锂离子电池仿真在动力电池虚拟设计中的应用

国联汽车动力电池研究院有限责任公司

在动力电池正向开发由经验驱动转向模型驱动的背景下，锂离子电池仿真已逐步成为贯穿材料—电极—电芯—系统多尺度的虚拟设计主干。其应用优点包括：节约开发周期及试验成本，替代部分测试迭代环节；优化试验方案设计，减少耗材支出；支持极端或不可逆工况复现及拓展，补足试验过程难获取物理量变化及分布信息等。本公司在各类项目实践中针对锂离子电池生产研发中不同需求和设计环节，应用多层级、多物理场仿真，积累数据经验，实现流程优化。

性能要求　安全边界　寿命预测　热管理优化

性能仿真

输入参数来源

设计参数

参数测试方法

等温量热仪　EIS
恒位移应力应变测试仪　电导率仪，CV
粒度分析仪
压汞法/吸液法

SEM/超景深显微镜/千分尺
GITT/EIS/CV

经验参数

根据模拟经验与文献进行取值

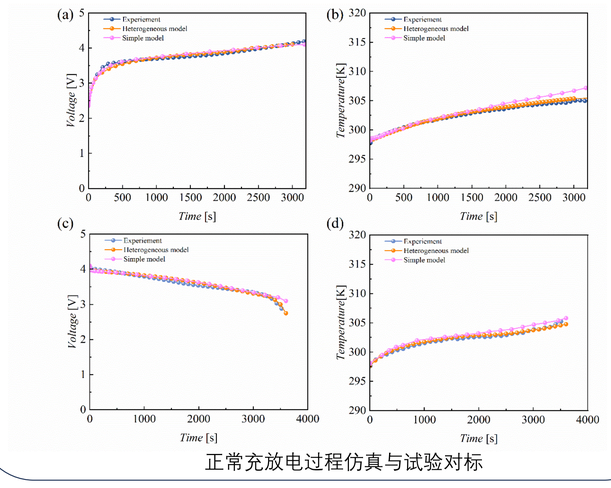
电化学模型

电芯设计需求
- 容量
- 电压
- 内阻
- 尺寸
- 平台
- 循环
- 成本

难点：
建立参数测量方法
经验参数选取
模型调试

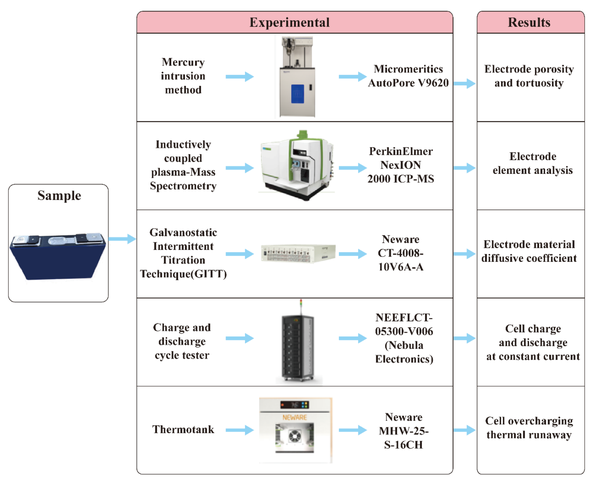
电芯设计有多方面的需求，需要综合考虑包括容量、电压、内阻、尺寸等众多因素采用**模拟**的方法只要获取材料特性参数，就可以准确地**预测电池的电化学性能**，有效地**缩短设计周期，节约实验成本。**

本公司具有长期的采用模拟结合实验的电芯开发经历，积累了**大量的电芯模拟开发经验和基础数据库**，依靠模拟技术的辅助可以在较短的时间内开发出符合客户要求的电池产品。



正常充放电过程仿真与试验对标

设计需求

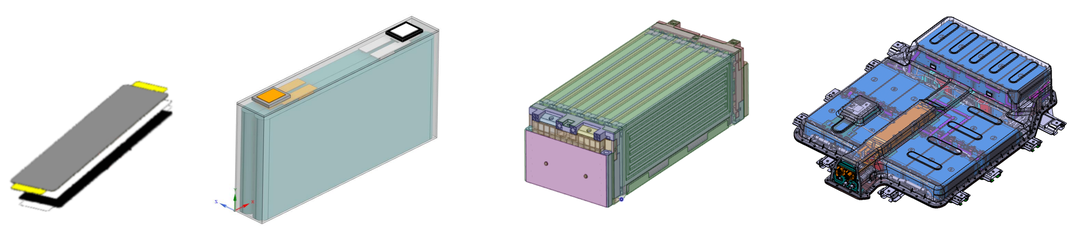


试验测量参数

设计参数
压实密度
极片面密度
NP比
...

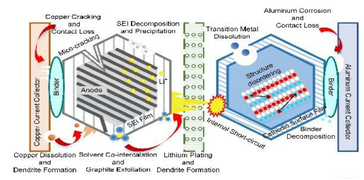
经验参数
电极反应活化能
电极反应速率
...

参数获取



电极、电芯、模组、系统等层级几何模型

寿命预测



温度　SEI膜　应力　活性物质损失　...　...

界面副反应

$$j_{SEI} = -aFk_{0,SEI}c_{EC}^{s}\exp\left(-\frac{\alpha_{c,SEI}F}{RT}\left(\phi_s-\phi_e-\frac{j_{tot}}{a}R_{film}-U_{SEI}\right)\right)$$

$$-D_{EC}\frac{c_{EC}^{s}-c_{EC}^{0}}{\delta_{film}} = -\frac{j_{SEI}}{aF} \qquad \frac{d\varepsilon}{dt} = -a\frac{d\delta_{film}}{dt}$$

$$\frac{\partial c_{SEI}}{\partial t} = -\frac{j_{SEI}}{2F} \qquad R_{film} = \omega_{SEI}\frac{\delta_{film}}{\kappa_{SEI}}$$

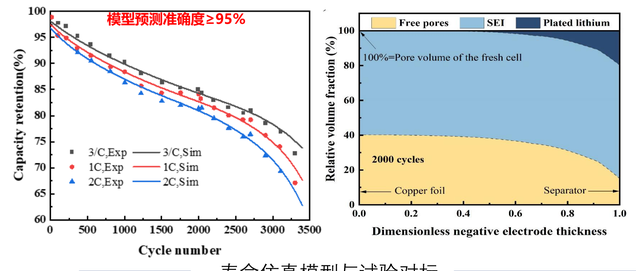
应力造成活性损失

$$\sigma_r = \frac{2\Omega E}{3(1-\nu)}\left(\frac{1}{R^3}\int_0^R c_s r^2 dr - \frac{1}{r^3}\int_0^r c_s \xi^2 d\xi\right)$$

$$\sigma_\theta = \frac{\Omega E}{3(1-\nu)}\left(\frac{2}{R^3}\int_0^R c_s r^2 dr + \frac{1}{r^3}\int_0^r c_s \xi^2 d\xi - c_s\right)$$

$$\sigma_h = \frac{\sigma_r + 2\sigma_\theta}{3}$$

寿命仿真模型解析



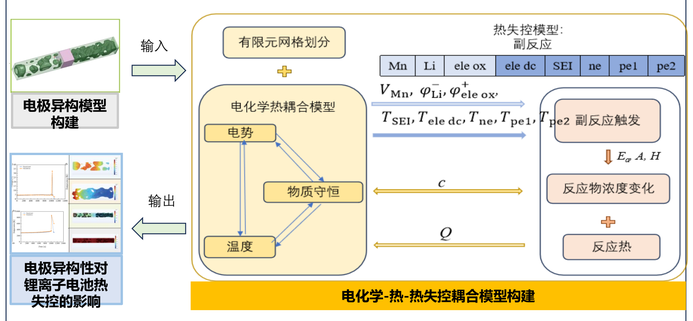
寿命仿真模型与试验对标

系统最高温和最低温　容量一致性　单体电池寿命预测　系统最优寿命预测　系统最劣寿命预测

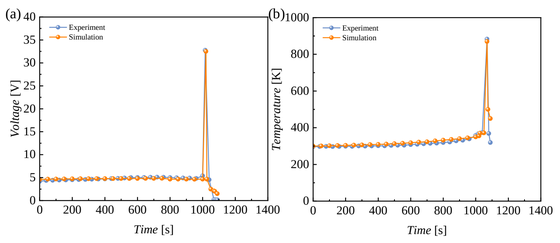
模组、系统寿命仿真拓展

安全边界

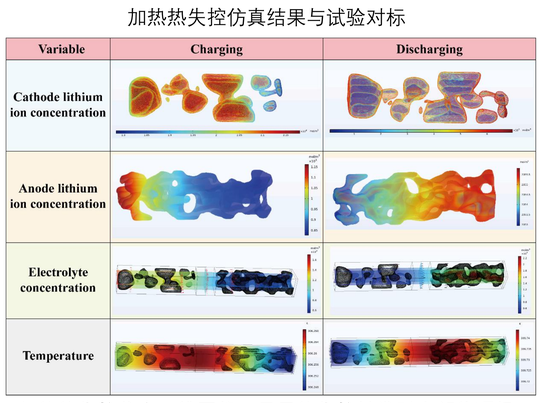
电池过充引起的热失控危险性大，试验成本高。为了探究电池过充失控过程的关键控制因素，对过充失控进行建模研究，探究电池材料性能对失控触发时间的影响，为安全电池设计提供理论指导。



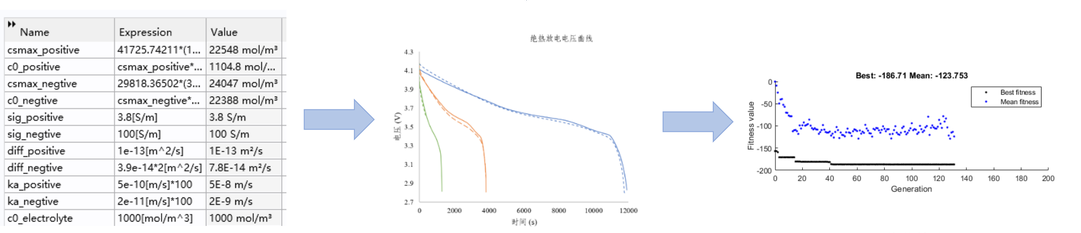
异构模型仿真热失控流程图



加热热失控仿真结果与试验对标



加热热失控仿真三维图像，显示热失控触发时内部物理场



电化学、热、结构、老化等物理场

Name	Expression	Value
csmax_positive	41725.74211*(1...	22548 mol/m³
c0_positive	csmax_positive*...	1104.8 mol/...
csmax_negtive	29818.36502*(3...	24047 mol/m³
c0_negtive	csmax_negtive*...	22388 mol/m³
sig_positive	3.8[S/m]	3.8 S/m
sig_negtive	100[S/m]	100 S/m
diff_positive	1e-13[m^2/s]	1E-13 m²/s
diff_negtive	3.9e-14*2[m^2/s]	7.8E-14 m²/s
ka_positive	5e-10[m/s]*100	5E-8 m/s
ka_negtive	2e-11[m/s]*100	2E-9 m/s
c0_electrolyte	1000[mol/m^3]	1000 mol/m³

分组参数初始样本

模型结果及误差计算　优化算法

优化及验证

热管理优化

$$q = -IV - \sum_l I_l T^2 \frac{d\frac{U_{l,avg}}{T}}{dT} + \sum_j \frac{d}{dt}[\int_{\upsilon_j}\sum_i c_{i,j}RT^2\frac{\partial}{\partial T}\ln(\cdot$$

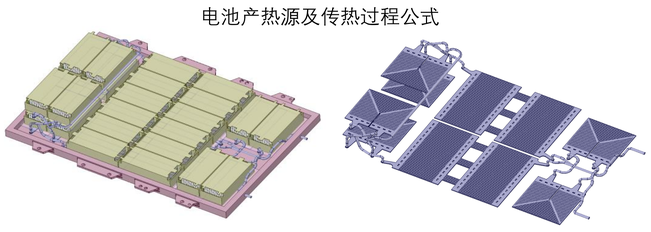
$$+\sum_{j,j\neq m}\sum_i[(\Delta H_{i,j\to m}^{0} - RT^2\frac{d}{dT}\ln\frac{\gamma_{i,j}}{\gamma_{i,j}^{avg}})\frac{dn_{i,j}}{dt}]$$

$$\Phi = -\lambda A\frac{dT}{\cdot\cdot}$$

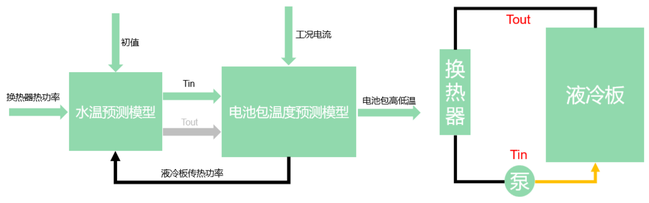
$$\Phi = hA(T_s - T_\infty)$$

$$\Phi = \sigma AT^4$$

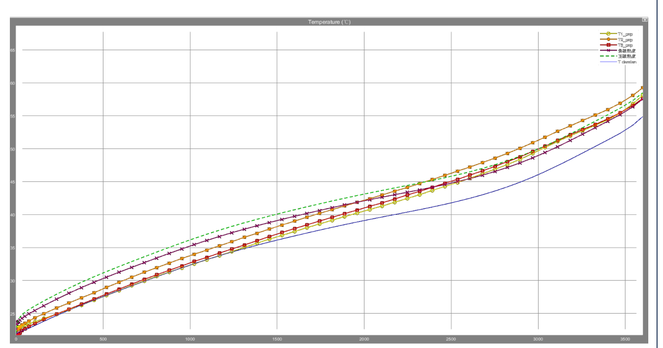
电池产热源及传热过程公式



电池系统及液冷系统几何模型



电池系统温度控制系统建模



实车工况验证分析，最大误差2℃

结论与展望：

- 仿真驱动锂离子电池设计优化应用场合广泛，适用于多层级、多物理场问题
- 设计流程与模型架构可复用，可定制，使用灵活
- 支持多目标优化，贴合工程要求实际
- 基于物理仿真的虚拟设计可与数据驱动结合，加速寻优
- 虚拟设计与实验流程匹配，形成自动化闭环
- 积累参数及数据形成数据库，支持全新设计探索