



بهینه‌سازی الکتروشیمیایی باتری سرب-اسید با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی

هامون پورمیرزاآقا¹، وحید اصفهانیان^{2*}، فریدون ثابت‌قدم³، فرشاد ترابی⁴

- 1- دانشجوی دکتری، مهندسی هوافضا، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد علوم و تحقیقات، تهران، ایران
 - 2- استاد، مهندسی مکانیک، پژوهشکده خودرو، سوخت و محیط زیست، پردیس دانشکده‌های فنی، دانشگاه تهران، تهران، ایران
 - 3- استادیار، مهندسی هوافضا، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد علوم و تحقیقات، تهران، ایران
 - 4- استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران، ایران
- * تهران، صندوق پستی 14395-1335، evahid@ut.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل
دریافت: 17 خرداد 1394
پذیرش: 26 تیر 1394
ارائه در سایت: 24 مرداد 1394
کلید واژگان:

چکیده

در تحقیق حاضر، بهینه‌سازی عددی یک سل از باتری سرب-اسید در حالت یک‌بعدی و با استفاده از حل عددی معادلات یکپارچه حاکم بر دینامیک باتری مورد مطالعه قرار گرفته است. برای راستی‌آزمایی، نتایج شبیه‌سازی عددی حاضر با نتایج عددی موجود در مقالات مقایسه و مطابقت خوبی مشاهده شده است. از آنجا که باتری‌های سرب-اسید محتوای انرژی پایین و ابعاد و وزن بالایی دارند با استفاده از روش بهینه‌سازی ازدحام ذرات و ترکیب آن با برنامه رایانه‌ای توسعه داده شده اقدام به طراحی یک سل از باتری سرب-اسید با هدف انرژی بیشتر و ابعاد کمتر شده است؛ که این روش در مقایسه با روش‌های متداول تجربی حاضر که مبتنی بر سعی و خطا هستند بسیار کم هزینه‌تر و سریع‌تر است. نتایج حاصل از بهینه‌سازی نشان داد که می‌توان با داشتن سل باتری با ابعاد مشابه سل پایه کنونی، سل باتری بهینه‌ای ساخت که دارای 83 درصد انرژی بیشتر باشد. همچنین نتایج نشان داد که می‌توان با تغییر ضخامت اجزای سل باتری سرب-اسید را به گونه‌ای طراحی کرد که با داشتن انرژی مشابه سل باتری پایه، حدود 23 درصد ابعاد و 25 درصد وزن کمتری داشته باشد.

باتری سرب-اسید
بهینه‌سازی ازدحام ذرات
دینامیک سیالات محاسباتی
محتوای انرژی

Optimization of Electrochemical Lead-Acid Battery Using Computational Fluid Dynamics

Hamoon Pourmirzaagha¹, Vahid Esfahanian^{2*}, Fereidoun Sabetghadam¹, Farschad Torabi³

- 1- Department of Mechanical and Aerospace Engineering, Science and Research Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran
 - 2- Vehicle, Fuel and Environment Research Institute, School of Mechanical Engineering, College of Engineering, University of Tehran, Tehran, Iran
 - 3- Mechanical Engineering Faculty, K. N. Toosi University of Technology, Tehran, Iran
- * P.O.B. 14395-1335 Tehran, Iran, evahid@ut.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 07 June 2015
Accepted 17 July 2015
Available Online 15 August 2015

Keywords:
Lead-Acid battery
Particle Swarm Optimization
Computational Fluid Dynamics
Energy Content

ABSTRACT

In this paper, one-dimensional numerical optimization of lead-acid battery with finite-volume method is performed using the governing equations of battery dynamics. For validation, the present results are compared with previous studies which show good agreement. The demand for batteries with high energy and power has increased due to their use in hybrid vehicles. The major shortcoming of lead-acid batteries in industry is low energy and high weight; therefore, a cell with higher energy and lower thickness is designed by using particle swarm optimization based on developed simulation code, which is less time consuming and much faster than experimental method. The results of optimization show that an optimal battery that has 85 percent higher energy can be made with the same cell length. The results also show that an optimum cell battery can be obtained with a 25 percent decrease in weight and 23 percent in dimensions while keeping the energy content constant.

1- مقدمه

از موارد سازندگان این خودروها به باتری‌های جایگزین مانند باتری‌های نیکلی یا لیتیومی روی آورند. بنابراین برای استفاده بیشتر از این باتری‌ها لازم است یک طراحی مناسب با هدف افزایش محتوای انرژی و کاهش وزن و ابعاد صورت گیرد. در حال حاضر، روش متداول برای بالا بردن محتوای انرژی استفاده از سعی و خطا در روش تجربی است که بسیار پرهزینه و زمان‌بر است. از طرفی، تعدادی از تست‌ها به علت کمبود لوازم آزمایشگاهی محدود می‌شود. علاوه بر تست‌های تجربی می‌توان با مدل‌سازی ریاضی یک باتری نیز به شناخت عمیقی از آن دست یافت. تاکنون روش‌های متعددی برای مدل‌سازی باتری استفاده شده است، که هر یک مزایا و محدودیت‌هایی

سیستم‌های ذخیره و تولید انرژی الکتریکی به‌طور گسترده در صنایع و کاربردهای روزمره مورد استفاده قرار می‌گیرند. تقاضا برای باتری‌ها با انرژی بالا و توان بالا، خصوصاً با افزایش تولید خودروهای هیبریدی روزبه‌روز افزایش یافته است. باتری‌های سرب-اسید به دلیل داشتن ایمنی بسیار بالا و هزینه پایین به‌عنوان یکی از پرکاربردترین باتری‌ها به حساب می‌آیند. ولی یکی از مشکلات پیشرو در زمینه استفاده از این باتری‌ها در خودروهای هیبریدی، محتوای انرژی پایین و وزن و حجم بالا آن‌ها است که باعث شده در بسیاری

Please cite this article using:

H. Pourmirzaagha, V. Esfahanian, F. Sabetghadam, F. Torabi, Optimization of Electrochemical Lead-Acid Battery Using Computational Fluid Dynamics, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 15, No. 9, pp. 280-288, 2015 (In Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

H. Pourmirzaagha, V. Esfahanian, F. Sabetghadam, F. Torabi, Optimization of Electrochemical Lead-Acid Battery Using Computational Fluid Dynamics, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 15, No. 9, pp. 280-288, 2015 (In Persian)

سال 2000 گو و وانگ [9] با اضافه کردن معادله انرژی به دستگاه معادلات خود، معادلات لازم برای بررسی اثرات حرارتی باتری را نیز به دست آوردند. اصفهانیان و ترابی [10] با استفاده از روش جعبه‌ای کلر اقدام به حل معادلات باتری بدون واکنش جانبی نمودند. از مزایای مهم این روش، حل عددی با دقت مرتبه دوم در مکان و زمان می‌باشد و نیاز به استفاده از روتین‌های گذشته نیست. اصفهانیان و همکاران [11] در سال 2014 اقدام به حل یک سل از باتری سرب-اسید به کمک روش رتبه کاسته نمودند که نتایج آن‌ها تطابق مطلوبی با نتایج دیگر مراجع داشت. اصفهانیان و همکاران [12] اقدام به طراحی یک سل سرب-اسید به کمک نرم افزار فلوئنت نمودند. پارامترهای طراحی مورد نظر آن‌ها جهت طراحی ضخامت الکتروود مثبت و منفی بود. اصفهانیان و ترابی [13] یک مدل ریاضی ارائه نمودند که از ترکیب روش دینامیک سیالات محاسباتی و مدار معادل به دست آمده است. برای به دست آوردن معادلات حاکم و مدل ریاضی مورد نظر، قوانین ولتاژ و جریان کیرشهف با معادلات حاکم ترکیب شده است. ترابی و اصفهانیان [14، 15] همچنین نظریه‌ای در زمینه پدیده گریز حرارتی ارائه نمودند و این پدیده را از لحاظ نظری و تئوری مورد تجزیه و تحلیل قرار دادند و تاثیر برگشت‌ناپذیری را بر بروز چنین پدیده‌ای مورد بررسی قرار دادند. آن‌ها توانستند یک دستگاه معادلات ارائه دهند که در آن پدیده گریز حرارتی در نظر گرفته شده بود. از آنجا که معادلات ارائه شده کلی بودند، قابل اعمال به انواع باتری‌ها نیز بودند.

همان‌طور که ذکر شد تمامی تحقیقات گذشته در جهت شبیه‌سازی باتری سرب-اسید بوده است و هیچ‌کدام از کارها به بهینه‌سازی بر اساس یک مدل مناسب بر اساس فاکتورهای قابل اعمال در صنعت نپرداخته است. در تحقیق حاضر برای نخستین بار اقدام به بهینه‌سازی یک سل از باتری سرب-اسید در حالت یک‌بعدی شده است. از آنجا که ضخامت الکتروود باتری‌های سرب-اسید نسبت به ارتفاع یا عرض آن بسیار کوچک است، و چون در این باتری‌ها، نرخ واکنش‌ها، تابع بسیار قوی از ضخامت بوده و تغییرات متغیرهای باتری در راستای ضخامت باتری بسیار بیشتر از راستاهای دیگر است؛ بنابراین فرض یک‌بعدی بودن فرایند باتری سرب-اسید فرض مناسبی است. برای شبیه‌سازی معادلات حاکم بر دینامیک باتری یک برنامه کامپیوتری و با استفاده از روش حجم محدود نوشته شده است. همچنین برای بهینه‌سازی از الگوریتم بهینه‌سازی ازدحام ذرات استفاده شده است. هدف از بهینه‌سازی در این مقاله دست یافتن به یک باتری با ابعاد کمتر و یا انرژی بیشتر نسبت به باتری کنونی است. متغیرها جهت بهینه‌سازی در این تحقیق ضخامت اجزاء سل (شامل الکتروود مثبت، الکتروود منفی، جداکننده و الکتروولیت و تخلخل (شامل الکتروود مثبت، الکتروود و جداکننده) می‌باشد.

2- مدل سازی ریاضی

یک سل از باتری سرب-اسید همانند شکل 1، شامل یک الکتروود مثبت و یک الکتروود منفی است که بین آن‌ها یک لایه عایق متخلخل (جداکننده) قرار گرفته است. تمام این قسمت‌ها متخلخل بوده و فضای بین آن‌ها توسط الکتروولیت پر شده است.

در فرایند شارژ و دشارژ در باتری‌های سرب-اسید و زمانی که واکنش‌های جانبی در باتری سرب-اسید در نظر گرفته نشود، تنها واکنش‌های اصلی در کنار قطب مثبت و منفی اتفاق می‌افتد این واکنش‌ها را می‌توان به فرم استاندارد (۲، 1) نوشت:

دارند. مدل‌سازی مبتنی بر دینامیک سیالات عددی با توجه به دقت بالا خود برای مقاصد طراحی و بهینه‌سازی مناسب هستند. روش دینامیک سیالات عددی قادر است تا با حل معادلات حاکم بر دینامیک باتری، جواب‌های بسیار دقیقی از سیستم مورد تحلیل در اختیار قرار دهد. در این روش معادلات اساسی سیستم که عبارتند از معادله بقای جرم، معادله بقای مومنتم، معادله انرژی، معادله بقای گونه‌های شیمیایی و معادله بقای بار الکتریکی که با استفاده از تکنیک‌های حل عددی که در دینامیک سیالات عددی کاربرد فراوانی دارند گسسته شده و حل می‌شوند. استفاده از این روش از زمانی آغاز شد که معادلات بقایی حاکم بر باتری توسط نیومن و تیدمن [1] ارائه شد. در سال 1979 تیدمن و نیومن [2] با استفاده از تئوری نیومن توانستند یک مدل جامع برای کل سل سرب-اسیدی ارائه دهند. آنها با استفاده از مدل ارائه شده توانستند یک فرایند دشارژ در یک سل سرب-اسیدی را شبیه‌سازی کنند. در سال 1987 گو و همکاران [3] توانستند مدلی ارائه دهند که نه تنها فرایند دشارژ بلکه فرایند شارژ و همچنین یک سیکل کامل ترکیبی از این فرایندها را نیز شبیه‌سازی می‌کرد. آنها در کار خود یک سل سرب-اسید شامل چهار ناحیه مختلف را در حالت یک‌بعدی مدل‌سازی کردند. معادلات حاکم برای هر ناحیه بطور جداگانه بدست آمد و برای حل معادلات از روش اختلاف محدود با دقت مرتبه دوم استفاده شد. در سال 1991 علویون و همکاران [4] برای اولین بار یک مدل ریاضی جهت شبیه‌سازی پدیده چینه‌بندی¹ الکتروولیت ارائه دادند. در سال 1993 برناردی و همکاران [5] مدل یک‌بعدی گو و همکاران [3] را به حالت دوبعدی تعمیم دادند. هدف اصلی آنها مشاهده رفتار الکتروشیمیایی باتری در جهت ارتفاع باتری بود. در سال 1997 گو و همکاران [6] برای اولین بار یک مدل جامع با فرمول‌بندی یکپارچه برای باتری سرب-اسید ارائه دادند. در مدل ارائه شده از تمام فرضیات ساده کننده‌ای که در مطالعات پیشین استفاده شده بود، صرف‌نظر شد. به همین دلیل مدل ارائه شده می‌توانست نتایج بسیار خوبی را از رفتار دینامیکی باتری و همچنین پدیده‌های فیزیکی در باتری ارائه دهد. در مدل ارائه شده توسط آنها، معادلات حاکم به فرم معادلات بقا شامل یک دستگاه معادلات با مشتقات جزئی غیرخطی بودند. همچنین آنها برای حل معادلات حاکم از تکنیک‌های عددی موجود در دینامیک سیالات محاسباتی و از روش حجم محدود استفاده نمودند. آن‌ها برای نشان دادن توانایی مدل خود اقدام به شبیه‌سازی دو سل در حالت یک‌بعدی و یک سل در حالت دوبعدی نمودند. در سال 1998 وانگ و گو [7] به بررسی نحوه به دست آوردن معادلات کامل میانگین‌گیری شده حاکم بر دینامیک باتری پرداختند. در سال 1999 کیم و هونگ [8] توانستند مدل کامل تری را برای باتری سرب اسید در حالت دوبعدی ارائه دهند. آنها در مطالعه خود یک باتری سرب اسید را شامل چهار ناحیه قطب مثبت، الکتروولیت، جداکننده و قطب منفی شبیه‌سازی کردند. آنها همچنین برای صحت‌گذاری بر نتایج خود، یک سل سرب اسید آزمایشگاهی را نیز ساختند. تلاش آنها بر این اساس بود که سل آزمایشگاهی خود را بر اساس مدل ارائه شده توسط گو و همکاران [6] بسازند. نتایج عددی آنها نشان داد که مدل عددی ارائه شده توسط گو و همکاران از دقت پایین تری نسبت به مدل عددی خودشان برخوردار است. دلیل این موضوع این بود که آنها در شبیه‌سازی معادلات خود تاثیر غلظت اسید بر روی ضریب نفوذ و ضریب رسانش را نیز در نظر گرفتند. نتایج ارائه شده توسط آنها شامل فرایندهای شارژ، دشارژ و استراحت بود که در جریان‌های مختلفی ارائه شد. در

1- Stratification

کم شده و مواد فعال به سولفات سرب تبدیل می‌شود. ارتباط سطح فعال با حالت شارژ بسیار پیچیده است و به شکل ساختار کریستالی الکترودها وابسته است، اما می‌توان از روابط (7، 8) برای این منظور استفاده کرد:

$$A = A_{\max} SoC^\xi \quad (7)$$

در فرایند شارژ

$$A = A_{\max} (1 - SoC^\xi) \quad (8)$$

که در این روابط A_{\max} بیشترین سطح فعال بوده که در $SoC = 1$ به دست می‌آید. اندازه‌گیری این سطح برای هر الکترودها به صورت تجربی و با استفاده از روش امپدانس اسپکتروسکوپی صورت می‌گیرد [3].

حالت شارژ نیز مشخص کننده میزان انرژی موجود در الکترودها می‌باشد که در فرایندهای شارژ و دشارژ از رابطه (9) به دست می‌آید:

$$\frac{\partial SoC}{\partial t} = \pm \frac{\nabla \cdot \vec{i}_e}{Q_{\max}} \quad (9)$$

که در آن علامت مثبت و منفی به الکترودهای مثبت و منفی اشاره می‌کند. آخرین جمله رابطه (5) معرف نرخ تولید یا مصرف یون می‌باشد و در آن ضریب a_2 برابر است با [6]:

قطب مثبت

$$a_2 = 3 - 2t_0^+ \quad (10)$$

قطب منفی

$$a_2 = 1 - 2t_0^- \quad (11)$$

علاوه بر دستگاه معادلات حاکم بیان شده، میزان تخلخل الکترودها حین فرایندهای شارژ و دشارژ تغییر می‌کند که این تغییر طبق رابطه (12) محاسبه می‌شود [6]:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} - a_1 \frac{Aj}{2F} = 0 \quad (12)$$

که در آن مقدار a_1 از روابط (13، 14) بدست می‌آید [6]:

قطب مثبت

$$a_1 = \left(\frac{M_{PbSO_4}}{\rho_{PbSO_4}} - \frac{M_{PbO_2}}{\rho_{PbO_2}} \right) \quad (13)$$

قطب منفی

$$a_1 = - \left(\frac{M_{PbSO_4}}{\rho_{PbSO_4}} - \frac{M_{Pb}}{\rho_{Pb}} \right) \quad (14)$$

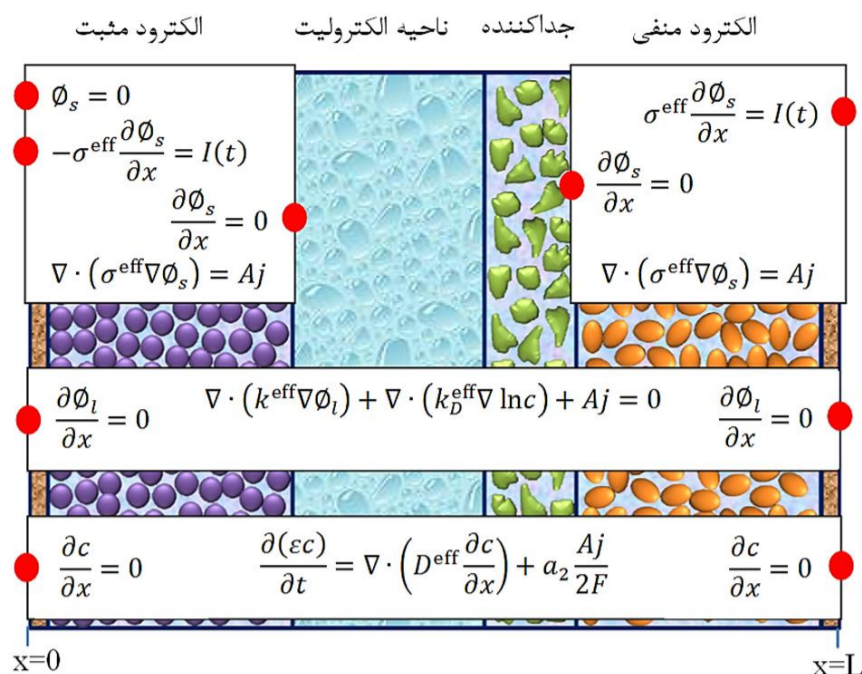
شایان ذکر است که در این روابط غیر از پارامترهای اصلی، خواص مواد نیز باید تعیین شوند. این خواص (مانند رسانایی الکترودها، رسانایی الکترولیت و غیره) همگی تابعی از دما و غلظت الکترولیت می‌باشند. این کمیت‌ها در مرجع [6] موجود می‌باشند.

2-1- شرایط اولیه و مرزی

برای حل دستگاه معادلات حاکم، شرایط مرزی و شرایط اولیه برای متغیرهای اصلی نیاز است که با توجه به فیزیک مسأله مشخص می‌شوند. غلظت گونه شیمیایی اسید در زمان صفر که هنوز باتری شروع به شارژ یا دشارژ نکرده است توسط مکانیزم انتقال جرم نفوذ یکنواخت می‌گردد. بنابراین شرط اولیه مناسب برای غلظت گونه شیمیایی اسید $c^H = c_0^H$ می‌باشد.

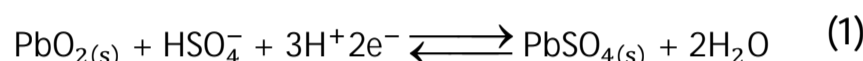
همچنین برای محاسبه شرایط اولیه پتانسیل در فاز جامد و مایع از دو روش می‌توان استفاده کرد:

1- با فرض غلظت ثابت برای اسید سولفوریک، $c^H = c_0^H$ ، نسبت به حل دو معادله بقای بار اقدام شود.

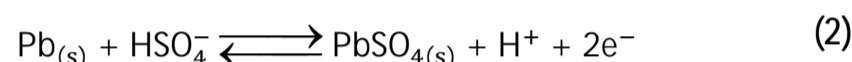


شکل 1 نمایی از یک سل باتری سرب-اسید به همراه شرایط مرزی و معادلات

الکتروده مثبت



الکتروده منفی



همان‌طور که از این معادلات مشخص است، عدد انتقال در این معادلات برابر دو است.

با در نظر گرفتن فرض یک‌بعدی، معادلات مومنتم و پیوستگی از معادلات کلی حذف و معادلات حاکم به صورت (3-5) بیان می‌شود:

معادله بقای بار الکتروده

$$\nabla \cdot (\sigma^{eff} \nabla \phi_s) - Aj = 0 \quad (3)$$

معادله بقای بار الکترولیت در الکترولیت

$$\nabla \cdot (k^{eff} \nabla \phi_l) + \nabla \cdot (k_b^{eff} \nabla \ln c) + Aj = 0 \quad (4)$$

معادله بقای گونه‌های شیمیایی (غلظت اسید)

$$\frac{\partial(\varepsilon c)}{\partial t} = \nabla \cdot (D^{eff} \frac{\partial c}{\partial x}) + a_2 \frac{Aj}{2F} \quad (5)$$

مجهولات معادلات بالا عبارتند از پتانسیل در الکتروده، پتانسیل در الکترولیت و غلظت الکترولیت.

در این روابط j چگالی جریان انتقالی است که از رابطه باتلر-والمر به دست می‌آید. برای واکنش‌های اصلی باتری سرب-اسید این رابطه برابر است با:

$$j = j_0 \left(\frac{c}{c_{ref}} \right)^\gamma \left\{ \exp \left(\frac{a_a F}{RT} \eta \right) - \exp \left(\frac{a_c F}{RT} \eta \right) \right\} \quad (6)$$

در رابطه باتلر-والمر، متغیر j_0 چگالی جریان تبادلی نامیده می‌شود و به ساختار مواد فعال بستگی دارد. همچنین مقدار اضافه پتانسیل $\eta = \phi_s - U$ بوده که در آن U ولتاژ مدار باز است. این ولتاژ به نسبت قطب منفی سنجیده می‌شود که در این صورت در قطب منفی $U = 0$ است. در قطب مثبت این ولتاژ تابعی از غلظت الکترولیت بوده که رابطه آن توسط بود [16] ارائه شده است.

کمیت مهم دیگر که در معادلات حاکم مورد نیاز است، سطح فعال الکتروشیمیایی A است. این سطح معرف سطح فعالی است که در واکنش شرکت می‌کند. درحالی که یک الکتروده در حالت کاملاً شارژ قرار دارد ($SoC = 1$)، تمامی سطحی از الکتروده که در تماس با الکترولیت است، سطح فعال برای فرایند دشارژ محسوب می‌شود. اما حین فرایند دشارژ، سطح فعال

جدول 1 پارامترهای ورودی برای شبیه‌سازی عددی

پارامترها	مقدار [3]
پارامترهای هندسی (cm)	
ضخامت الکتروود مثبت	0/06
ضخامت ناحیه الکتروولیت	0/055
ضخامت جداکننده	0/014
ضخامت الکتروود منفی	0/06
تخلخل	
الکتروود مثبت	0/53
جداکننده	0/73
الکتروود منفی	0/53
چگالی ($g\ cm^{-3}$)	
الکتروود مثبت	9/7
اسید سولفوریک	11/34
الکتروود منفی	6/3
ضریب رسانایی ($S\ cm^{-1}$)	
الکتروود مثبت	80
الکتروود منفی	$4/8 \times 10^4$
چگالی جریان تبدیلی ($mA\ cm^{-2}$)	
الکتروود مثبت	10
الکتروود منفی	10
سطح فعال بیشینه ($cm^2\ cm^{-3}$)	
الکتروود مثبت	100
الکتروود منفی	100
ظرفیت بیشینه الکتروود ($C\ cm^{-3}$)	
الکتروود مثبت	5660
الکتروود منفی	5660
ضریب انتقال آندی و کاتدی α_c و α_a	
الکتروود مثبت	0/5 و 0/5
الکتروود منفی	0/5 و 0/5
ضریب در رابطه باتلر-ولمر γ	
الکتروود مثبت	1/5
الکتروود منفی	1/5
شرایط کاری	
غلظت اولیه اسید ($mol\ cm^{-3}$)	$4/9 \times 10^{-3}$
دمای کاری (K)	298
عدد انتقال یون (H^+)	0/72
جریان ($mA\ cm^{-2}$)	-340

بقای بار الکتریکی است و از لحاظ فیزیکی به این مفهوم است که تمامی جریانی که وارد الکتروود می‌شود در نهایت وارد الکتروولیت شود. یا به عبارت دیگر:

$$\int \sum (A_j) dx = I(t) \quad (21)$$

علاوه بر شرط سازگاری و از آنجاکه پتانسیل یک کمیت نسبی است، همواره باید در یک نقطه از میدان مقدار آن مشخص باشد. بنابراین در حالتی که شرط مرزی جریان مورد نظر است، لازم است تا پتانسیل در یک نقطه از میدان مشخص باشد. روش متداول آن است که همواره $\phi_s|_{x=0} = 0$ قرار می‌دهند. بنابراین مقادیر پتانسیل در کل میدان نسبت این پتانسیل به دست می‌آید.

2-3- روش بهینه‌سازی ازدحام ذرات

روش مورد استفاده برای بهینه‌سازی در کار حاضر، الگوریتم بهینه‌سازی

2- کل سیستم معادلات به اندازه یک گام زمانی بسیار کوچک (مثلاً 10^{-4} ثانیه) حل شود.

شرایط مرزی مدل حاضر در شکل 1 نشان داده شده است. با توجه به قرارگیری چند سل پشت هم و تقارن داشتن سل مورد نظر در دو سمت، می‌توان شرایط مرزی را برای هر کدام از متغیرهای مجهول مشخص نمود. شرط مرزی مناسب در $x = l$ و $x = 0$ برای ϕ_l و c^H با توجه به تقارن در نظر گرفته شده برای مدل از روابط (16،15) بدست می‌آید:

$$\frac{\partial c^H}{\partial x} = 0 \quad (15)$$

$$\frac{\partial \phi_l}{\partial x} = 0 \quad (16)$$

از طرف دیگر به دلیل پیوسته بودن غلظت و پتانسیل در فاز مایع، در سرتاسر باتری نیازی به اعمال شرط مرزی جداگانه در مرزهای داخلی نیست و تنها کافی است که در ابتدا و انتها کل ناحیه حل، یعنی در $x = l$ و $x = 0$ شرایط مرزی را اعمال نماییم. شرط مرزی پتانسیل در فاز جامد بستگی به نحوه شارژ یا دشارژ دارد. در شرایطی که باتری تحت یک جریان خاص قرار گرفته باشد شرایط مرزی در هر دو مرز برابر است با:

$$\pm \sigma^{eff} \frac{\partial \phi_s}{\partial x} = I(t) \quad (17)$$

مقادیر مثبت $I(t)$ معرف شارژ و مقادیر منفی معرف دشارژ است. در این رابطه، علامت - در قطب مثبت و + در مرز قطب منفی اعمال می‌شود. دلیل آنکه در این دو علامت‌ها متفاوت است آن است که جهت بردار جریان نسبت به جهت بردار نرمال سطح در دو الکتروود متفاوت بوده یا به عبارت دیگر همواره جریان از یک الکتروود وارد و از الکتروود دیگر خارج می‌شود که این موضوع منجر به اختلاف علامت شده است.

همچنین از آنجاکه فقط در ناحیه الکتروودها فاز جامد موجود است، معادله حاکم بر ϕ_s تنها در این ناحیه حل می‌شود و در الکتروولیت و جداکننده صفر است. به همین دلیل برای محاسبه ϕ_s نیاز به داشتن شرط مرزی در هر دو سمت الکتروود می‌باشیم. چون در انتهای الکتروود مثبت تمام جریان ورودی، به الکتروولیت وارد می‌شود بنابراین $i_s = 0$ و $i_l = I$ می‌باشد، که i_s و i_l به ترتیب جریان در فاز جامد و مایع است و به صورت روابط (18،19) تعریف می‌شود [6]:

$$I_s = -\sigma^{eff} \nabla \phi_s \quad (18)$$

$$I_e = -k^{eff} \nabla \phi_e - k_D^{eff} \nabla \ln c \quad (19)$$

بنابراین با صفر بود i_s در الکتروولیت، در فصل مشترک بین الکتروود مثبت و الکتروولیت رابطه (20) بدست می‌آید:

$$\frac{\partial \phi_s}{\partial x} = 0 \quad (20)$$

در فصل مشترک بین الکتروود منفی و جداکننده مطابق شکل (1) نیز به دلیل مشابه، همین شرط مرزی صادق است.

جدول 1 مربوط به مقادیر ورودی‌ها برای شبیه‌سازی یک سل از باتری سرب-اسید است. این مقادیر براساس مرجع [3] ارائه شده است.

2-2- روش حل و مشکلات حل عددی

همان‌طور که از شرایط مرزی مشخص است، در حالتی که شرط مرزی جریان ثابت وجود دارد، تمامی شرایط مرزی از نوع نیومن بوده و بنابراین از لحاظ ریاضی این دستگاه تکین می‌شود و تنها در حالتی جواب خواهد داشت که شرط سازگاری را ارضا کند. در مدل باتری، شرط سازگاری معادل با قانون

ازدحام ذرات است. الگوریتم ازدحام ذرات یک روش بهینه‌سازی جستجوی تصادفی جدید است که توسط کندی و ابرهات ابداع شده است. در این الگوریتم مجموعه‌های از ذرات (معادل هریک از جواب‌های منتخب برای حل مسئله بهینه‌سازی)، گروه (در الگوریتم ژنتیک معادل جمعیت است) را تشکیل می‌دهند. هر ذره فضای اطرافش را برای پیدا کردن کمینه یا بیشینه محلی جستجو می‌کند. در طی جستجو هر ذره موقعیت خود را طبق تجربه خودش و تجربه بهترین همسایه‌اش اصلاح می‌کند. برای فرموله کردن این دو متغیر x و v به ترتیب با عنوان موقعیت و سرعت ذره تعریف می‌شود. بهترین موقعیت ذره (از لحاظ شایستگی در تابع هدف) با P و بهترین موقعیت بهترین ذره در کل گروه با عنوان P_g شناخته می‌شود.

برای اطمینان از همگرایی استفاده از ضرایبی موسوم به ضرایب انقباض برای تنظیم مناسب پارامترهای این الگوریتم لازم است. روابط اصلاح شده موقعیت ذره و سرعت را با توجه به ضرایب انقباض می‌توان به صورت زیر نوشت:

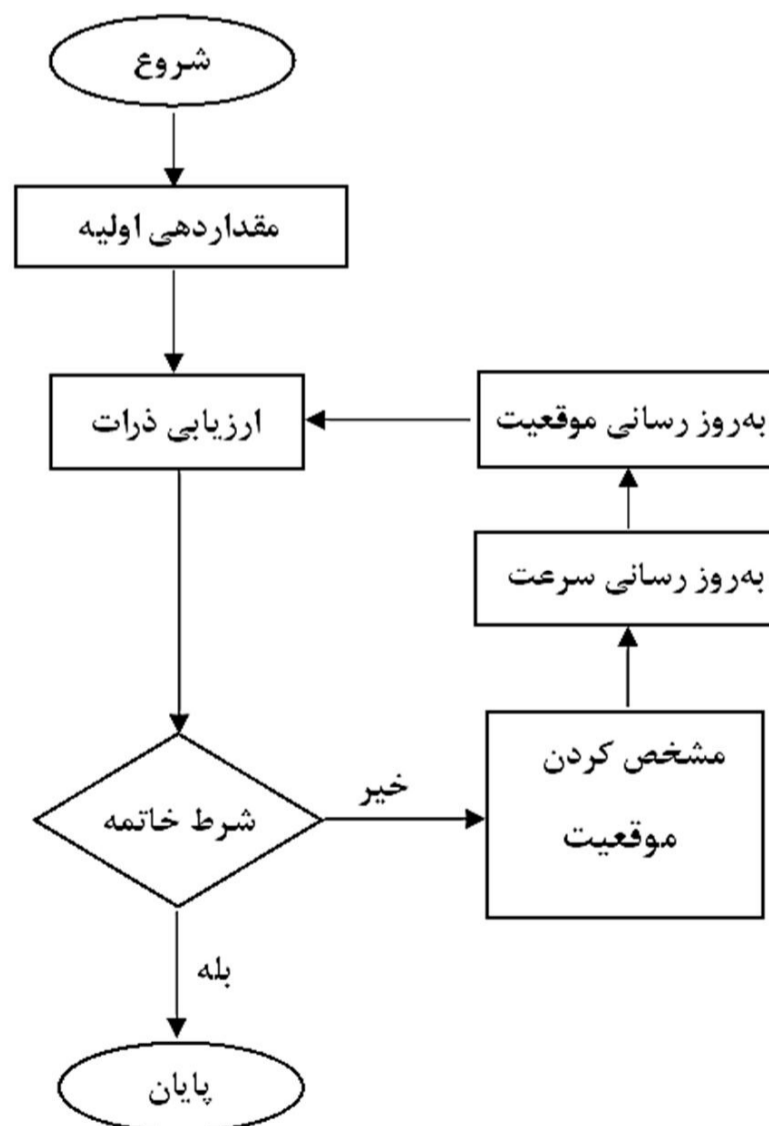
$$x_{ij}(t+1) = x_{ij}(t) + v_{ij}(t+1) \quad (22)$$

$$v_{ij}(t+1) = wv_{ij}(t) + c_1r_1[P_{ij}(t) - x_{ij}(t)] + c_2r_2[P_{gj}(t) - x_{ij}(t)] \quad (23)$$

که x موقعیت ذره، v سرعت ذره، w وزن اینرسی، c_1 و c_2 ضرایب شتاب و r_1 و r_2 یک تابع تولید عدد تصادفی با توزیع یکنواخت $[0, 1]$ است. انتخاب مناسب w سبب تعادل در جستجوی محلی و جستجوی کل فضای مسئله خواهد شد. عموماً برای عملکرد بهینه الگوریتم، w به صورت دینامیک تغییر داده می‌شود:

$$w_k = w_{\max} - \left(\frac{w_{\max} - w_{\min}}{k_{\max}} \right) k \quad (24)$$

در رابطه (24) k و k_{\max} به ترتیب تعداد تکرار کنونی و بیشینه است. الگوریتم روش بهینه‌سازی ازدحام ذرات در شکل 2 نشان داده شده است.



شکل 2 الگوریتم بهینه‌سازی ازدحام ذرات

بنابراین برای این مسأله دو تابع هدف می‌توان در نظر گرفت:

1- رسیدن به انرژی بیشتر با این قید که ابعاد باتری از ابعاد باتری اولیه بیشتر نشود.

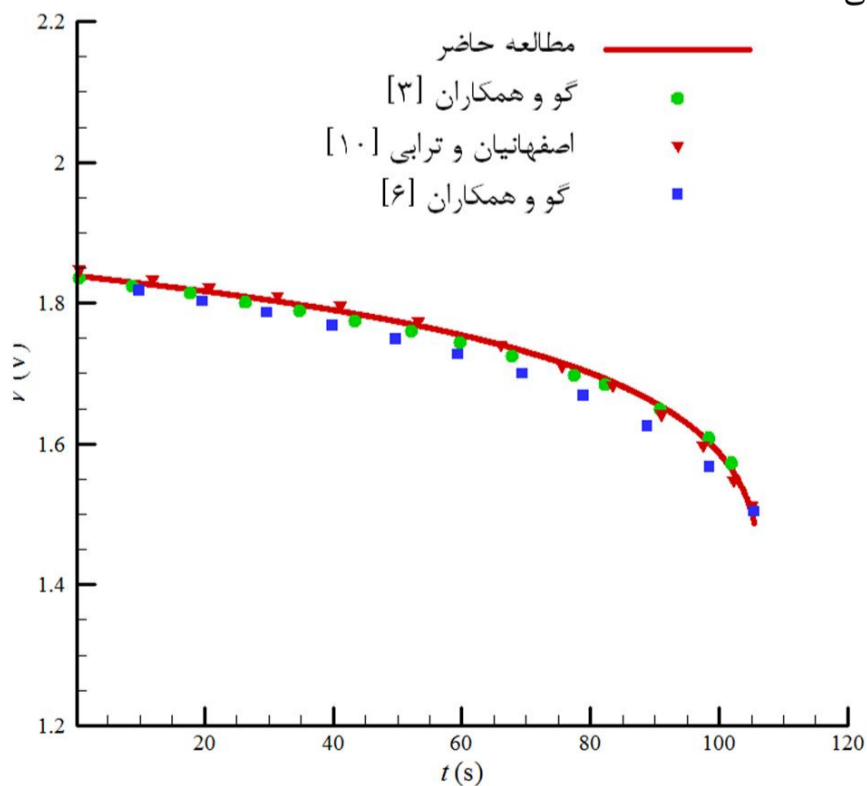
2- رسیدن به کمترین ابعاد (یا به عبارتی وزن) با این قید که انرژی باتری از انرژی پایه کمتر نشود.

3- نتایج

برای اعتبارسنجی، نتایج شبیه‌سازی سل حاضر در شکل‌های 3، 4 و 5 با نتایج مراجع [3، 6، 10] مقایسه شده است که از تطابق خوبی برخوردار است. تمامی ورودی‌ها و پارامترهای سل در جدول 1 ارائه شده است که براساس سل مشخص مرجع [3] می‌باشد.

شکل 3 تغییرات ولتاژ باتری برحسب زمان را نشان می‌دهد. همان‌طور که در شکل نیز مشخص است این سل اندکی پس از گذشت 105 ثانیه به ولتاژ قطع می‌رسد که مشخصه یک باتری استارتر است. ولتاژ قطع در باتری 1/55 می‌باشد. همچنین علاوه بر ولتاژ قطع پایان یافتن اسید در الکترودها نیز عامل محدود کننده می‌باشد.

تغییرات غلظت اسید در زمان‌های 60 و 105/5 ثانیه در شکل 4 نمایش داده شده است. همان‌طور که ملاحظه می‌شود، هنگامی که سل به ولتاژ قطع می‌رسد، اسید در قطب مثبت به طور کامل مصرف شده است اما در قطب منفی همچنان اسید با غلظت زیاد وجود دارد. تمام شدن اسید در قطب مثبت به عنوان یک عامل محدود کننده برای سل به شمار می‌رود و همان‌طور که در شکل نیز مشخص است، در انتها زمان دشارژ، افت شدیدی در نمودار ولتاژ ایجاد می‌شود. این مساله نشان می‌دهد که قطب منفی به طور مناسب طراحی نشده است.



شکل 3 تغییرات ولتاژ بر حسب زمان و مقایسه با نتایج مراجع [3، 6، 10]

در باتری‌های سرب-اسیدی که با جریان بالا سرکار دارند، به‌عنوان مثال در باتری استارتر، به‌دلیل آن‌که جریان زیاد در مدت زمان کم از باتری تخلیه می‌شود، سطح تماس و مقدار حضور اسید در الکتروود مثبت محدود کننده است، در نتیجه مسائل مربوط به فیزیولوژی سطح و نفوذ اسید که رابطه نزدیکی با میزان تخلخل دارند، اهمیت می‌یابند. در حقیقت افزایش تخلخل، سطح تماس الکتروولیت با دیواره جامد را افزایش داده و در نتیجه انجام واکنش الکتروشیمیایی در مجاورت دیواره تسهیل می‌گردد که باعث افزایش عملکرد باتری می‌شود.

3-1-3- بهینه‌کردن انرژی سل با متغیرهای طراحی ضخامت و تخلخل

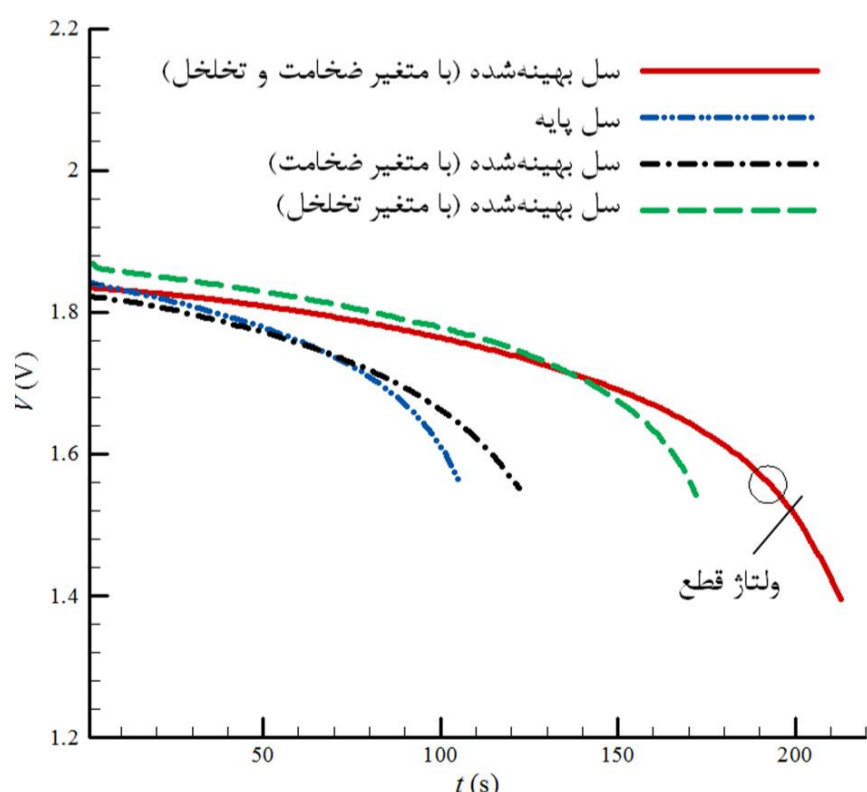
در این حالت اقدام به بهینه‌سازی به‌منظور افزایش انرژی با دو متغیر ضخامت و تخلخل با در نظر گرفتن اینکه مجموع ضخامت‌های اجزا سل از حالت پایه بیشتر نشود، پرداخته شده‌است.

جدول 4 مقادیر ضخامت و تخلخل سل بهینه با هدف بهینه‌کردن انرژی سل را نشان می‌دهد.

شکل‌های 10 و 11 نتایج حاصل از بهینه‌سازی هنگامی که هم ضخامت و هم تخلخل به‌عنوان متغیر طراحی باتری در نظر گرفته‌شود و هدف بهینه‌کردن انرژی با شرط آنکه ابعاد سل از ابعاد پایه بیشتر نشود، را نشان می‌دهد. همانگونه که در شکل 10 دیده می‌شود بعد از بهینه‌سازی، سل بهینه شده با وجود 1 درصد کاهش در ابعاد، پس از گذشت 192 ثانیه به ولتاژ قطع رسیده‌است و حدود 83 درصد انرژی باتری سرب-اسید با توجه به کاربرد آن‌ها بسیار حائز اهمیت می‌باشد.

جدول 4 مقادیر ضخامت و تخلخل بهینه اجزای سل در حالت بهینه‌کردن انرژی

ناحیه	ضخامت حالت بهینه (cm)	تخلخل بهینه
الکتروود مثبت	0/086	0/9
الکتروولیت	0/055	1
جداکننده	0/02	0/9
الکتروود منفی	0/026	0/85



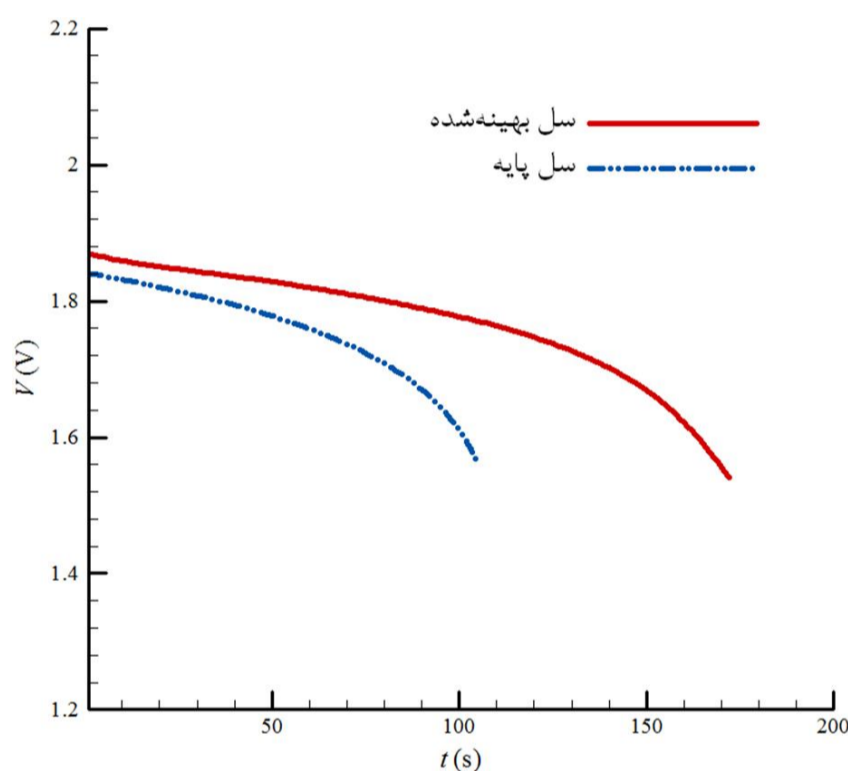
شکل 10 مقایسه ولتاژ سل بهینه و پایه هنگامی که انرژی بهینه‌کردن هدف باشد (با متغیرهای طراحی ضخامت و تخلخل)

3-1-2- بهینه‌کردن انرژی سل با متغیر طراحی تخلخل

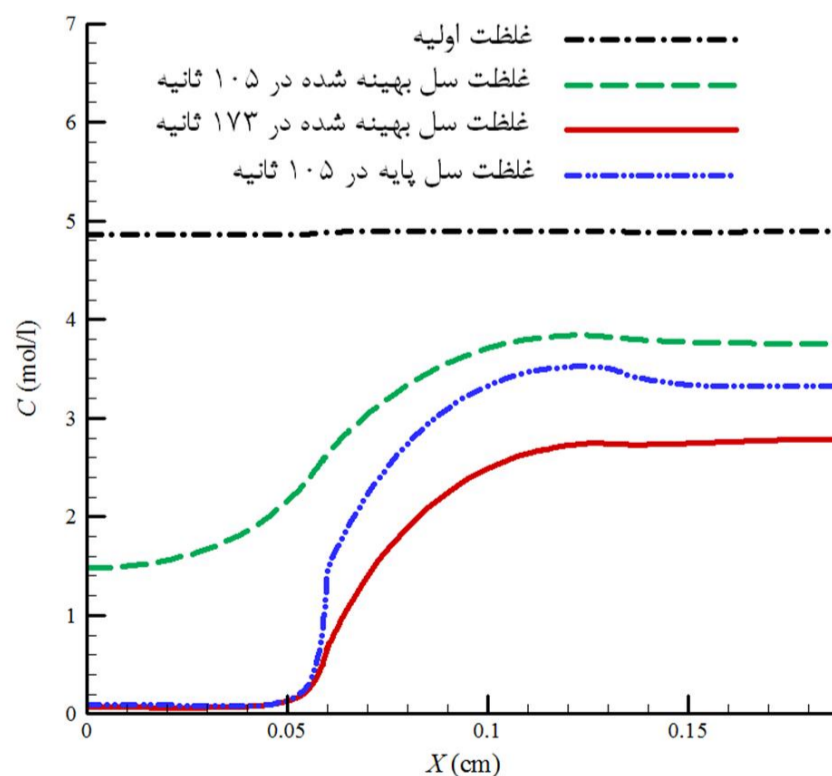
در این حالت اقدام به بهینه‌سازی به‌منظور افزایش انرژی فقط با متغیر تخلخل پرداخته شده‌است. جدول 3 مقادیر تخلخل سل پایه و بهینه را نشان می‌دهد. همچنین شکل‌های 8 و 9 نتایج حاصل از بهینه‌سازی هنگامیکه متغیر طراحی تخلخل اجزا باتری باشد و با هدف انرژی بهینه‌کردن را نشان می‌دهد. همان‌طور که از شکل 8 مشاهده می‌شود سل بهینه شده بعد از گذشت 173 ثانیه به ولتاژ قطع رسیده‌است و بیش از 64 درصد انرژی باتری افزایش یافته‌است.

جدول 3 مقایسه تخلخل بهینه اجزای سل با تخلخل سل پایه در حالت بهینه‌کردن انرژی

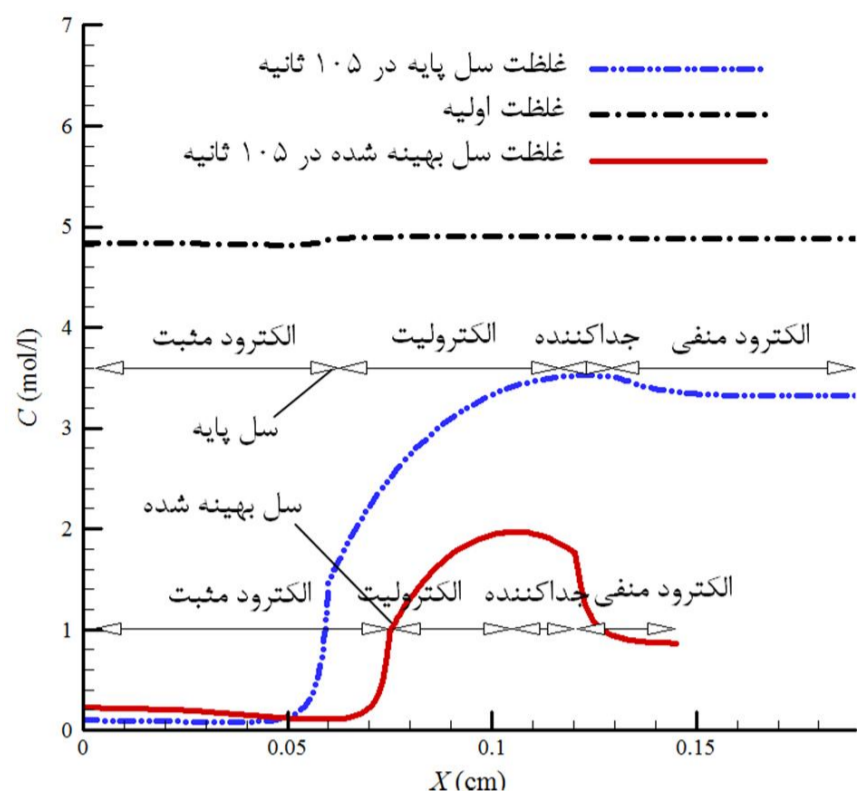
ناحیه	تخلخل حالت پایه	تخلخل حالت بهینه
الکتروود مثبت	0/53	0/9
الکتروولیت	1	1
جداکننده	0/73	0/79
الکتروود منفی	0/53	0/74



شکل 8 مقایسه ولتاژ سل بهینه و پایه هنگامی که انرژی بهینه‌کردن هدف باشد



شکل 9 مقایسه تغییرات غلظت الکتروولیت در سل بهینه و پایه هنگامی که انرژی بهینه‌کردن هدف باشد (با متغیر طراحی تخلخل)



شکل 13 مقایسه تغییرات غلظت الکترولیت در سل بهینه و پایه هنگامی که هدف کم کردن ابعاد باشد (با متغیر طراحی ضخامت)

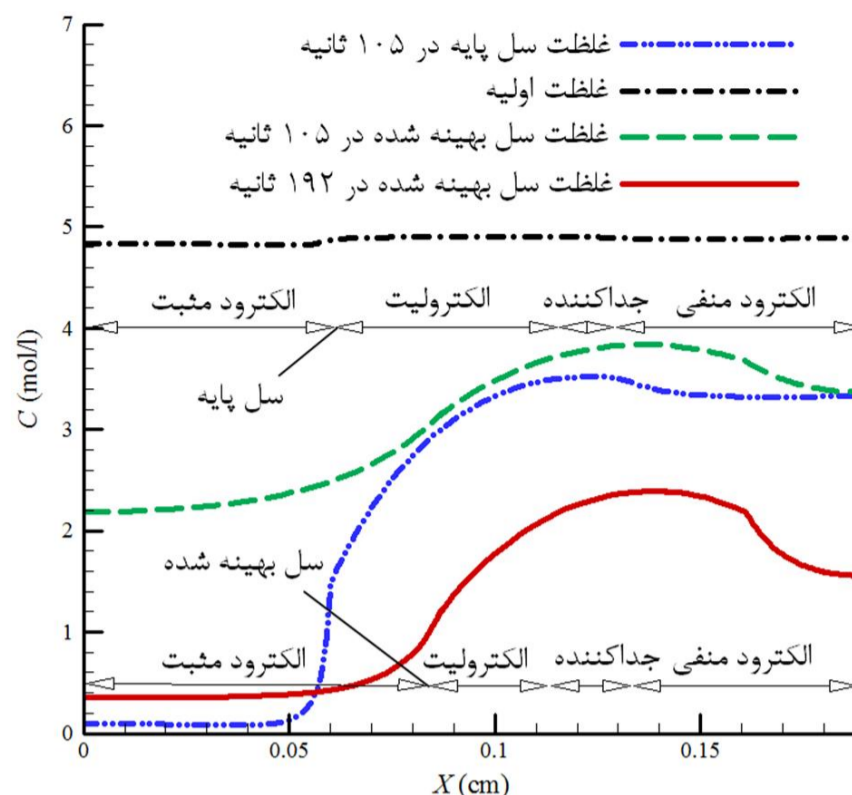
همان‌گونه که در این شکل‌ها مشخص است باتری بهینه دارای ولتاژ کاری مشابه با حالت پایه است ولی ضخامت این باتری حدوداً 23 درصد نسبت به حالت پایه کاهش یافته‌است. همانگونه که در شکل 13 مشاهده می‌شود اسید در هر دو الکتروده به‌طور یکنواخت‌تری مصرف شده‌است که خود بیان‌گر بهینه بودن باتری طراحی شده نسبت به حالت پایه است.

4- جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

در تحقیق حاضر اقدام به بهینه‌سازی یک سل از باتری سرب-اسید در حالت یک‌بعدی با استفاده از معادلات حاکم بر دینامیک سیالات محاسباتی شده است. برای بهینه‌سازی باتری دو تابع هدف در نظر گرفته شده است. نتایج تحقیق نشان داد که برای بهینه‌سازی با هدف بیشینه کردن انرژی، می‌توان با تغییر ضخامت اجزاء و با قید ثابت بودن ابعاد، باتری را به‌گونه‌ای طراحی نمود که 17 درصد انرژی بیشتر نسبت به باتری مشابه کنونی داشته باشد. همچنین با تغییر تخلخل اجزای سل تغییر چشم‌گیری در انرژی باتری صورت می‌گیرد و حدود 65 درصد افزایش در انرژی باتری مشاهده می‌شود. نتایج نشان داد با تغییر هم‌زمان متغیرهای ضخامت و تخلخل اجزای سل می‌توان با داشتن باتری با ابعاد مشابه باتری‌های کنونی، انرژی باتری را حدود 83 درصد افزایش داد. همچنین نتایج نشان داد که با هدف کم کردن ابعاد، می‌توان با تغییر ضخامت اجزاء، باتری را به‌گونه‌ای طراحی نمود که با داشتن انرژی مشابه، حدود 23 ابعاد کمتری (25 درصد وزن کمتر) داشته باشد. که این میزان در تولید صنعتی صرفه‌جویی هنگفتی خواهد داشت.

5- فهرست علائم

- A سطح فعال الکتروشیمیایی ($\text{cm}^2 \text{cm}^{-3}$)
- c غلظت اسید (mol cm^{-3})
- D ضریب دیفیوژن ($\text{cm}^2 \text{S}^{-1}$)
- F ثابت فارادی 96487 (C mol^{-1})
- I جریان (mA cm^{-2})
- i_l جریان در فاز مایع (mA cm^{-2})
- i_s جریان در فاز جامد (mA cm^{-2})
- j چگالی جریان انتقالی (mA cm^{-2})



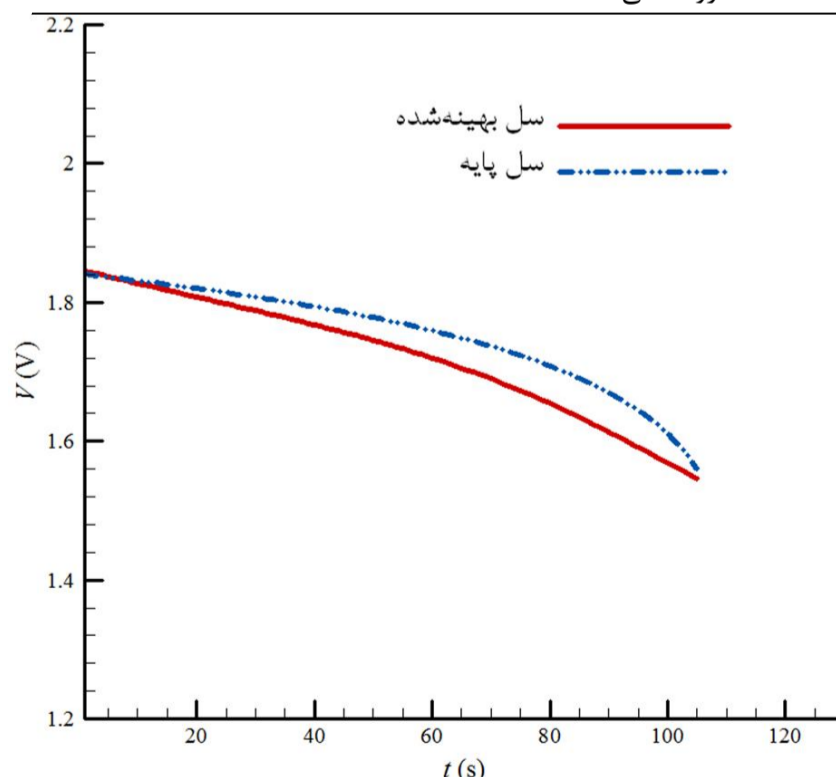
شکل 11 مقایسه تغییرات غلظت الکترولیت در سل بهینه و پایه هنگامی که انرژی بیشینه هدف باشد (با متغیرهای طراحی ضخامت و تخلخل)

3-1-4- کمینه نمودن ابعاد سل با متغیرهای طراحی ضخامت

در این قسمت اقدام به بهینه‌سازی به‌منظور کاهش ابعاد فقط با متغیر ضخامت در حالتی که انرژی سل کمتر از سل پایه نشود، پرداخته شده‌است. در واقع هدف داشتن باتری است که با داشتن انرژی مشابه باتری کنونی، دارای ابعاد کمتر باشد. جدول 5 مقادیر پایه یک سل و مقادیر سل بهینه با هدف کم کردن ابعاد و با فرض کمتر نبودن انرژی نسبت به انرژی سل پایه را نشان می‌دهد. در شکل‌های 12 و 13 نتایج حاصل برای رسیدن به ابعاد کمتر و در نتیجه وزن کمتر زمانی که ولتاژ سل برابر حالت پایه باشد را نشان می‌دهد.

جدول 5 مقایسه ضخامت بهینه اجزای مختلف سل با ضخامت سل پایه در حالت کم کردن ابعاد سل باتری

ناحیه	ضخامت حالت پایه (cm)	ضخامت حالت بهینه (cm)
الکتروده مثبت	0/06	0/074
الکترولیت	0/055	0/03
جداکننده	0/014	0/0159
الکتروده منفی	0/06	0/024



شکل 12 مقایسه ولتاژ سل بهینه و پایه هنگامی که هدف کم کردن ابعاد باشد (با متغیر طراحی ضخامت)

- [2] W. H. Tiedemann, J. Newman, *Battery Design and Optimization, The Electrochemical Society Softbound Proceeding Series*, New York: Princeton, pp. 23, 1979.
- [3] H. Gu, T. V. Nguyen, R. E. White, A mathematical model of a lead-acid cell: discharge, rest and charge, *Journal of Electrochemical Society*, Vol. 134, No. 12, pp. 2953-2960, 1987.
- [4] F. Alavyoon, A. Eklund, F. H. Bark, R. I. Karlsoon and D. Simonsson, Theoretical and Experimental Studies of Free Convection and Stratification of Electrolyte in a Lead-Acid Cell During Recharge, *Electrochimica Acta*, Vol. 36, No. 14, pp. 2153-2164, 1991.
- [5] D. M. Bernardi, H. Gu, Two-dimensional mathematical model of a lead acid cell, *Journal of Electrochemical Society*, Vol. 140, No. 8, pp. 2250-2258, 1993.
- [6] W. B. Gu, C. Y. Wang, B. Y. Liaw, Numerical modeling of coupled electrochemical and transport processes in lead acid cell, *Journal of Electrochemical Society*, Vol. 144, No. 6, pp. 2053-2061, 1997.
- [7] C. Y. Wang, W. B. Gu, Micro-Macroscopic Coupled Modeling of Batteries and Fuel Cells, *Journal of Electrochemical Society*, Vol. 145, No. 10, pp. 3407-3417, 1998.
- [8] S. C. Kim, W. H. Hong, Analysis of the discharge performance of a flooded leadacid cell using mathematical modeling, *Journal of Power Source*, Vol. 77, PP. 74-82, 1999.
- [9] W. B. Gu, C. Y. Wang, Thermal-Electrochemical Modeling of Battery Systems, *Journal of The Electrochemical Society*, Vol. 147, No. 8, pp. 2910-2922, 2000.
- [10] V. Esfahanian, F. Torabi, Numerical Simulation of Lead-Acid Batteries using Keller-Box Method, *Journal of Power Sources*, Vol. 158, pp. 949-952, 2006.
- [11] V. Esfahanian, A. B. Ansari, F. Torabi, Simulation of lead-acid battery using model order reduction, *Journal of Power Sources*, Vol. 279, pp. 294-305, 2015.
- [12] V. Esfahanian, S. Hasanpour, A. B. Ansari, N. Narjabadifam, P. Olad, The Optimization of Lead Acid Battery Electrode Thickness Using PSO Algorithm by Using Neural Network, in *The 9th International Conference on lead-acid batteries, Albena, Bulgaria*, 2014.
- [13] V. Esfahanian, F. Torabi, A. Mosahebi, An Innovative Computational Algorithm for Simulation of Lead-Acid Batteries, *Journal of Power Sources*, Vol. 176, pp. 373-380, 2008.
- [14] F. Torabi, V. Esfahanian, Study of Thermal-Runaway in Batteries I. Theoretical Study and Formulation, *Journal of Electrochemical Society*, 158 (8) A850-A858, 2011.
- [15] F. Torabi, V. Esfahanian, Study of Thermal-Runaway in Batteries II. The Main Sources of Heat Generation in Lead-Acid Batteries, *Journal of Electrochemical Society*, 160 (2) A223-A234, 2013.
- [16] H. Bode, *Lead-Acid Batteries*, New York: Wiley, pp. 130, 1977.

j_0	چگالی جریان تبادل (mA cm ⁻²)
M	وزن مولکولی اجزاء (g mol ⁻¹)
Q	ظرفیت تئوری (C cm ⁻³)
R	ثابت جهانی گازها 8/3143 (J mol ⁻¹ K ⁻¹)
SoC	حالت شارژ
t	زمان (s)
T	دما (K)
t_0^+	عدد انتقال یون هیدروژن
V	ولتاژ سل (V)
علائم یونانی	
a	ضریب انتقال آندی و کاتدی
ϵ	تخلخل
η	پتانسیل مدار باز (V)
k	ضریب رسانایی الکترولیت (S cm ⁻¹)
ρ	چگالی (g cm ⁻³)
σ	ضریب رسانایی الکتروود (S cm ⁻¹)
\emptyset	پتانسیل الکتریکی (V)
زیرنویس‌ها	
D	مربوط به دیفیوژن
I	فاز مایع
Max	بیشترین
Min	کمترین
s	فاز جامد

6-مراجع

- [1] J. Newman, W. H. Tiedemann, Porous-electrode theory with battery applications, *AIChE Journal of Control Optimization*, Vol. 21, No. 1, pp. 25-41, 1975.