

超级电容器关键材料与器件专刊



锂离子电池浆料搅拌过程的多尺度颗粒追踪数值模拟

林 垦¹, 陈安国², 陈 铎¹, 刘富亮², 张校刚¹, 申来法¹

(¹南京航空航天大学材料科学与技术学院, 江苏 南京 211106; ²特种化学电源全国重点实验室, 贵州梅岭电源有限公司, 贵州 遵义 563000)

摘要: 作为电极制造的核心工序, 涂布的质量决定着最终产品的性能, 极片不均匀是提升锂离子电池性能的核心挑战, 其造成的内阻增大会导致电容器性能下降。针对锂离子电池电极浆料均匀性评估缺乏微观动态表征手段的问题, 本研究创新性地提出了一个多尺度轨迹耦合分析框架, 通过同步构建单颗粒运动轨迹与粒子群分布轨迹, 从微观动力学与宏观统计学双重维度可视化评估混合均匀性。基于此方法, 系统仿真了四种工业常用搅拌桨叶的流场与混合过程, 清晰揭示了不同桨叶驱动颗粒分散与对流的主导机理及其适用条件, 其中锚式叶轮凭借其优异的全域剪切流场与颗粒分散均匀性, 因而最适配于高固含量、高黏度的锂离子电池活性物质浆料搅拌。最终, 研究将轨迹分析结果转化为颗粒尺度上的定量评判标准, 为高性能电池浆料的工艺优化与桨叶选型提供了直接理论依据。同时, 该研究下的分析模式可以拓展到锂离子电池活性物质以及其他类型的浆料搅拌模拟中, 具有很好的普适性。

关键词: 数值模拟; 搅拌; 锂离子电池; 颗粒示踪; 均匀性

doi: 10.19799/j.cnki.2095-4239.2026.0253

中图分类号: TQ 152; TQ 051.7

文献标志码: A 文章编号: 2095-4239 (2026) 05-1595-11

Numerical simulation of multi-scale particle tracking for slurry mixing process in lithium-ion capacitors

LIN Ken¹, CHEN Anguo², CHEN Duo¹, LIU Fuliang², SHEN Laifa¹

(¹College of Materials Science and Technology, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 211106, Jiangsu, China; ²State Key Laboratory Advanced Chemical Power Sources, Guizhou Meiling Power Supply Co. Ltd., Zunyi 563000, Guizhou, China)

Abstract: The quality of electrode coating is crucial for the performance of lithium-ion capacitors (LICs), as it directly influences the final product's efficacy. One main challenge in enhancing LIC performance is the production of uneven electrodes, which contribute to increased internal resistance and, consequently, reduced capacitor performance. Non-uniform slurries often result in heterogeneous electrodes, posing significant challenges that can lead to accelerated capacity decay and safety risks. Existing evaluation methods mainly focus on macro-scale rheological tests or final electrode characterization, lacking insights into the in-situ dynamics of particle-scale mixing. To address this gap, this study proposes an innovative multi-scale trajectory coupling analysis framework for evaluating mixing uniformity. The

收稿日期: 2026-03-28; 修改稿日期: 2026-04-24。

基金项目: 黔科合平台人才-GCC [2023] 100。

第一作者: 林垦 (2002—), 男, 博士研究生, 研究方向: 锂电及相关仿真技术, E-mail: ken_lin@nuaa.edu.cn; 通信作者: 申来法, 教授, 研究方向: 空天储能电化学器件, E-mail: lfshen@nuaa.edu.cn。

引用本文: 林垦, 陈安国, 陈铎, 等. 锂离子电池浆料搅拌过程的多尺度颗粒追踪数值模拟[J]. 储能科学与技术, 2026, 15(5): 1595-1605.

Citation: LIN Ken, CHEN Anguo, CHEN Duo, et al. Numerical simulation of multi-scale particle tracking for slurry mixing process in lithium-ion capacitors[J]. Energy Storage Science and Technology, 2026, 15(5): 1595-1605.

methodology involves the synchronous construction and analysis of the motion trajectories of particles within a simulated stirred tank. Individual tracer particle movements are tracked to reveal micro-scale dynamics, whereas the collective paths of particle swarms are analyzed to visualize macro-scale transport and diffusion patterns. This framework incorporates qualitative flow field analysis and quantitative particle distribution statistics, creating a triangulated approach for mechanistic understanding. Using this method, the study systematically simulated and compared the mixing performance of four widely used industrial impellers, namely, anchor, C-type outer blade, fixed-pitch hydrofoil, and retreat blade, in a standard flat-bottomed tank. The results clearly identify their dominant mixing mechanisms and limitations regarding LIC slurries. The anchor impeller generates a global wall-shear flow, achieving the best macro-scale particle distribution uniformity. In summary, this study translates complex flow-particulate interactions into actionable, particle-scale criteria for evaluating impellers. The findings provide a solid theoretical and methodological foundation for the science-guided selection and optimization of stirring equipment in high-performance LIC slurry manufacturing. In addition, the analytical approach developed in this study can be extended to the simulation of lithium-ion batteries, active materials, and other types of slurry stirring, thus demonstrating broad applicability.

Keywords: numerical simulation; stir; lithium-ion battery; particle tracing; uniformity

锂离子电池和超级电容器 (SCs) 目前被公认为两种有前景的储能和储能系统^[1]。锂离子电池结合了锂离子电池与超级电容器的优点, 正极材料通常为活性炭或电容型有机聚合物, 负极则通常采用锂离子电池的负极材料。作为一种新型储能器件, 其兼具高功率密度、高能量密度、超长循环寿命及宽工作温度范围等特性, 近年来在电化学储能领域备受关注^[2-3]。作为在电极制造中的关键步骤, 电极质量受到浆料涂布过程的高度影响, 器件的能量、功率和循环寿命的表现依赖于电极的成分与形态、电解质成分以及整体设计。浆料搅拌不均匀, 会直接导致涂布后的电极出现微结构差异, 具体表现为活性物质、导电剂等分布不均, 在后续的挥发中易导致黏结剂偏移, 这种不均性在器件循环中会引发锂枝晶生长、SEI膜不均及大界面阻抗等问题, 其负面效应最终体现在锂离子电池器件的整体性能衰减、循环寿命缩短和安全隐患增加^[4-7]。因此保障浆料均匀性是提升器件一致性及综合性能的核心前提。然而传统实验方法因周期长、成本高, 且难以揭示浆料内部微观混合机理, 故难以高效指导工艺优化^[8-11]。因此, 需要深入解析混合过程的内在机制, 从而为工艺参数的精准设计与优化提供关键理论依据^[12-15]。

在计算流体力学 (CFD) 领域已经有许多类似的研究, 如 Peter 与他的同事模拟了层叠式框架光催化反应器中混合状态模拟, 实现了纤维素颗粒的追踪; Micale 等人通过能耗与混合时间预测了固相颗粒在液体中的分散; 也有从液体颗粒的角度对搅拌行为进行模拟, 如 Sebastian 通过模拟搅拌式薄层反应器中液-液体系液滴尺寸对搅拌效果进行预测; 也有一些研究如 Li 等人以动态浓度的变化来研究搅拌效果^[16-20]。然而当前研究多局限于单一尺度, 而对宏观流动与微观运动相结合的综合分析关注不足, 本工作创新性地从流-固耦合下多尺度颗粒运动的视角切入, 深入分析与评判浆料混合的均匀性。其核心优势在于: 通过阐明微观动力学与宏观响应之间的因果关联, 不仅能深化理论认识, 更能增强对复杂颗粒系统行为的预测与控制能力。本研究采用有限元法, 构建了四种不同型号搅拌桨的流-固耦合多物理场仿真模型, 并通过引入可追踪颗粒, 系统对比分析各桨叶作用下的宏观流场特征、单颗粒运动轨迹及粒子群扩散行为, 揭示了不同桨型对混合过程的关键影响机制, 进而评估其各自的工艺适用性。该研究的多尺度对比分析方法, 为 LICs 与 LIBs 浆料搅拌的模拟评估引入新视角。

1 数值模拟

1.1 几何模型搭建与域划分

搅拌器选型是优化浆料混合工艺的核心环节。为此，本研究确立了以标准平底搅拌釜为容器的共性分析基准，并重点针对锚式、C型外叶片、定桨距水翼及后掠式这四种代表性工业叶轮（图 1）开展对比研究^[21-24]。通过严格统一其他所有运行参数，本研究旨在直接、有效地揭示不同叶轮类型本身对混合效果的影响机制。

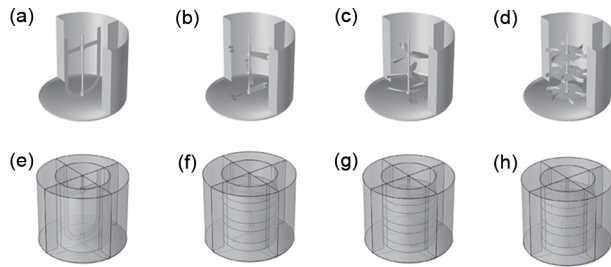


图 1 不同桨叶选型几何与域划分：(a)(e) 锚式叶轮；(b)(f) C型外叶片叶轮；(c)(g) 定桨距水翼叶轮；(d)(h) 后掠式叶轮

Fig. 1 Geometric models and complete geometric domain divisions for different mixer selections: (a)(e) Anchor impeller; (b)(f) C-type external blade impeller; (c)(g) Fixed-pitch hydrofoil impeller; (d)(h) Swept-back impeller

为构建有效量化搅拌质量标准，基于流场结构与作用机制，将搅拌釜内部划分为三个关键区域：扰流板区、桨叶区和釜底区。该划分是数值建模的关键预处理步骤，其具体依据、边界条件设定及其对模拟结果的影响，将在后续章节中详细阐述。此外，在几何处理上，叶轮轴被视为刚体，并在建立计算域时通过布尔差集运算予以扣除。通用几何模型参数由表 1 给出。

1.2 流-固耦合与颗粒示踪

电极浆料是一种典型的多组分复合体系，主要包含提供容量的活性物质、构建导电网络的导电剂、起黏接作用的聚合物黏结剂以及调节流变特性的有机溶剂^[11]。该浆料的宏观流变行为呈现复杂的固-液两相特征：溶剂作为连续介质，而活性物质等固体颗粒则作为分散相悬浮其中。这一特征直接决定了浆料的稳定性、可加工性及最终涂布质量。分散相的堆积状态与相互作用是影响浆料黏度、屈服应力等关键流变参数的主因，进而关系到涂布工

表 1 几何模型参数

Table 1 Geometric model parameters

参数名	数值	单位
挡板数	4	1
挡板宽度	0.3	m
旋转域直径	1.0	m
釜直径	2.0	m
釜高度	1.8	m
釜底小半径	0.2	m
叶轮轴底部位置	+50	mm
叶轮轴长度	1.55	m
叶轮轴轴径	0.05	m
桨叶间间隔	0.5	m

艺窗口的宽窄与电极膜层的均匀性。由于黏结剂在 N-甲基吡咯烷酮等常用溶剂中溶解性良好，且导电剂比例极低，考虑到它们对浆料的流变性产生的影响，在流变模型中纳入连续相考虑。

大量实验研究证实，浆料流动行为的剪切应力与剪切速率之间的关系不符合牛顿流体的线性规律，它展现出强烈的剪切稀化特性^[25-27]。这种特性使得浆料在搅拌、涂布等工艺过程中表现出复杂的流动与变形行为。采用工程和学术界广泛采用的 Ostwald-De Waele 幂律模型，该模型刻画了浆料的流变学核心特征^[28-29]：

$$\eta = k\dot{\gamma}^{n-1} \quad (1)$$

在流场与固相场中，不得不重视重力的影响，它是颗粒沉降的关键所在。在无其他外体积力的情况下，有：

$$\frac{d}{dt} \left(m_p \frac{d\vec{q}}{dt} \right) = m_p \vec{g} \frac{\rho_p - \rho_l}{\rho_p} + \frac{1}{r_p} m_p (\vec{u}_p - \vec{v}_l) \quad (2)$$

固体颗粒轨迹的计算通过曳力克服重力，因此右式中，第一项表示固体颗粒受到的重力浮力之和，第二项为固体颗粒在液相中所受的曳力。高转速下采用 RANS-EVM 湍流的 SST 模型较适合多相流，需要计算湍动能 k 与比耗散率 ω ：

$$\rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) k = \vec{\nabla} \cdot [(\mu + \mu_T \sigma_k) \vec{\nabla} k] + P - \beta_0 \rho \omega k \quad (3)$$

$$\rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \omega = \vec{\nabla} \cdot [(\mu + \mu_T \sigma_\omega) \vec{\nabla} \omega] + \frac{Y_\omega}{\mu_T} \rho P - \beta \rho \omega^2 + 2(1 -$$

$$f_{v1}) \frac{\sigma_\omega \rho}{\omega} \vec{\nabla} k \cdot \vec{\nabla} \omega \quad (4)$$

这两个方程是 SST $k-\omega$ 湍流模型 (shear stress transport) 的控制方程，由 Menter 在 1994 年提出。它们并非从 N-S 方程直接推导得出，而是基于物理洞察、量纲分析和经验修正构建的半经验

模型,十分适用于工程化领域^[30]。

1.3 边界条件与初始条件

为了更真实地反映颗粒与壁面(包括釜体外壁、挡板内壁及叶轮轴表面)碰撞时的物理行为,需要专门设置相应的壁面边界条件。与流体相在壁面处采用的无滑移条件不同,对于离散的固相颗粒,假设满足能量守恒与动量守恒,这一设定在物理上意味着当颗粒撞击到任何壁面时,其碰撞过程近似为理想的弹性碰撞,这体现为颗粒撞击壁面后,其速度在垂直于壁面方向的分量大小不变但方向反转,而平行于壁面的速度分量则保持不变,该边界条件能够有效模拟颗粒从壁面弹开、而非黏附或被壁面吸收的动态过程,是模拟搅拌釜内颗粒与壁面相互作用最常见且合理的简化方式之一。具体表达如下:

$$\vec{v} = \vec{v}_c - 2(\vec{n} \cdot \vec{v}_c)\vec{n} \quad (5)$$

为提高计算效率并准确模拟桨叶的旋转效应,本研究基于搅拌釜的几何对称性,采用冻结转子法进行稳态-瞬态模拟。该方法将包含桨叶的区域设为旋转参考系,在保证计算精度的同时,显著降低了计算资源的消耗,并改善了数值收敛性。为便于深入分析流场与混合特性,计算域被具体划分为三个特征区域:釜底区(折流板以下)、挡板区(折流板及其延伸段)以及中心的旋转区。通过监测各区域内颗粒的分布与运动状态,可系统评估浆料的混合均匀性。

颗粒模拟采用了图2所示的自上而下加料模式,旨在模拟实际生产工艺中固体组分的投料过程。初始化时,所有颗粒均以本地流场速度作为初始速度,该设置采用弱化人为扰动,使颗粒运动更快地进入真实的流体动力学状态。同时,为获得可靠的统计结果,共投放了10000个物理属性一致的示踪颗粒,以充分捕捉并量化颗粒运动的随机分散行为。

所有的模型参数与初始条件均在表2中给出。

1.4 网格独立性验证

在进行数值模拟前,需要先进行网格独立性分析,其目的在于确保精度的同时降低所需要的计算资源。为此,这里设置了三组对比网格,本工作采用外围扫掠式网格搭配内部自由四面体网格的形式,平面剖面图如图3所示。

表3给出了三种网格的具体信息。

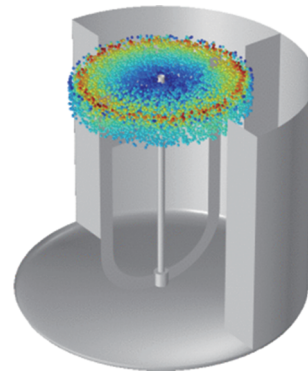


图2 初始颗粒分布

Fig. 2 Initial Particle Distribution

表2 模型参数

Table 2 Model parameters

符号	数值	单位	说明
f	2	1/s	转速
d_p	12	μm	粒径
μ	0.0015	$\text{Pa}\cdot\text{s}$	液相动力黏度
ρ_l	1030	kg/m^3	液相密度
ρ_s	4500	kg/m^3	固相密度
m	50	$\text{Pa}\cdot\text{s}$	流体黏度系数
n	0.9	1	流动特性指数
Y_{ref}	1	1/s	参考剪切速率

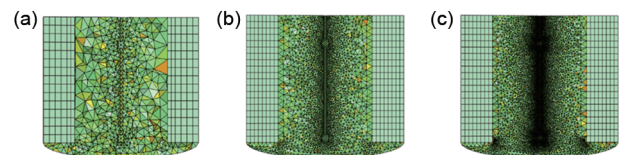


图3 网格独立性验证用到的三种网格:(a)粗糙网格;(b)适中网格;(c)精细网格

Fig. 3 Three types of grids used for grid independence verification: (a) coarse grid; (b) medium grid; (c) fine grid

同时以锚式叶轮为基准,量化了三种网格的误差性,选择平均绝对百分比误差(MAPE)作为评价网格独立性的标准,其核心优势在于直观性和可解释性,它将所有误差统一转化为百分比形式,消除了数据量纲和数值尺度的影响:

$$\text{MAPE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|y_i - \hat{y}_i|}{y_i} \quad (6)$$

图4给出了不同网格密度下流速场的可视化与粒子数密度量化结果,图5给出了它们的MAPE值。粒子数密度定义为在该域内单位体积内的粒子数量,这反映了分散性,数值绝对大小与初始粒子密度相关。结果表明,无论是在流速和粒子数密度

表 3 三种网格的具体信息

Table 3 Specific information of three types of grids

节点	粗糙网格	适中网格	精细网格
外轮映射节点数	10	15	15
内轮映射节点数	10	15	15
挡板映射节点数	4	6	6
挡板延伸节点数	2	2	2
扫掠节点数	15	20	20
最大自由网格大小	0.19	0.101	0.0702
最小自由网格大小	0.0569	0.019	0.00759
最大单元增长率	1.2	1.13	1.1
自由网格曲率因子	0.7	0.5	0.4
狭窄区域分辨率	0.6	0.8	0.9
域单元数	32628	299527	1231235
网格最小质量	0.196	0.189	0.155

的独立性分析中，适中网格与精细网格的差异性均小于 5%，可认为在适中网格的前提下，已经达到可信赖的误差范围之内。

2 模拟结果与讨论

2.1 流体运动状态分析

搅拌器的选型本质上是一个系统性工程问题，其核心在于综合评估几何结构对釜内流场模式的决定性影响。选型时需首要考虑叶轮类型及尺寸，因其直接决定了流场的剪切速率分布、循环强度及宏观流动结构，而这些是影响混合效率、传质与传热效果的关键因素。在图 6 所示的流场和庞加莱截面对比中，四种叶轮的几何构型决定了其能量输入与

流场结构的本质不同。其中，锚式叶轮因其轮廓紧贴釜壁，旋转时在壁面附近产生大范围、高剪切的层流或湍流边界层，形成强制的宽域壁面流，这种环流能力对防止颗粒沉积与强化壁面传热尤为有效。与之形成鲜明对比的是，C 型外叶片叶轮、定桨距水翼叶轮与后掠式叶轮均表现出强烈的中心聚集效应：它们的叶片设计主要将能量输入集中在旋转轴附近，流体受离心力与压力梯度驱动向中心汇聚，从而形成强中心涡旋，而非将能量分散至整个釜体。这一流型导致釜内速度分布不均，在远离中心的近壁区域形成大范围的低速滞留区，该区域流体剪切率显著下降，致使作用于颗粒的流体曳力不足，最终引发颗粒逐渐沉降并在壁面堆积，产生的原因在于其流场构建机制。C 型外叶片叶轮的弯曲叶片兼具一定的轴向泵送能力，可在中心涡外形成较弱的外围循环；定桨距水翼叶轮则依靠其翼型剖面产生升力，推动流体沿轴向运动，中心涡与轴向流的组合影响混合深度；后掠式叶轮的后倾叶片能降低功耗并增强湍流扩散，但其中心聚集也更为明显，颗粒悬浮更多依赖湍动而非整体循环。这是由在同轴系统下在垂直方向上的泵送能力降低所导致的。

以流场的角度，垂直方向上锚式叶轮的流场呈现整体中心区域向上而两侧下降的趋势，水平方向上则呈现均匀的环形流场[图 6(a) (e)]，这种类型的流场或可提高搅拌均一性。C 型外叶片叶轮的流

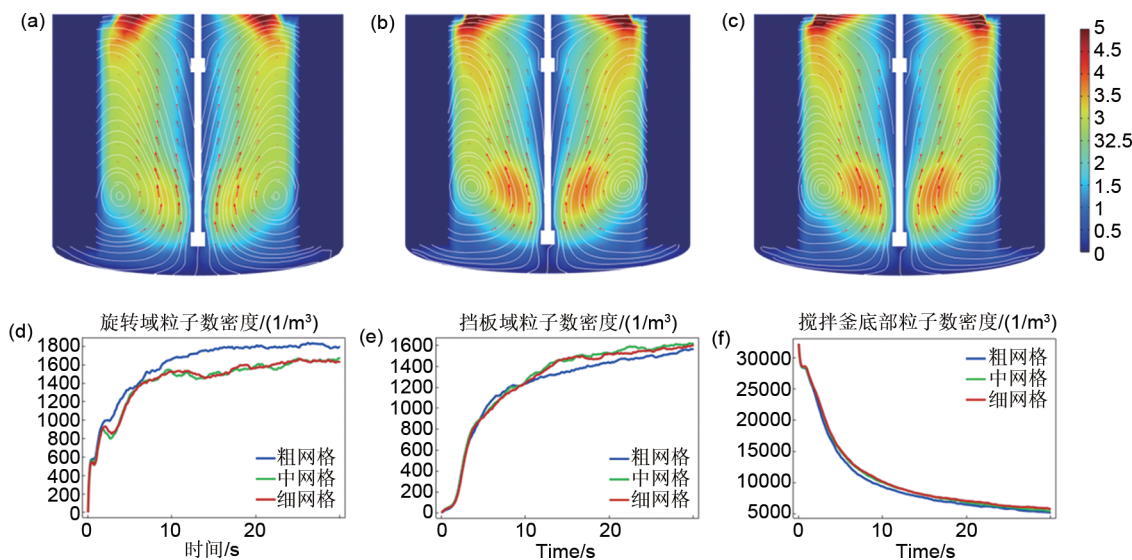


图 4 (a)~(c) 速度；(d)~(f) 三个分域的网格独立性验证粒子数密度量化

Fig. 4 Quantification of particle number density for three subdomain grid independence verification

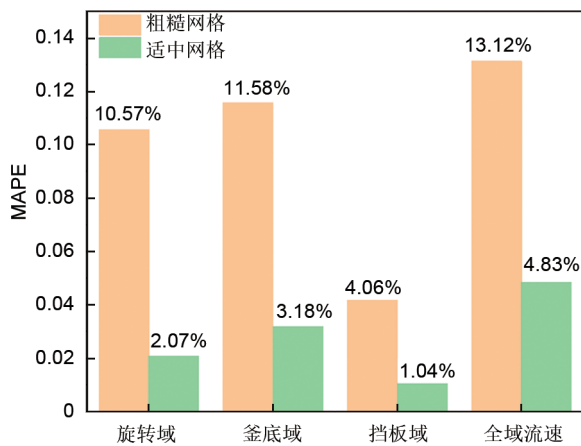
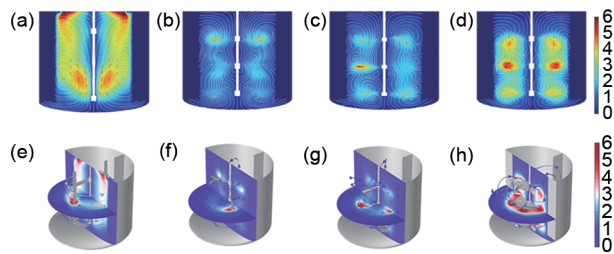


图5 网格独立性验证MAPE分析

Fig. 5 Grid Independence verification MAPE analysis

图6 锚式叶轮、C型外叶片叶轮、定桨距水翼叶轮和后掠式叶轮的(a)~(d)剖面流速图、(e)~(h)流场图($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$)Fig. 6 (a)~(d) Sectional velocity and (e)~(h) flow field diagrams of anchor impellers, C-shaped outer blade impellers, fixed pitch hydrofoil impellers, and swept back impellers ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$)

场轨迹揭示其驱动流体形成全域性的向心流动[图6(b)(f)]。值得注意的是，其叶片与壁面的流体相互作用微弱，边界层反弹效应几乎可忽略，流体动量直接穿透近壁区指向中心。这种流动模式在釜体顶部和底部形成对称的双涡心结构，整体呈中心高压区向两极扩散的流动形态。在低动力黏度流体中，此类流场对重力的抵抗能力有限：中心区高速流体的曳力仅能部分抵消颗粒沉降，边缘区弱流动则难以阻止粒子向底部富集，存在显著的沉降风险。定桨距水翼叶轮展现出截然不同的能量分布特征[图6(c)(g)]：其通过精密设计的翼型结构在中心旋转域生成高强度、高定向的射流，形成集中能量核心。该叶轮产生的涡尺度较小且在垂直方向分布均匀，赋予流场优异的空间一致性。当操作转速足以提供充分曳力时，这种流态能高效提升颗粒、打破团聚，实现全域均匀悬浮，尤其在中等黏度流体中表现卓越。后掠式叶轮的独特之处在于其与壁面的强相互作用[图6(d)(h)]，叶片后掠角度诱导的流体反

弹显著改变了主流场结构，形成以水平分层为主的独立涡环系统。各层涡流间缺乏垂向动量交换，导致流场呈现“层间隔离”状态。这种碎片化的流动模式虽能维持局部混合，但因层际物质传递受阻，整体混合效率受限，对追求全域均匀的搅拌任务尤为不利。

2.2 粒子运动状态分析

为量化评估混合均匀性，本研究采用探针分层取样，并对搅拌区、挡板区及釜底区分别进行域内颗粒数密度的体积积分与平均。锚式叶轮在三个区域的颗粒分布最为均衡，收敛趋势最为显著，浆料均一性最佳；定桨距水翼叶轮次之，尽管短期存在发散现象，在更长的时间效应上会有不错的收敛性；其后依次为后掠式与C型外叶片叶轮，发散效应显著，需要更久的时间以及更高的能耗来使浆料达到平衡。图7展示的粒子数密度分布图为此提供了关键证据：后掠式叶轮的粒子分布呈现显著的空间分层现象，与先前的流场预测完全吻合，混合性能最差；而C型外叶片叶轮的表现同样不尽人意，底部及壁面区域出现大面积粒子富集带，这与前文揭示的低动力黏度工况下的流场缺陷直接相关：其中心向两极扩散的流动模式在低黏度流体中需要更高的转速提供足够曳力抵抗重力沉降。这一发现恰恰解释了浆料制备中添加黏结剂的核心作用之一，即通过提高流体黏度，可强化流场对颗粒的携带能力，从而弥补此类溶剂的短板。同时，注意到三类叶轮共有的分布异常特征：挡板区粒子数密度普遍高于中心旋转区。这与锚式叶轮的均匀分布形成鲜明对比，根源在于其能量过度集中于轴心区域——高速核心流将粒子向中心抛射，而近壁低速区则因曳力不足形成粒子滞留。若解决此问题，叶轮的綜合混合效能或将提升。

颗粒的运动状态是深入理解锂离子电容器浆料混合机理的关键定性观测手段。为此，本工作提出并实践了一套系统的多尺度可视化分析方法，旨在通过观测单颗粒轨迹的随机性与颗粒群体的整体扩散行为，构建连接微观运动与宏观混合效果的桥梁。如图8所示，选取第30 s时间点作为比对，追踪3个随机示踪颗粒的轨迹来定性分析个体动力学，并观察200个颗粒的路径分布来揭示群体输运模式。虽然受限于颗粒尺寸（约 $10\ \mu\text{m}$ ）与反应釜规模（约1 m）的巨大差异，本研究未能有效监测

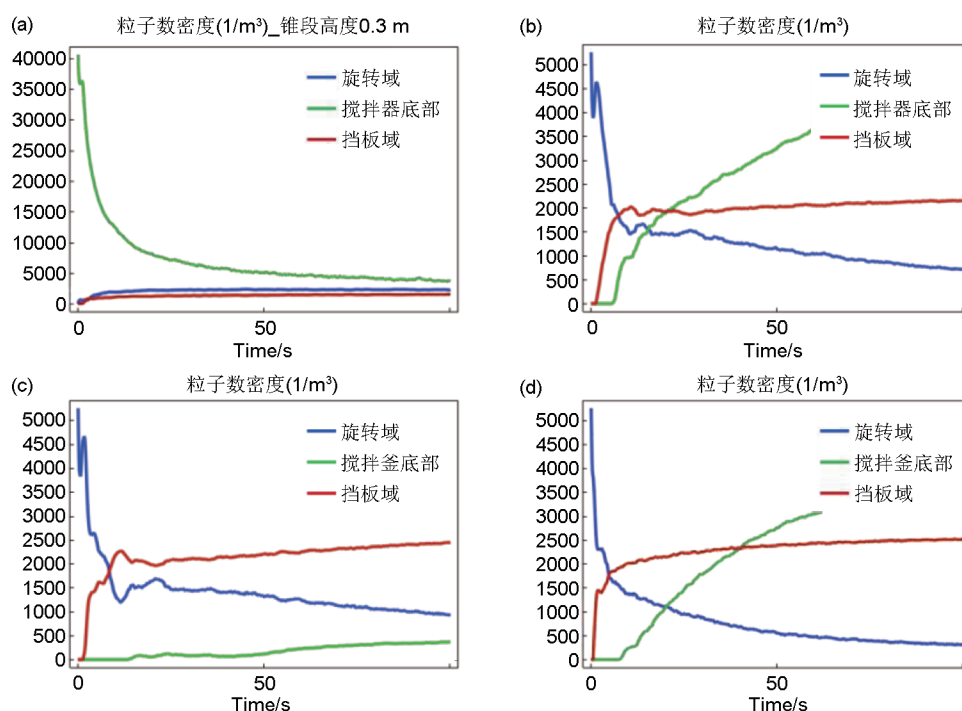


图7 锚式叶轮、C型外叶片叶轮、定桨距水翼叶轮和后掠式叶轮的域粒子数密度

Fig. 7 Domain particle number density of anchor impellers, C-type outer blade impellers, fixed pitch hydrofoil impellers, and swept back impellers

到颗粒间碰撞事件，通过将上述定性的运动可视化，与前述流场速度云图、定量的颗粒分布统计相结合，仍然能够实现从不同维度交叉验证与深度融合。这种流场-运动-分布的多角度耦合分析，能更可靠地提取关于流场结构、能量耗散与最终混合效率的关键特征，从而实现对不同桨型作用于电极浆料混合机理的实质性洞察。

在颗粒群运动轨迹的可视化分析中，我们通过

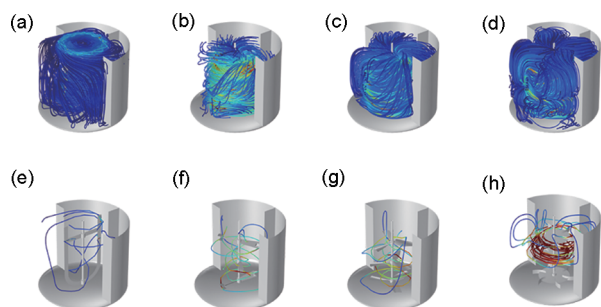


图8 锚式叶轮、C型外叶片叶轮、定桨距水翼叶轮和后掠式叶轮的 (a)~(d) 粒子群轨迹示意图、(e)~(h) 单颗粒轨迹示意图

Fig. 8 Schematic diagrams of (a)~(d) single particle trajectories and (e)~(h) particle swarm trajectories for anchor impellers, C-type outer blade impellers, fixed pitch hydrofoil impellers, and swept back impellers

观察大量示踪颗粒的运动路径，获得了反映物料宏观输运与空间扩散模式的可视化分布图，并由此揭示了不同叶轮的核心流场特征及其在锂电浆料混合中存在的局限性。锚式叶轮的粒子群轨迹显示，流线能有效覆盖几乎整个搅拌域，其强大的壁面驱动形成了全局循环，这直观地解释了其宏观混合均匀性最优的结果。C型外叶片叶轮的轨迹则呈现出高度集中的“粒子射流”形态，高速粒子从中心径直冲向釜壁后动能迅速衰减，导致核心区粒子更替过快而外围区相对停滞，这一定性观察预示了其在整体分布均匀性上存在的不足。定桨距水翼叶轮的粒子群轨迹展现出更优的协同性，其核心旋转区与外围流场间的流线过渡平缓，构成了高效且平衡的整体循环结构。而后掠式叶轮的轨迹初看复杂，但可辨识出流场存在分层结构，不同区域间的轨迹混合微弱，直接印证了其定量分析中混合速率缓慢的结论。这些在群体尺度上的可视化观察，首先定位了各叶轮宏观混合行为的核心模式与潜在问题。

而在单颗粒运动轨迹分析中，通过对典型颗粒的精细追踪，不仅探究了上述宏观现象的微观根源，更关键地揭示了与粒子群整体表象有所差异甚至矛盾的异常细节。例如，锚式叶轮的单颗粒轨迹

清晰地显示,颗粒在强大径向剪切下易高速撞击并附着于叶片表面。这一微观机制在支撑其全局循环的同时,却也暴露出明显的缺点:即导致浆料局部滞留,并对高镍正极等敏感活性材料带来破碎风险。C型外叶片叶轮与定桨距水翼叶轮的单颗粒轨迹虽同属轴向流模式,但前者颗粒离开中心后速度骤降,后者则过渡平缓,这一差异从个体动力学层面补充解释了两者的宏观扩散效率的不同。对于后掠式叶轮,单颗粒轨迹最为深刻地揭露了其症结:颗粒被禁锢于叶片构成的局部流线内循环,难以参与全局交换,这一发现精准对应了其粒子群轨迹所显示的分层现象与混合低效问题。

为验证模型的适配性与先进性,将本模型与传统双向耦合的浓度方差模型进行对比验证。传统方法基于浓度扩散与对流的物理机制进行建模。与本职工作模型不同,传统模型在与壁面相互作用的过程中,更倾向于将流体视为均相介质,而非处理为固体颗粒间的碰撞过程。此外,由于传统模型采用双向耦合策略,在相同网格密度下,本职工作模型的计算时间(6小时32分钟)远低于浓度方差模型(5天17小时),这表明单向粒子示踪模型在实际工程应用中具有更高的可行性。以第30秒为例,图9展示了四种叶轮构型下的浓度方差分布。图中清晰可见:锚式叶轮的混合性能最优,而后掠式叶轮的效果最差,这与先前分析结论一致;然而,在传统模型下,另外两种叶轮的表现极为相近。这一现象归因于传统模型缺乏对壁面相互作用的合理描述,而本职工作所采用的模型则更适用于此类问题的分析。图10给出了传统模型下四种叶轮的物质迁移轨迹。锚式叶轮的结果与其单颗粒轨迹相似,后掠式叶轮的结果则与其粒子群轨迹相似,但二者均无法实现多角度分析;图10的结果仅能反映出C型叶轮与定桨距水翼叶轮在垂直方向上的泵送能力,却无法揭示C型叶轮外叶片为主要能量输入与扰流源

的事实,同样,定桨距水翼叶轮在中心区域的聚集现象也未得到有效体现。

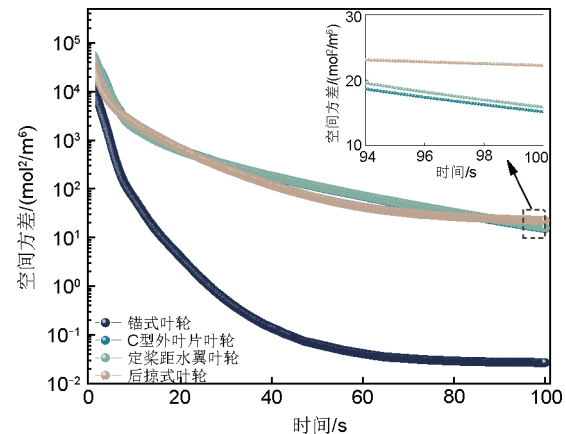


图9 四种叶轮的浓度空间方差
Fig. 9 Spatial variance of concentration for four types of impellers

综上,本研究采用多角度分析框架,其核心目的在于超越单一尺度的观测局限,通过宏-微观运动信息的交叉印证,系统揭示搅拌混合的本质机理。这一研究路径的核心优势在于:它不仅能确认宏观流场与混合结果之间的相关性,更能深入诊断其微观成因,并敏锐捕捉到单一尺度分析中易于忽略的矛盾信号。例如,锚式叶轮在群体尺度上展现的完美循环,与在单颗粒尺度暴露的附着风险,共同构成了对其性能全面而辩证的评估;而后掠式叶轮在群体轨迹中模糊的分层趋势,在单颗粒轨迹中找到了颗粒被局部禁锢的确切证据。这种由表及里、相互校验的分析方法,极大地增强了对复杂流固耦合现象的解释力与预测力,使叶轮评价从经验性的性能对比,深化为机理驱动的优劣归因。该方法体系具有明确的逻辑性和可拓展性,为相近的浆料搅拌工艺的优化提供了从现象描述到根源诊断的强大分析工具。

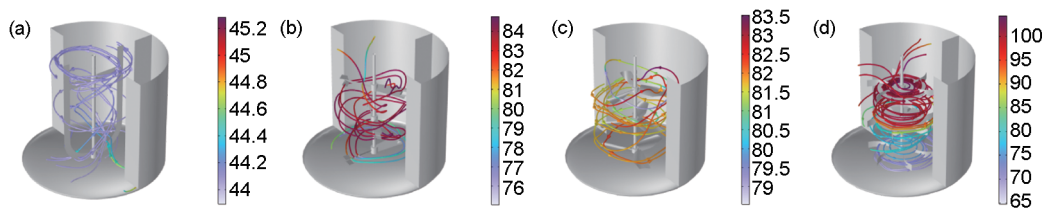


图10 (a) 锚式叶轮, (b) C型外叶片叶轮, (c) 定桨距水翼叶轮和 (d) 后掠式叶轮的浓度方差法的物质迁移轨迹
Fig. 10 Material migration trajectories using concentration variance method for (a) anchor impellers, (b) C-type outer blade impellers, (c) fixed pitch hydrofoil impellers, and (d) swept back impellers

2.3 仿真有效性分析

为进一步确认该定性评估模式下的物理可靠性，本节从现有实验和仿真文献进行了验证。结果表明，对比其他类型的叶轮，尽管锚式叶轮在高雷诺数下的优势并不明显，但在本文低雷诺数的剪切稀化层流的背景下，锚式叶轮在传质、传热等多个方面具有显著优势^[31-33]。这充分体现了该类评估在层流下预测的准确性，为快速判断浆料搅拌混合机制提供了新的见解。

2.4 模型优化讨论

本工作的模型采用一步加料方法，绝大部分的浆料具有明显的剪切稀化特性，只需要提供相对应的流体参数即可以很好地延伸至钠离子电容器以及离子电池活性物质的浆料。尽管如此，存在一些特殊情况，对于物料的非同步投入是不合适的。例如，锂离子电池硅负极材料采用的黏结剂往往为海藻酸钠与丁苯橡胶，然而丁苯橡胶在高剪切速率下会破乳，在一些应用中存在先后加料的情况，该模型难以于此应用。

模型中采用湍流方程，稳态计算可以使其胜任更高转速的搅拌工作；然而，当体系不为稳态，例如存在大量的气相时，湍流模型会演化为气泡-液相的双相湍流模型，此时模型与时间相关联，该模型的适用性较差。与此同时，颗粒数对于整个体系过小，一些颗粒的非弹性相互碰撞未能较好体现，因此对于高固相的体系也较难应用。因此，对于不同的延伸条件，在这里提出以下模型优化方案：

(1) 将模型分两步稳态计算，将第一步物料加入的粒子模型的最最终态与第二步物料加入的降速搅拌的稳态流场结合，可以拓展至分步物料加入；

(2) 将模型从稳态-单向耦合转变为瞬态-单项耦合，可以延拓至多相的浆料搅拌模型；尽管这样做会大大提升仿真时间，但仍会低于传统双向耦合模型；

(3) 对于颗粒的非弹性碰撞，为无体积粒子增加“伪体积”可以在保证收敛性的同时延拓至高固相浆料，即为粒子设置空间探针，监测到半径范围内存在其他粒子时，引入非弹性碰撞方程与恢复系数以模拟粒子的非弹性碰撞。

3 结 论

本研究通过建立流场分析、颗粒分布统计与多

尺度颗粒运动可视化相结合的方法，系统揭示了锚式、C型外叶片、定桨距水翼及后掠式四种叶轮在锂离子电池浆料搅拌中的混合机理。该工作为浆料搅拌工艺的叶轮选型提供了机理指导，未来可通过结合实验观测与跨尺度模拟，进一步关联混合均匀性与最终锂离子电池器件电化学性能的评估，有以下结论：

(1) 在低转速下，锚式叶轮宏观混合最优，定桨距水翼叶轮综合性能均衡，C型外叶片叶轮及后掠式叶轮则分别因能量快速衰减与流场分层问题而不适用于高均匀性要求场景；

(2) 相比较于传统的浓度方差法，本研究在颗粒的完整轨迹示踪上有明显的优势，同时壁面的碰撞处理可以更加贴合于电容器或电池生产环节中固相的实际转移，同时仿真时间大大缩短了%，对实际工程应用提供了更为合适、便捷的视角；

(3) 本工作采用的粒子群运动轨迹与单颗粒运动轨迹定性分析，在结合定量分析时可以有效规避或预测一些流体和粒子行为，提供对应的活性物质与浆料特性即可延伸至绝大多数锂、钠离子电容器或离子电池等二次储能器件的其他活性物质浆料，具有很好的普适性和延伸性；

(4) 该研究的视角在层流下具有良好的评估作用，对于一些特殊的延伸情况，可以将该模型作为底层模型，在对模型进行定向增加条件后均可更贴近实际模型。

符号说明

f_{v1}	混合函数，量纲为1
k	湍动能， $m^2 \cdot s^{-2}$
k_1	稠度系数， $Pa \cdot s^n$
m_p	颗粒质量大小，g
n	流动行为指数，量纲为1
P	湍动能产生项， $W \cdot m^{-3}$
u, v	固相、液相在某一瞬间的瞬时速度
y, \hat{y}	目标值，回归值，量纲随目标函数值而定
μ	分子动力黏度， $Pa \cdot s$
μ_r	湍流黏度， $Pa \cdot s$
η	液体剪切应力，Pa
$\dot{\gamma}$	液体剪切速率， s^{-1}
ρ_p, ρ	分别固相颗粒密度与液相密度， $Pa \cdot s$
ω	比耗散率， s^{-1}
$\sigma_k, \sigma_\omega, \beta_0, \gamma_\omega$	经验系数，量纲为1

下角标

p—— particle, 颗粒

l—— liquid, 液体

参考文献

- [1] LI B, ZHENG J S, ZHANG H Y, et al. Electrode materials, electrolytes, and challenges in nonaqueous lithium-ion capacitors [J]. *Advanced Materials*, 2018, 30(17): 1705670. DOI: 10.1002/adma.201705670.
- [2] ARISTOTE N T, DENG X L, ZOU K Y, et al. General overview of sodium, potassium, and zinc-ion capacitors[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2022, 913: 165216. DOI: 10.1016/j.jallcom.2022.165216.
- [3] GUO L C, HU P, WEI H. Development of supercapacitor hybrid electric vehicle[J]. *Journal of Energy Storage*, 2023, 65: 107269. DOI:10.1016/j.est.2023.107269.
- [4] LI B W, WANG S F, HE P, et al. Pore microstructure and mass transfer dynamics in thick electrodes for high energy density lithium-ion batteries[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2025, 511: 161931. DOI:10.1016/j.cej.2025.161931.
- [5] XIONG R Y, ZHANG T F, HUANG T L, et al. Improvement of electrochemical homogeneity for lithium-ion batteries enabled by a conjoined-electrode structure[J]. *Applied Energy*, 2020, 270: 115109. DOI:10.1016/j.apenergy.2020.115109.
- [6] SEO S K, KIM H, SAMADI A, et al. Surrogate optimization of lithium-ion battery coating process[J]. *Journal of Cleaner Production*, 2024, 447: 141064. DOI:10.1016/j.jclepro.2024.141064.
- [7] CHEN Q Y, ZHAO L C, CHEN X H, et al. Challenges and numerical solutions for multi-domain and multi-physics coupling in heterogeneous lithium-ion battery model simulation[J]. *eTransportation*, 2025, 25: 100452. DOI: 10.1016/j.etrans.2025.100452.
- [8] YE J C, BAUMGAERTEL A C, WANG Y M, et al. Structural optimization of 3D porous electrodes for high-rate performance lithium ion batteries[J]. *ACS Nano*, 2015, 9(2): 2194-2202.
- [9] PLATEAU T P, PHAM H, ZHU Y Q, et al. Enabling ultrathick electrodes *via* a microcasting process for high energy and power density lithium-ion batteries[J]. *Advanced Energy Materials*, 2022, 12(38): 2201353. DOI:10.1002/aenm.202201353.
- [10] PARK J I, HONG S B, JIN D, et al. Microfluidic shape analysis of non-spherical graphite for Li-ion batteries *via* viscoelastic particle focusing[J]. *Small*, 2024, 20(45): 2404456. DOI: 10.1002/smll.202404456.
- [11] KRAYSBERG A, EIN-ELI Y. Conveying advanced Li-ion battery materials into practice the impact of electrode slurry preparation skills[J]. *Advanced Energy Materials*, 2016, 6(21): 1600655. DOI: 10.1002/aenm.201600655.
- [12] FARAJI NIRI M, REYNOLDS C, ROMÁN RAMÍREZ L A, et al. Systematic analysis of the impact of slurry coating on manufacture of Li-ion battery electrodes *via* explainable machine learning[J]. *Energy Storage Materials*, 2022, 51: 223-238. DOI: 10.1016/j.ensm.2022.06.036.
- [13] SHUKLA G, DEL OLMO DIAZ D, THANGAVEL V, et al. Self-organization of electroactive suspensions in discharging slurry batteries: A mesoscale modeling investigation[J]. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2017, 9(21): 17882-17889.
- [14] GE M, ZHENG G A. Fluid-solid mixing transfer mechanism and flow patterns of the double-layered impeller stirring tank by the CFD-DEM method[J]. *Energies*, 2024, 17(7): DOI: 10.3390/en17071513.
- [15] MA F D, FU Y B, BATTAGLIA V, et al. Microrheological modeling of lithium ion battery anode slurry[J]. *Journal of Power Sources*, 2019, 438: 226994. DOI:10.1016/j.jpowsour.2019.226994.
- [16] NAGARAJAN S, STELLA L, LAWTON L A, et al. Mixing regime simulation and cellulose particle tracing in a stacked frame photocatalytic reactor[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2017, 313: 301-308. DOI:10.1016/j.cej.2016.12.016.
- [17] MAAÛ S, REHM T, KRAUME M. Prediction of drop sizes for liquid-liquid systems in stirred slim reactors: Part II: Multi stage impellers[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2011, 168(2): 827-838. DOI:10.1016/j.cej.2011.01.084.
- [18] TAMBURINI A, CIPOLLINA A, MICALE G, et al. CFD simulations of dense solid-liquid suspensions in baffled stirred tanks: Prediction of solid particle distribution[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2013, 223: 875-890. DOI:10.1016/j.cej.2013.03.048.
- [19] LI Y, CHEN Z H, CHENG C, et al. Collaborative mechanisms of impeller stirring and microwave heating in hydrofluoric acid dissociation of beryllium ore: Multiphysics-field numerical simulation[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2025, 524: 169258. DOI:10.1016/j.cej.2025.169258.
- [20] HUANG Y K, MAHMOODPOOR DEHKORDY F, LI Y, et al. Enhancing anaerobic fermentation performance through eccentrically stirred mixing: Experimental and modeling methodology[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2018, 334: 1383-1391. DOI:10.1016/j.cej.2017.11.088.
- [21] 李迅, 林如山, 叶国安, 等. 双层折叶桨式搅拌器三维流场的数值模拟[J]. *化工机械*, 2015, 42(3): 421-424. DOI:10.3969/j.issn.0254-6094.2015.03.028.
- LI X, LIN R S, YE G A, et al. Numerical simulation of three-dimensional flow fields generated by two-layer pitched blades[J]. *Chemical Engineering & Machinery*, 2015, 42(3): 421-424. DOI: 10.3969/j.issn.0254-6094.2015.03.028.
- [22] JO H J, KIM Y J, HWANG W R. Enhancement of mixing performance with anchor-type impellers *via* chaotic advection[J]. *Chemical Engineering Science*, 2021, 243: 116757. DOI:10.1016/j.ces.2021.116757.
- [23] ZHANG J J, GAO Z M, CAI Y T, et al. Mass transfer in gas-liquid stirred reactor with various triple-impeller combinations[J]. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 2016, 24(6): 703-710. DOI:10.1016/j.cjche.2015.12.008.
- [24] HOSEINI S S, NAJAFI G, GHOBADIAN B, et al. Impeller shape-optimization of stirred-tank reactor: CFD and fluid structure interaction analyses[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2021,

- 413: 127497. DOI:10.1016/j.cej.2020.127497.
- [25] JUN LEE W, PARK N, IN PARK J, et al. Extensional rheology of anode slurries for li-ion batteries containing natural and synthetic graphite[J]. Journal of Colloid and Interface Science, 2024, 663: 508-517. DOI:10.1016/j.jcis.2024.02.152.
- [26] ZHANG F, WU K M, XU X, et al. 3D printing of graphite electrode for lithium-ion battery with high areal capacity[J]. Energy Technology, 2021, 9(11): 2100628. DOI:10.1002/ente.202100628.
- [27] PARK N, LEE M, JUNG H, et al. Complex rheological response of Li-ion battery anode slurries[J]. Journal of Power Sources, 2024, 608: 234607. DOI:10.1016/j.jpowsour.2024.234607.
- [28] JENA S K, MAHAPATRA S K, SARKAR A, et al. Thermo-solutal buoyancy-opposed free convection of a binary Ostwald-De Waele fluid inside a cavity having partially-active vertical walls[J]. Journal of the Taiwan(China) Institute of Chemical Engineers, 2015, 51: 9-19. DOI:10.1016/j.jtice.2015.01.007.
- [29] CELLI M, BARLETTA A. Onset of convection in a non-Newtonian viscous flow through a horizontal porous channel[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2018, 117: 1322-1330. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.10.089.
- [30] TAMBURINI A, BRUCATO A, CIOFALO M, et al. CFD simulations of early- to fully-turbulent conditions in unbaffled and baffled vessels stirred by a Rushton turbine[J]. Chemical Engineering Research and Design, 2021, 171: 36-47. DOI: 10.1016/j.cherd.2021.04.021.
- [31] KOMODA Y, DATE T. Enhancement of laminar mixing by an anchor impeller with rotationally reciprocating motion[J]. AIP Advances, 2022, 12: 015013. DOI:10.1063/5.0075750.
- [32] BENMOUSSA A. Agitation of viscoplastic fluid in a rotating vessel using close clearance agitators[J]. Eng, 2023, 4(4): 2525-2541. DOI:10.3390/eng4040144.
- [33] DELACROIX B, FRADETTE L, BERTRAND F, et al. Which impeller should be chosen for efficient solid-liquid mixing in the laminar and transitional regime?[J]. AIChE Journal, 2021, 67(11): e17360. DOI:10.1002/aic.17360.

广告索引

封二 北京清能互联科技有限公司

封三 惠州亿纬锂能股份有限公司

封四 中储国能(北京)技术有限公司

前插 1 «储能科学与技术»公益广告

后插 1 南方电网电力科技股份有限公司

后插 2 中科海钠科技有限责任公司

后插 3 上海交通大学中英国际低碳学院

后插 4 广西电化学能源材料与器件科技成果转化中
试研究基地

后插 5 厦门宇电自动化科技有限公司

后插 6 北京卫蓝新能源科技有限公司

后插 7 天目湖先进储能技术研究院有限公司

后插 8 国家电网公司电力科学研究院电池储能技术
实验室