a jejich submodely, které program nabízí. Byl zmíněn jednak model ekvivalentních obvodů, Newmanův P2D model, ale také i NTGK model, který byl právě využit v praktické části mé práce.

Druhým požadavkem bylo proměřit potřebné charakteristiky akumulátoru a pomocí termokamery proměřit teplotní pole vzniklé vybíjením. V této části byl proměřen akumulátor pro jednotlivé vybíjecí proudy. Během vybíjení byla pravidelně měřena a zaznamenávána teplota akumulátoru pomocí termokamery.

Posledním bodem bylo porovnat výsledky mezi reálným měřením a numerickým modelem vytvořeným v programu ANSYS Fluent. V této části byla rozebrána testovaná baterie KOKAM, ze které byly získány geometrické a materiálové vlastnosti článku. Následně byla vytvořena geometrie modelu v programu SolidWorks a převedena do programu ANSYS Fluent, kde byla posléze na tomto modelu vytvořena výpočetní síť. Před samotnou simulací byly zadány k výpočetní síti ještě okrajové a počáteční podmínky. Po nastavení všech potřebných parametrů proběhlo odsimulování numerického modelu a porovnání výsledků s výsledky, které byly získány během experimentálního měření. V poslední řadě proběhlo numerické modelování „nail“ testu.

# LITERATURA

- [1] Cnews.cz. [online]. 2011 [cit. 2016-09-26]. Dostupné z: <http://www.cnews.cz/li-ion-baterie-principy-provoz-rady-1cast>.
- [2] Battex.info. [online]. 2012 [cit. 2016-09-26]. Dostupné z: <http://www.battex.info/pasivace-elektrod>.
- [3] Battex.info. [online]. 2012 [cit. 2016-09-27]. Dostupné z: <http://www.battex.info/hermeticke-akumulatory/li-akumulatory/historie>
- [4] Battex.info. [online]. 2012 [cit. 2016-09-27]. Dostupné z: <http://www.battex.info/hermeticke-akumulatory/li-akumulatory/zakladni-charakteristiky>
- [5] VAŇEK, J, KŘIVÍK, P, NOVÁK, V. *Alternativní zdroje energie*. Vyd. 1. V Brně: Vysoké učení technické, Fakulta elektrotechniky a komunikačních technologií, Ústav elektrotechnologie, 2016. 149 s.
- [6] Tms.org. [online]. 2016 [cit. 2016-10-03]. Dostupné z: <http://www.tms.org/pubs/journals/jom/0809/daniel-0809.html>
- [7] Battex.info. [online]. 2012 [cit. 2016-10-03]. Dostupné z: <http://www.battex.info/hermeticke-akumulatory/li-akumulatory/princip>
- [8] Belza.cz. [online]. 2001 [cit. 2016-10-03]. Dostupné z: <http://www.belza.cz/charge/liion1.htm>
- [9] ANSYS, Inc. *ANSYS Fluent Advanced Add-On Modules* [cit. 2016-11-17]. Dostupné z: [https://www.sharcnet.ca/Software/Ansys/17.0/en-us/help/flu\\_am/flu\\_am.html](https://www.sharcnet.ca/Software/Ansys/17.0/en-us/help/flu_am/flu_am.html)
- [10] G-H Kim et al. *Multi-Domain Modeling of Lithium-Ion Batteries Encompassing Multi-Physics in Varied Length Scales*. J. of Electrochemical Soc.. 158 (8). A955-A969. 2011.
- [11] K. H. Kwon et al. *A Two-dimensional Modeling of a Lithium-polymer battery*. Journal of Power Sources.163. 151-157. 2006.
- [12] M. Chen and G. A. Rincon-Mora. *Accurate Electrical Battery Model Capable of Predicting Runtime and I-V Performance*. IEEE Trans. On Energy Conversion. Vol. 21. No.2. A154-A161. June 2006.
- [13] M. Doyle, T.F. Fuller and J. Newman. *Modeling of Galvanostatic Charge and Discharge of the Lithium/Polymer/Insertion Cell*. J. of Electrochemical Soc.. Vol 140, No. 6. 1526-1533. 1993.
- [14] U. S. Kim et al. *Effect of electrode configuration on the thermal behavior of a lithium-polymer battery*. Journal of Power Sources. 180 (2). 909-916. 2008.



- [15] ANSYS, Inc. *Computational Fluid Dynamics* [online]. 2017 [cit. 2017-02-03]. Dostupné z: <http://www.ansys.com/products/fluids>
- [16] VYROUBAL, P, MAXA, J. *Trojrozměrné modelování a simulace MTMS*. Vyd. 1.1. V Brně: Vysoké učení technické, Fakulta elektrotechniky a komunikačních technologií, Ústav elektrotechnologie, 2016. 204 s.
- [17] hawkridgesys.com. *Adaptive Meshing* [online]. 2017 [cit. 2017-02-07]. Dostupné z: <https://www.hawkridgesys.com/blog/simulation-adaptive-meshing/>
- [18] targray.com. *PE and PP Separators* [online]. 2017 [cit. 2017-02-08]. Dostupné z: <http://www.targray.com/li-ion-battery/separators/pe-pp-separators>
- [19] prvky.com. *Hliník* [online]. 2009 [cit. 2017-02-09]. Dostupné z: <http://www.prvky.com/13.html>
- [20] prvky.com. *Měď* [online]. 2009 [cit. 2017-02-09]. Dostupné z: <http://www.prvky.com/29.html>
- [21] sciencedirect.com. *Mechanical and physical properties of LiNi<sub>0.33</sub>Mn<sub>0.33</sub>Co<sub>0.33</sub>O<sub>2</sub> (NMC)* [online]. 2017 [cit. 2017-02-09]. Dostupné z: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0955221917301966>
- [22] sciencedirect.com. *The Finite Element Method (FEM)* [online]. 2017 [cit. 2017-02-10]. Dostupné z: <https://www.comsol.com/multiphysics/finite-element-method>
- [23] Sharcnet.ca. *Solid 186* [online]. 2017 [cit. 2017-05-17]. Dostupné z: [https://www.sharcnet.ca/Software/Ansys/16.2.3/en-us/help/ans\\_elem/](https://www.sharcnet.ca/Software/Ansys/16.2.3/en-us/help/ans_elem/)
- [24] KRAUSOVÁ, H. *Navier-Stokesova rovnice - řešení proudění reálné kapaliny* [online]. Vysoké učení technické v Brně. Fakulta strojního inženýrství, 2011 [cit. 2017-02-12]. Dostupné z: <http://hdl.handle.net/11012/6527>
- [25] Artemis.osu.cz. *Rovnice kontinuity* [online]. 2017 [cit. 2017-02-12]. Dostupné z: [http://artemis.osu.cz/mm fyz/qm/qm\\_4\\_3\\_1.htm](http://artemis.osu.cz/mm fyz/qm/qm_4_3_1.htm)
- [26] computerworld.cz *Jak je to s bezpečností li-ion baterií?* [online]. 2017 [cit. 2017-02-14]. Dostupné z: <http://computerworld.cz/technologie/jak-je-to-s-bezpecnosti-li-ion-baterii-7597>
- [27] KAZDA, T. *Modifikace materiálů pro kladné elektrody Lithno-Iontových akumulátorů*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta elektrotechniky a komunikačních technologií, 2015. 229 s.
- [28] Šikuda, M. *Elektrodové hmoty pro záporné elektrody lithium-iontových akumulátorů*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta elektrotechniky a komunikačních technologií, 2013. 43 s.

- [29] Sharcnet.ca. *Solid 187* [online]. 2017 [cit. 2017-05-17]. Dostupné z: [https://www.sharcnet.ca/Software/Ansys/17.0/en-us/help/ans\\_elem/](https://www.sharcnet.ca/Software/Ansys/17.0/en-us/help/ans_elem/)
- [30] ANSYS, Inc. *Solid 117* [online]. 2017 [cit. 2017-05-17]. Dostupné z: [http://www.ansys.stuba.sk/html/elem\\_55/chapter4/ES4-117.htm](http://www.ansys.stuba.sk/html/elem_55/chapter4/ES4-117.htm)

# SEZNAM SYMBOLŮ, VELIČIN A ZKRATEK

<i>SOC</i>	Stav nabití (State of Charge)
HEV	Hybridní elektrická vozidla
EDS	Elektrická vozidla
MSMD	Multi-Scale Multi-Dimensional
NTGK	Newman, Tiedemann, Gu, and Kim
ECM	Model ekvivaletních obvodů
DOD	Stupeň vybití
CFD	Computational Fluid Dynamics
NVH	Hluk, vibrace, tvrdost
EMI	Elektromagnetická interference
EMS	Elektromagnetická susceptibilita

# SEZNAM OBRÁZKŮ

Obrázek 1: Pohyb iontů Li+ při nabíjení a vybíjení (převzato z [1]).	8
Obrázek 2: Složení Li-ion akumulátoru (převzato z [5]).	10
Obrázek 3: Nabíjení Li - ion baterie (převzato z [8]).	13
Obrázek 4: Vybíjení Li - ion baterie (převzato z [8]).	14
Obrázek 5: Úrovně baterie	15
Obrázek 6: Úrovně baterií.	16
Obrázek 7: Model baterie (převzato z [9]).	18
Obrázek 8: Zjednodušení modelu	20
Obrázek 9: Použití elektrického obvodu v ECM modelu (převzato z [10]).	20
Obrázek 10: Elektrody a částicové domény v Newmanově modelu (převzato z [10]).	22
Obrázek 11: Propojení baterií (převzato z [10]).	23
Obrázek 12: Průřez článku baterie (převzato z [10]).	25
Obrázek 13: Porovnání reálného experimentu (vlevo) oproti CFD simulaci (vpravo) ..	26
Obrázek 14: Tvary konečných objemů	28
Obrázek 15: Základní označení výpočetní sítě	28
Obrázek 16: Blokový diagram Biologic Science Instruments® VMP3® s posilovačem	29
Obrázek 17: Rozebírání reálné baterie KOKAM	32
Obrázek 18: Geometrie modelu baterie	34
Obrázek 19: Reálná geometrie testované baterie.	35
Obrázek 20: Rozměry geometrie celé baterie v milimetrech	35
Obrázek 21: Sloučení a pojmenování jednotlivých částí.	36
Obrázek 22: Výpočetní síť baterie	36
Obrázek 23: Vytvořené "Named Selections"	37
Obrázek 24: Schéma propojení v ANSYSu.	37
Obrázek 25: Popis homogenního prvku Solidu 186	38
Obrázek 26: Popis geometrie Solidu 187	38
Obrázek 27: Popis geometrie Solid 117	39
Obrázek 28: Vyvolání MSMD metody.	39
Obrázek 29: Zjištění modelových parametrů z polynomu 5 stupně	41
Obrázek 30: Zadání modelových parametrů baterie	41
Obrázek 31: Nastavení počátečních podmínek simulace	42
Obrázek 32: Přidělení elektrických kontaktů.	42

Obrázek 33: Přidělení vodivých zón.....	43
Obrázek 34: Nastavení teplotních podmínek.....	43
Obrázek 35: Porovnání vybíjecích charakteristik reálné baterie KOKAM pro různá C	44
Obrázek 36: Porovnání vybíjecích křivek pro vybíjení 1 C mezi reálnou baterií Kokam (modrá) a MSMD modelem (červená).....	45
Obrázek 37: Porovnání vybíjecích křivek pro vybíjení 2 C mezi reálnou baterií Kokam (modrá) a MSMD modelem (červená).....	45
Obrázek 38: Porovnání vybíjecích křivek pro vybíjení 4 C mezi reálnou baterií Kokam (modrá) a MSMD modelem (červená).....	46
Obrázek 39: Porovnání vybíjecích křivek pro vybíjení 1 C v závislosti napětí na čase.	47
Obrázek 40: Porovnání vybíjecích křivek pro vybíjení 2 C v závislosti napětí na čase.	47
Obrázek 41: Porovnání vybíjecích křivek pro vybíjení 4 C v závislosti napětí na čase.	48
Obrázek 42: Rozložení teploty pro vybíjení 1 C mezi MSMD modelem (vlevo) a reálnou baterií (vpravo).....	49
Obrázek 43: Rozložení teploty pro vybíjení 2 C mezi MSMD modelem (vlevo) a reálnou baterií (vpravo).....	49
Obrázek 44: Rozložení teploty pro vybíjení 4 C mezi MSMD modelem (vlevo) a reálnou baterií (vpravo).....	50
Obrázek 45: Porovnání naměřených a nasimulovaných teplot během vybíjení pro různá C.....	51
Obrázek 46: Rozložení potenciálu pro kladnou elektrodu.....	51
Obrázek 47: Rozložení potenciálu pro zápornou elektrodu.....	52
Obrázek 48: Označená oblast pro simulaci vnitřního a vnějšího zkratu.....	52
Obrázek 49: Výpočetní síť baterie pro „nail“ test před adaptací (vlevo) a po adaptaci (vpravo).....	53
Obrázek 50: Schéma vnitřního zkratu (vlevo) a náhradního obvodu (vpravo) .....	54
Obrázek 51: Vyznačená oblast uvnitř baterie pro simulaci průrazu před adaptací (vlevo) a po adaptaci (vpravo).....	54
Obrázek 52: Proudová hustota na kladné elektrodě.....	56
Obrázek 53: Detail proudové hustoty na kladné elektrodě v místě průniku.....	57
Obrázek 54: Proudová hustota na záporné elektrodě.....	57
Obrázek 55: Detail proudové hustoty na záporné elektrodě v místě průniku.....	58
Obrázek 56: Rozložení teploty při „nail“ testu .....	58
Obrázek 57: Porovnání teplot pro jednotlivé vybíjení a „nail“ test .....	59
Obrázek 58: „Crash“ test .....	59
Obrázek 59: Přístup pro mechanické propojení s ECT.....	60
Obrázek 60: Schéma propojení.....	63
Obrázek 61: Geometrie baterie se zafixovanými hranami.....	63

Obrázek 62: Deformace modelu .....	64
Obrázek 63: Deformace modelu při „nail“ testu (80 °C).....	64
Obrázek 64: Vektorová deformace modelu .....	64
Obrázek 65: Vektorová deformace modelu při „nail“ testu (80 °C).....	65
Obrázek 66: Mechanické napětí modelu .....	65
Obrázek 67: Mechanické napětí modelu při „nail“ testu (80 °C).....	65

# SEZNAM TABULEK

Tabulka 1: Hodnoty materiálů pro bateriový článek .....	24
Tabulka 2: Složení akumulátoru .....	32
Tabulka 3: Fyzikální vlastnosti hliníku .....	33
Tabulka 4: Fyzikální vlastnosti mědi .....	33
Tabulka 5: Fyzikální vlastnosti polyethylenu .....	34
Tabulka 6: Geometrické a materiálové vlastnosti článku .....	40
Tabulka 7: Doba vybíjení pro jednotlivá C .....	46
Tabulka 8: Porovnání naměřených a nasimulovaných teplot během vybíjení pro různá C .....	50
Tabulka 9: Odporová bilance .....	55
Tabulka 10: Proudová bilance .....	55
Tabulka 11: Tepelná bilance .....	55
Tabulka 12: Materiálové vlastnosti článku .....	62
Tabulka 13: Hodnoty mezí pevnosti .....	66

# SEZNAM PŘÍLOH

## Obsah přiloženého CD

Na přiloženém CD se v kořenovém adresáři nachází tato diplomová práce ve formátu diplomovaprace.pdf