中国科学院
CHINESE ACADEMY OF SCIENCES

电池多尺度模拟仿真和数据获取

谢鸿盛，宋峻杰，马瑞霖，王雪龙，禹习谦，李泓
中国科学院物理研究所

2026. 10. 23

深圳 • 2026 COMSOL 用户年会

电池中的跨尺度数据连接

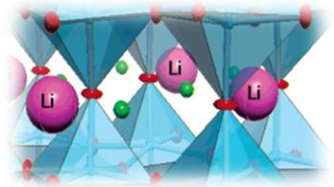
时间 s

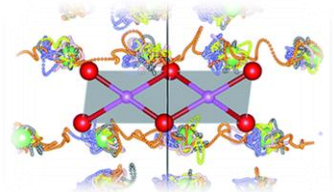
ps

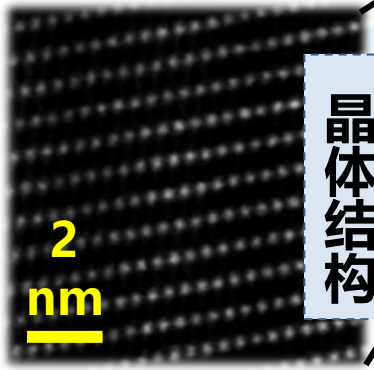
nm

mm 空间

晶格常数、基本物性
迁移势垒
电子能级位置
化学势、本征电位
……



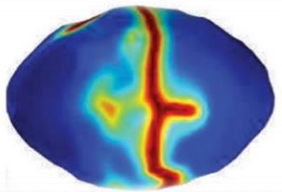


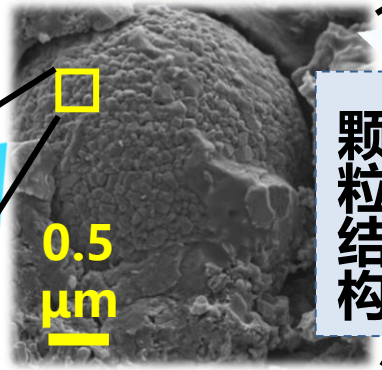


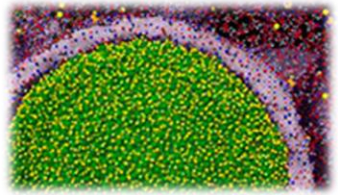
晶体结构

数据

收缩膨胀、开裂
扩散系数、浓差极化
界面交换电流
晶界扩散、晶界电阻
应力应变
……



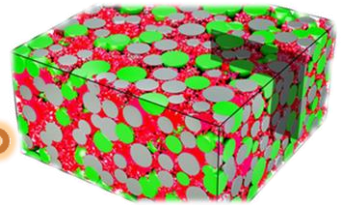


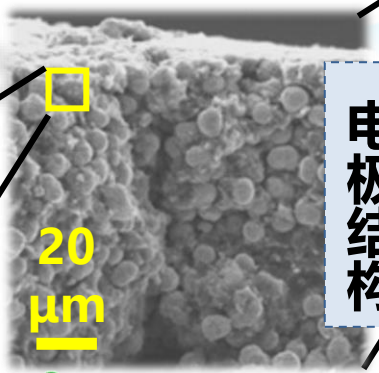


颗粒结构

数据

AI



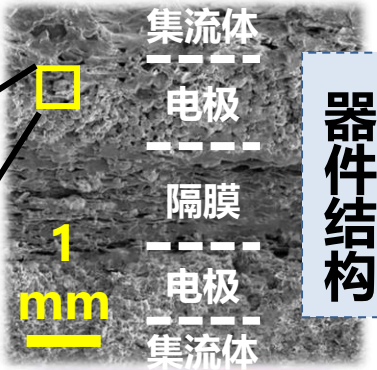


电极结构

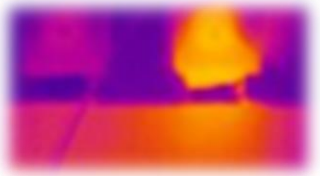
数据



孔隙率、迁曲率
表观扩散、欧姆极化
粗糙度、褶皱
产热率、热导率
……



器件结构





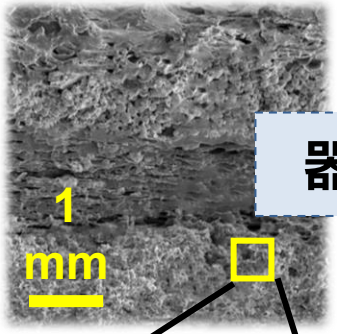
膨胀、鼓包、产气
温度分布
电压、电流、阻抗
库伦效率、容量衰减
……

电池中跨尺度的结构组织

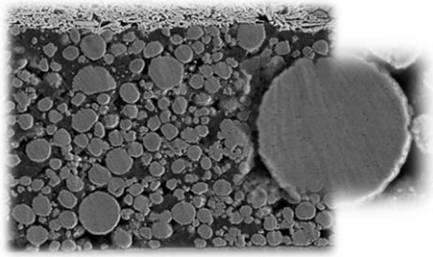
中国科学院 CHINESE ACADEMY OF SCIENCES

空间尺度的扩大带来新的复杂度

电池材料是基础



器件

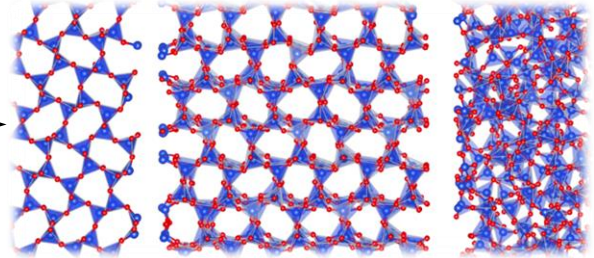


相似性

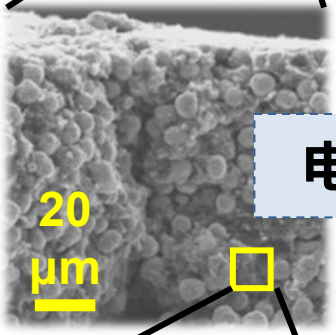
大量单元集合，存在内部复杂结构

颗粒集合无序，颗粒间的空隙和填充物依然有功能 (**是否存在类似能量的描述符?**)

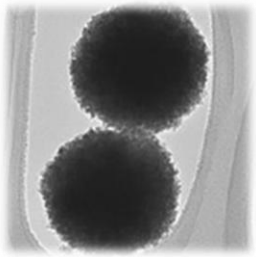
差异性



材料



电极

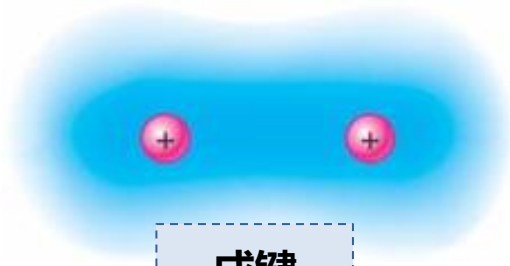


相似性

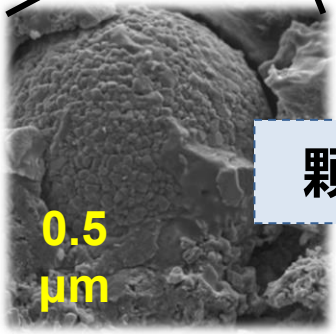
相邻单元之间存在相互作用

类似硬球的相互作用，无重叠，清晰边界

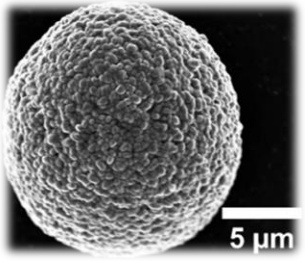
差异性



成键



颗粒

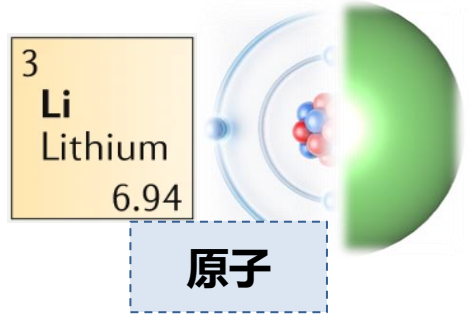


相似性

最小独立单元，有限作用域

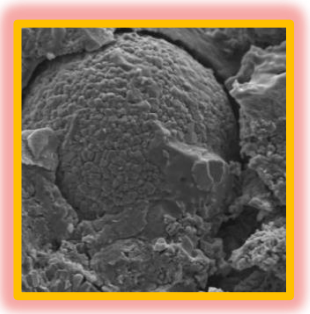
颗粒性质没有周期性，没有全同的颗粒
(**是否存在完备描述符集合?**)

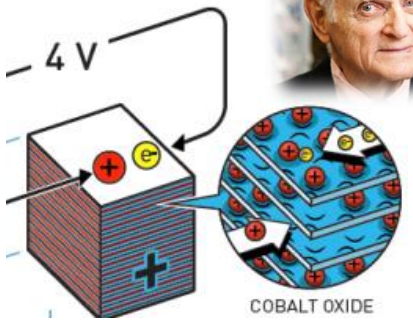
差异性



原子

颗粒层次材料的性质差异



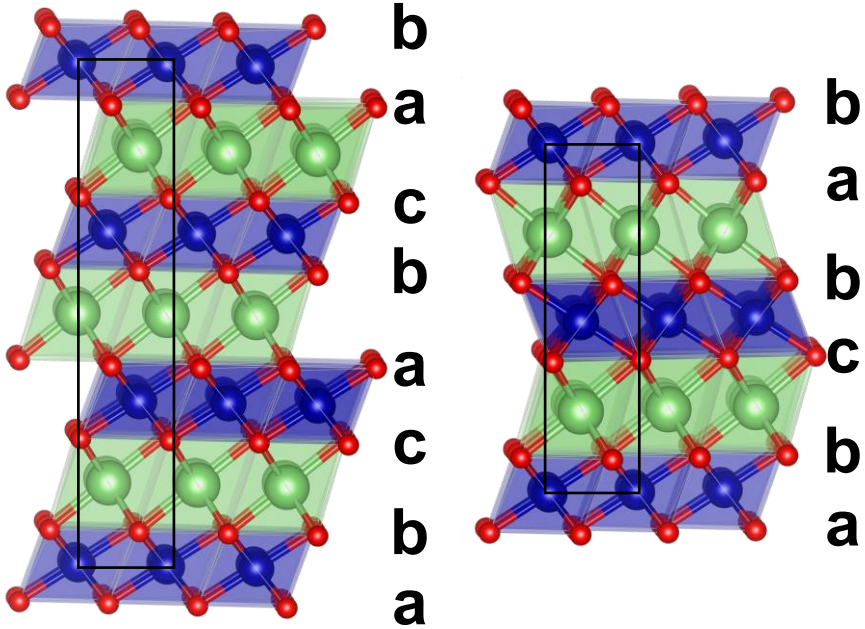


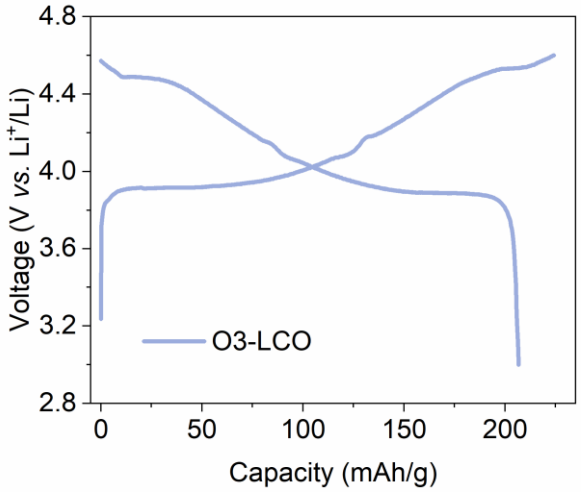


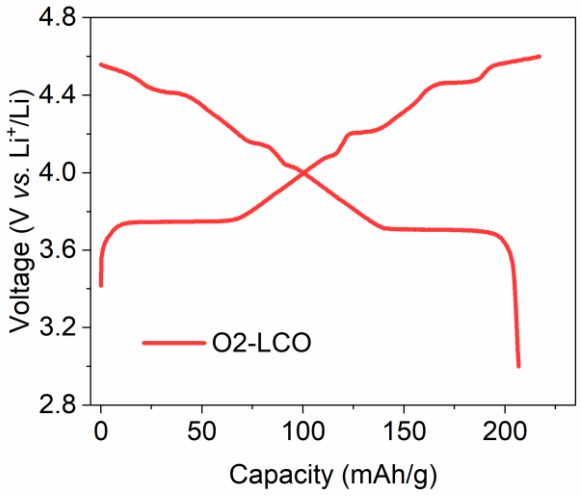
钴酸锂
正极材料

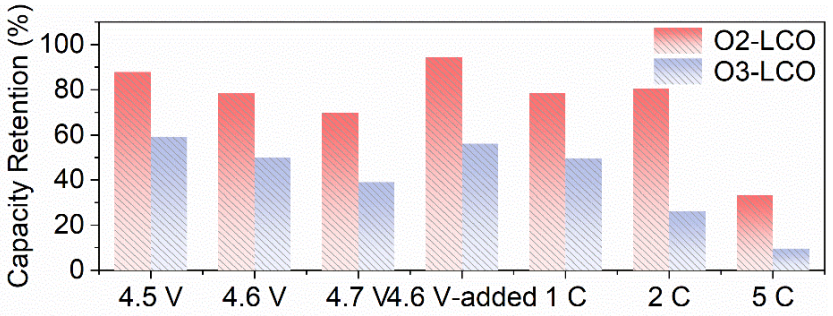
O3

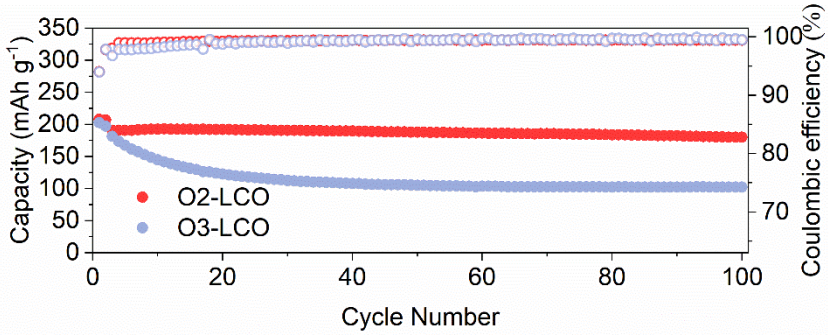
O2







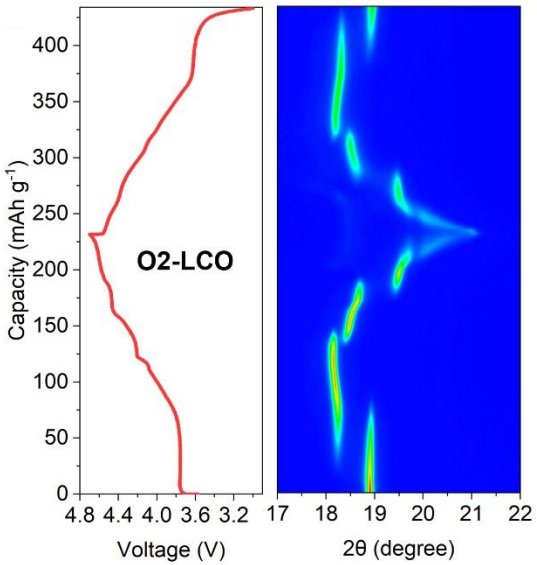


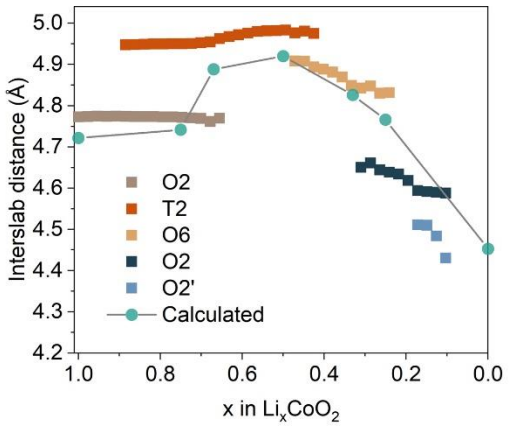


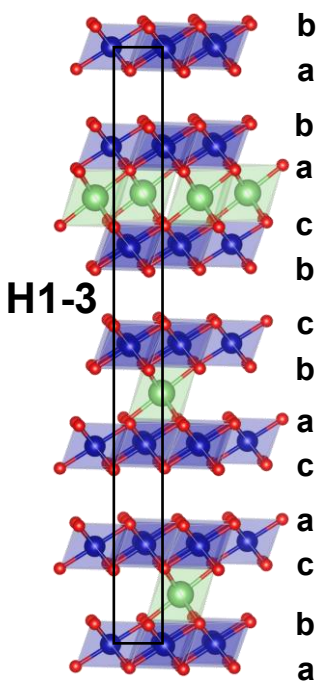
- 原子结构相似、化学性质近似的同种组分材料，电化学性质差异突出。

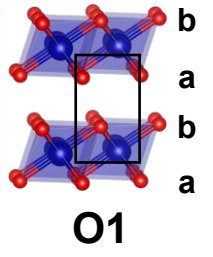
Small Sci. 2024, 4, 2400162

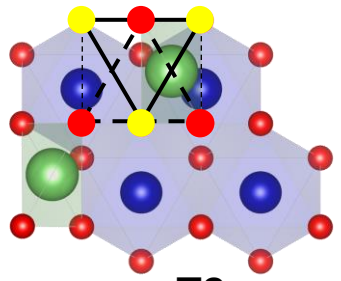
原子尺度 → 颗粒层次模拟的参数传递

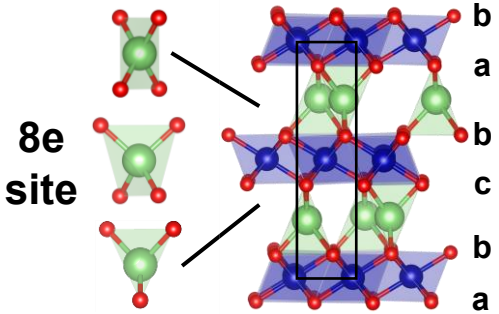


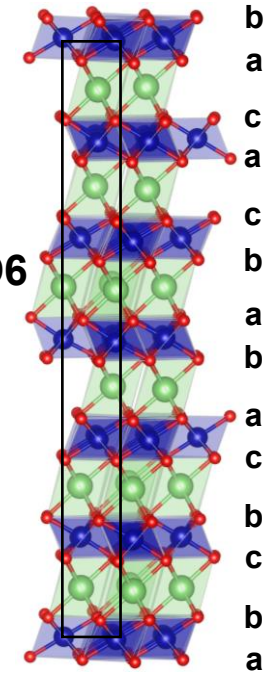


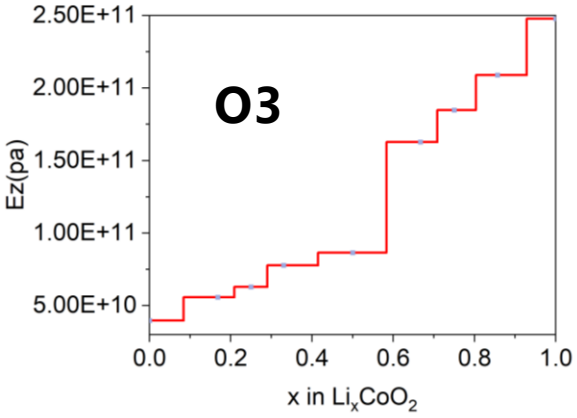


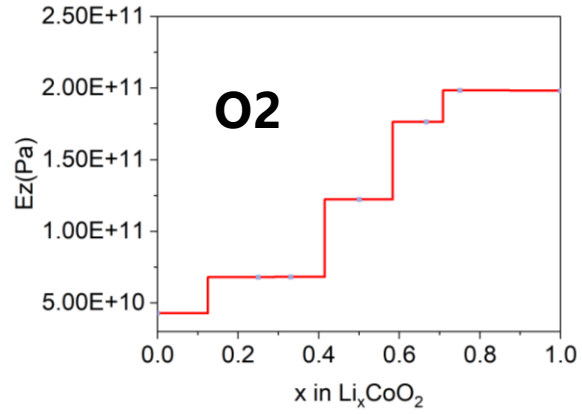








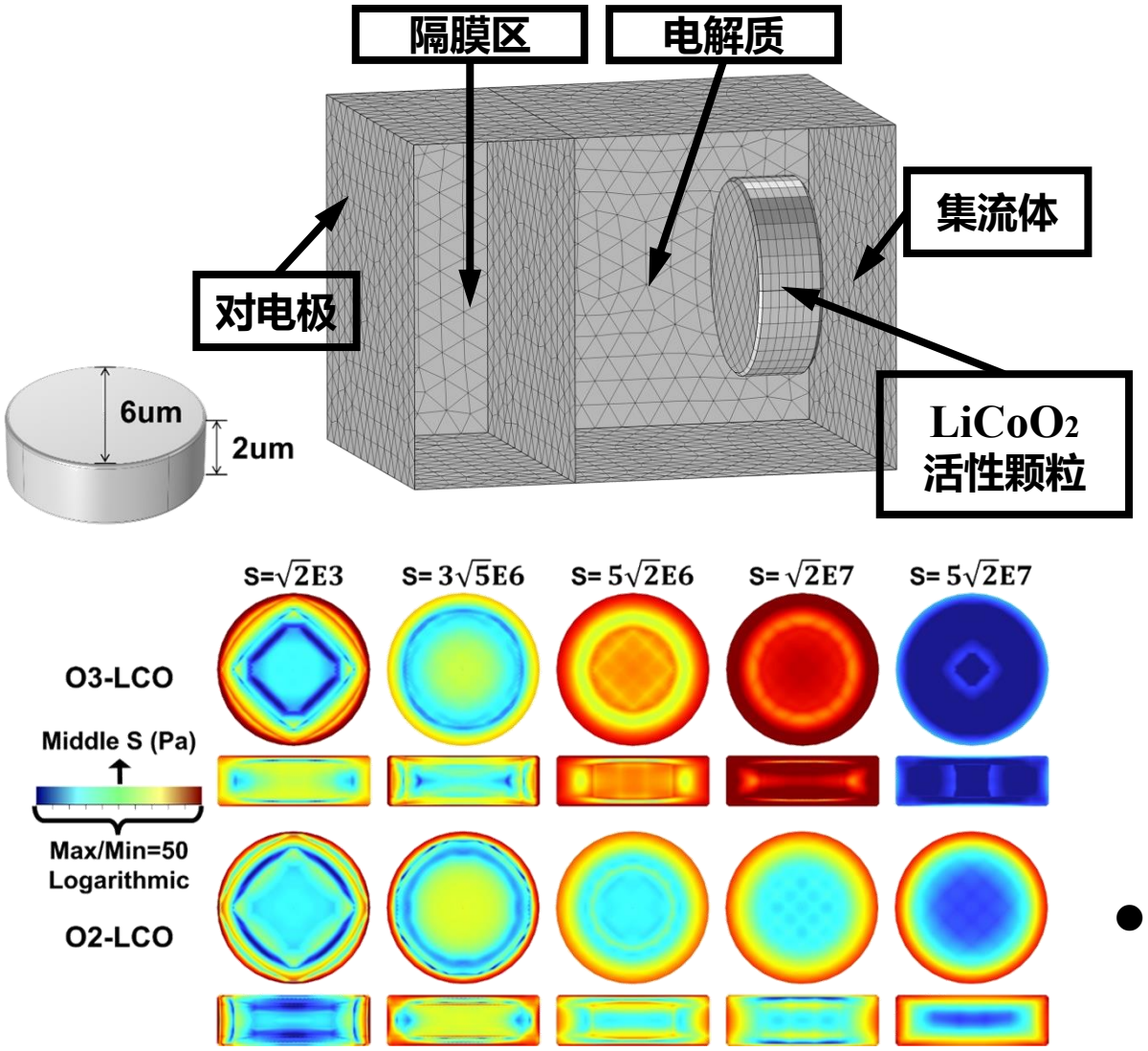


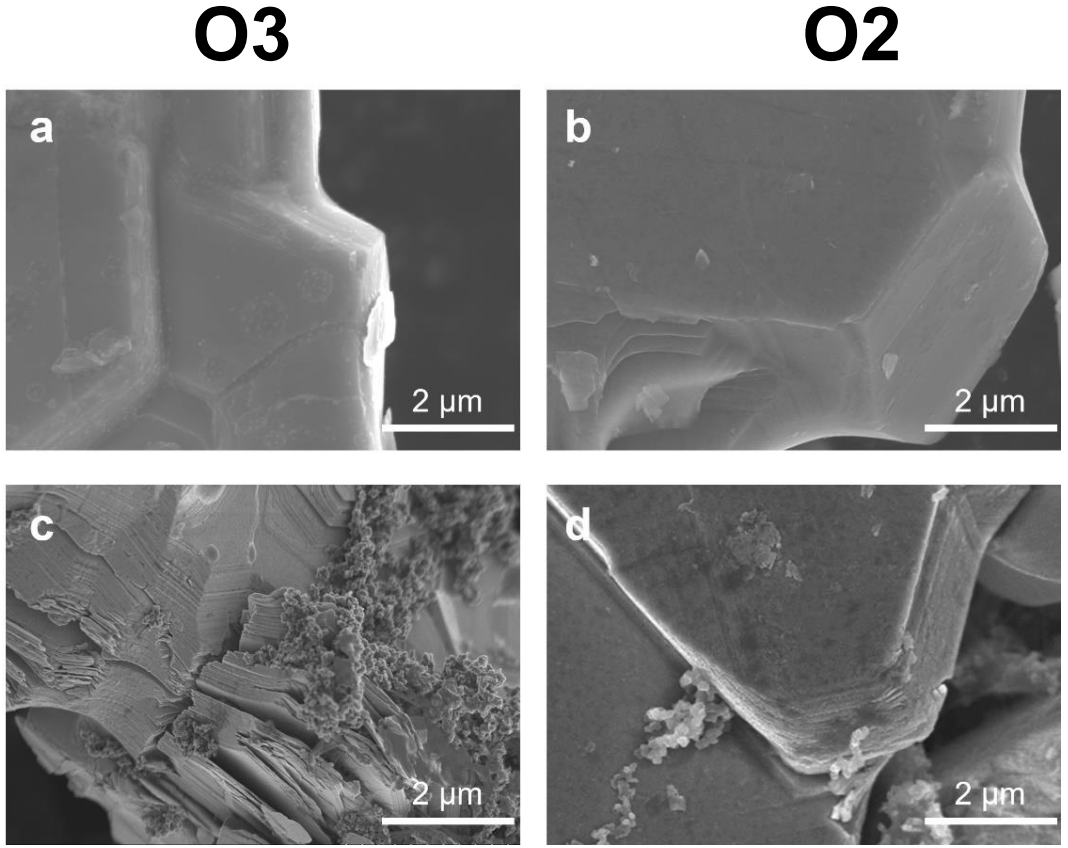


- **材料的性质在充放电过程中并非一成不变，性质变化与电化学行为的耦合关系需要体现**

Small Sci. 2024, 4, 2400162

颗粒水平的物化现象和电化学行为



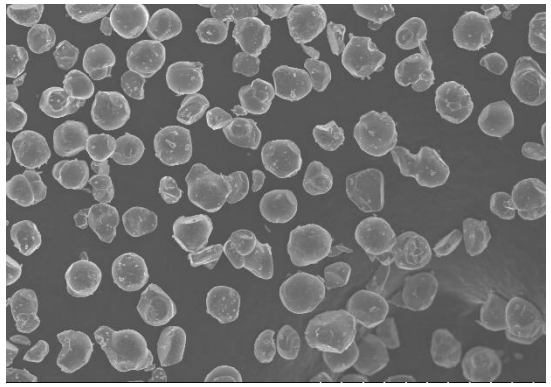


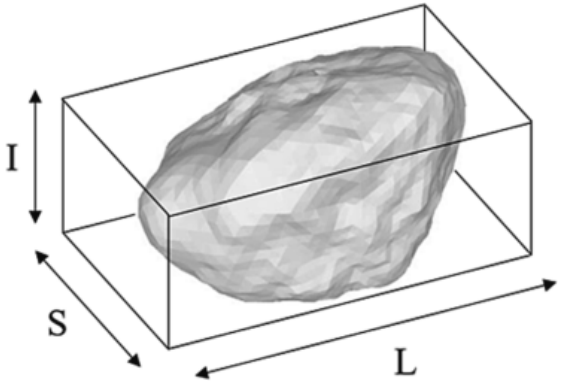
- 通过数据传递，有效利用理论计算数据，把原子尺度的材料性质变化和颗粒行为关联起来

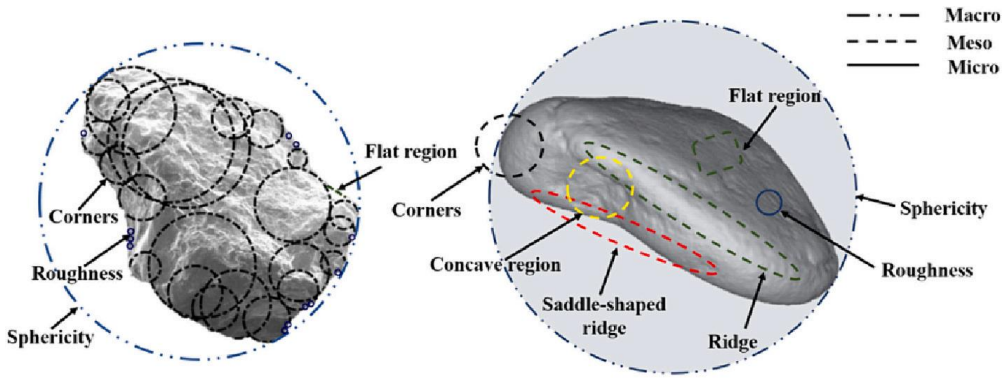
Small Sci. 2024, 4, 2400162

颗粒形态特征的量化描述

如何完备的描摹颗粒的形态特征?







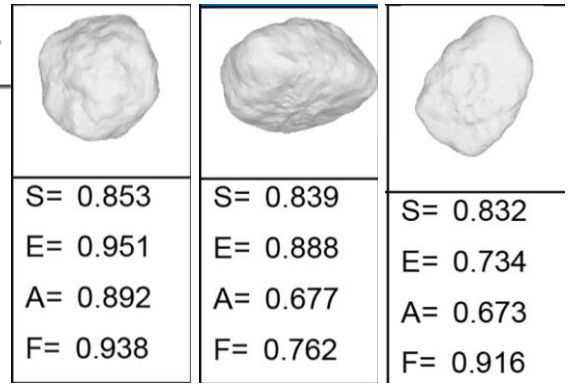
球形度: $Sphericity = \frac{\pi^{\frac{1}{3}}(6V_p)^{\frac{2}{3}}}{A_p}$

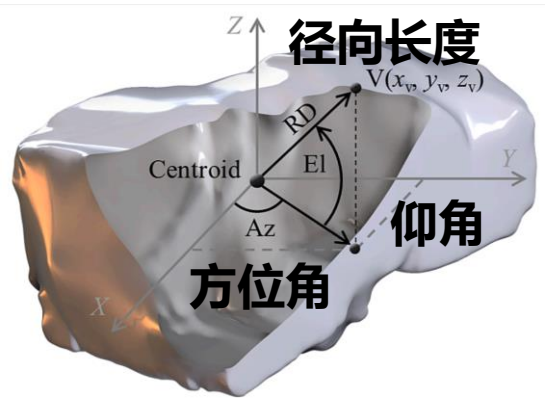
纵横比: $Aspect\ ratio = \frac{S}{L}$

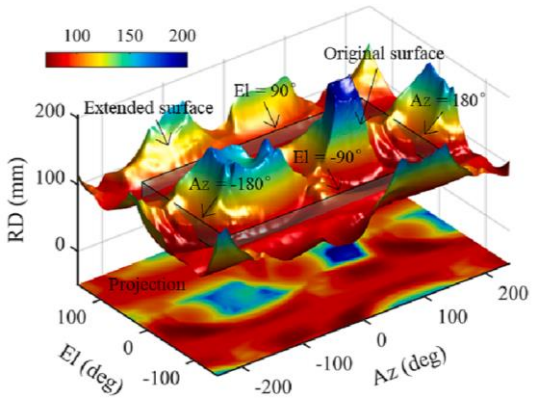
伸长率: $elongation = \frac{I}{L}$

平坦度: $flatness = \frac{S}{I}$

……



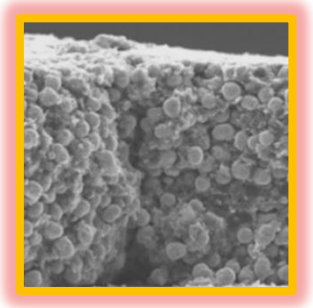


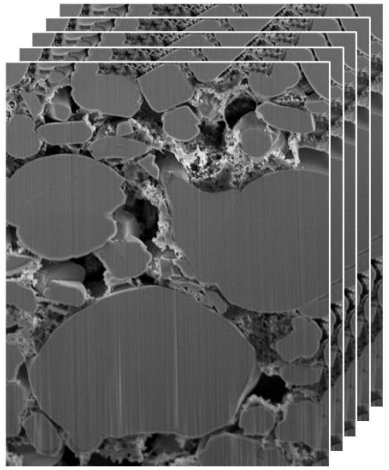


Powder Technology 441 (**2024**) 119761

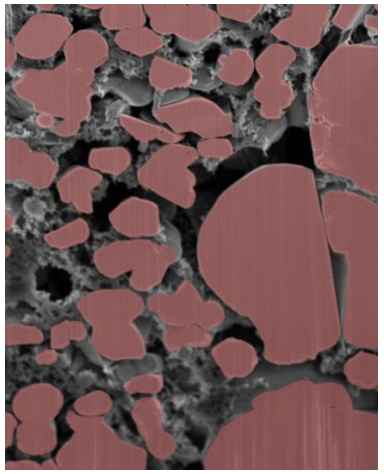
Construction and Building Materials 396 (**2023**) 132273

颗粒堆积体的复杂几何

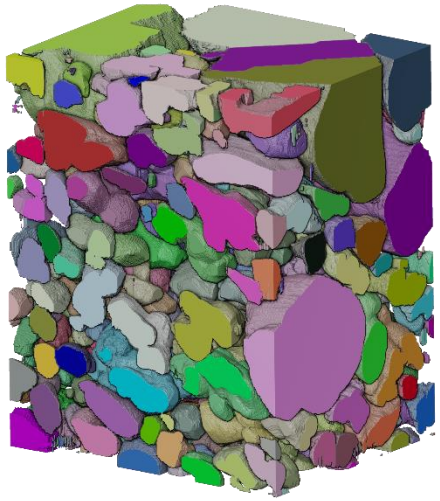




正极材料FIB图像数据

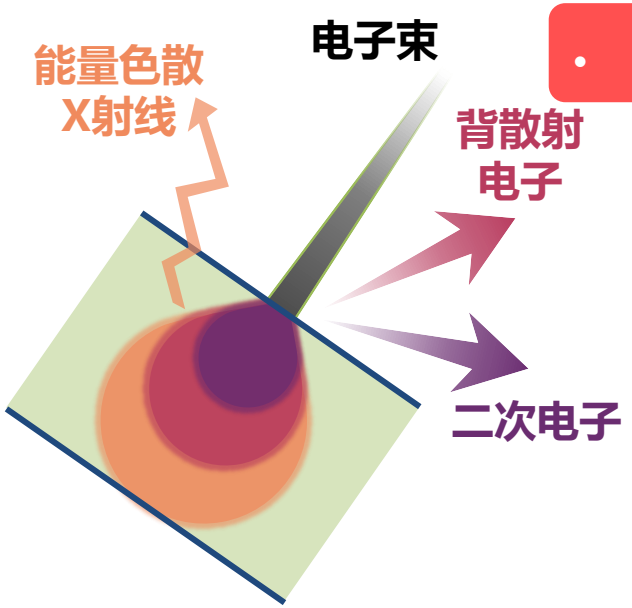


颗粒相分割

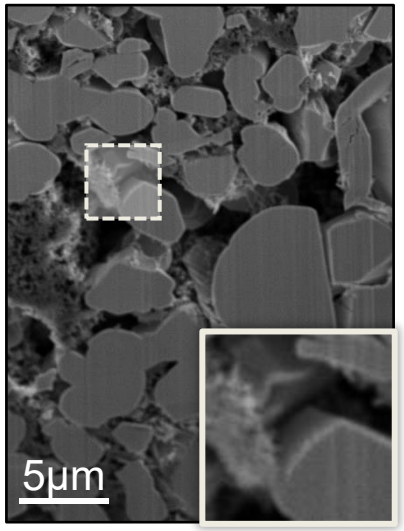


三维正极颗粒模型

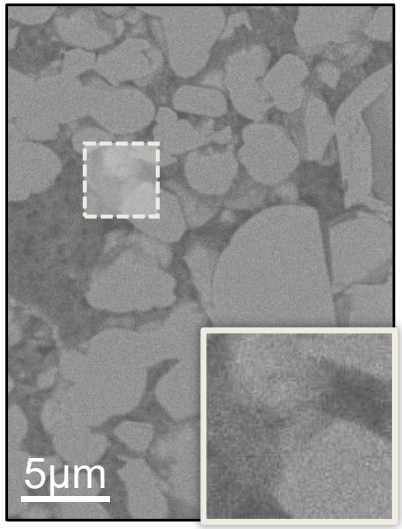
颗粒信息统计
孔隙网络模拟
电化学模拟
……



- 选用合适的分割模型



- 将二维分割结果堆叠为三维

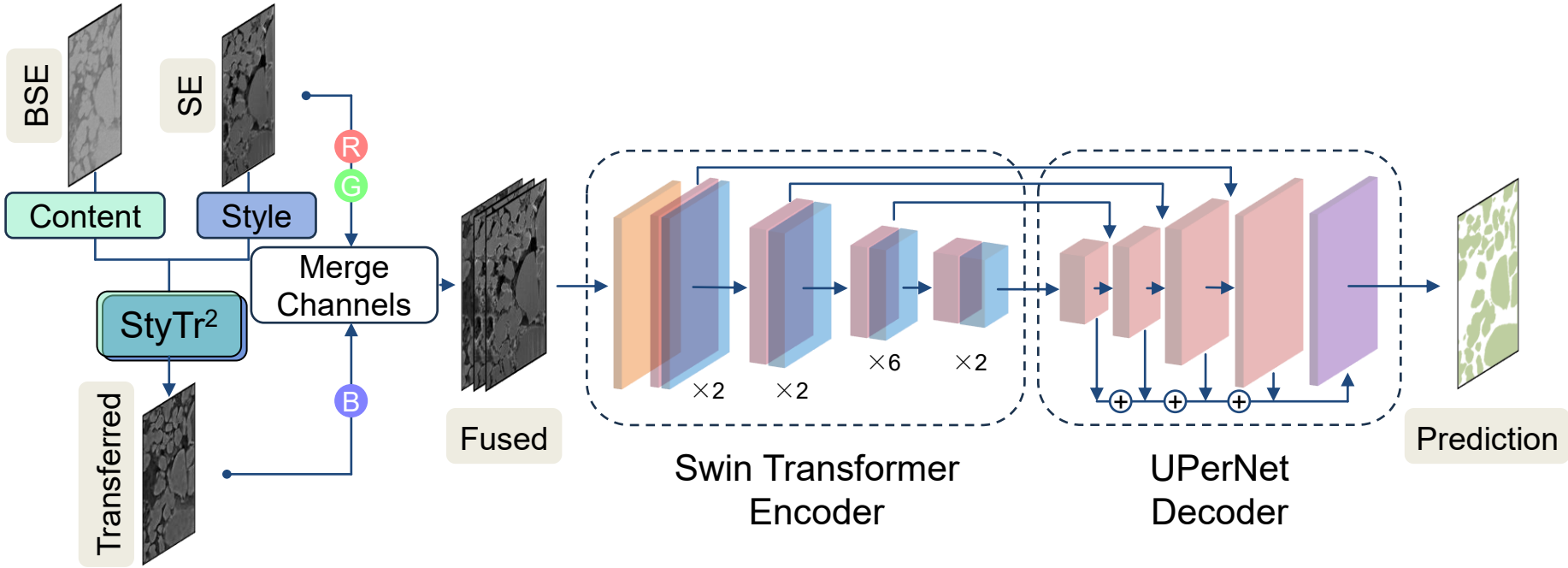


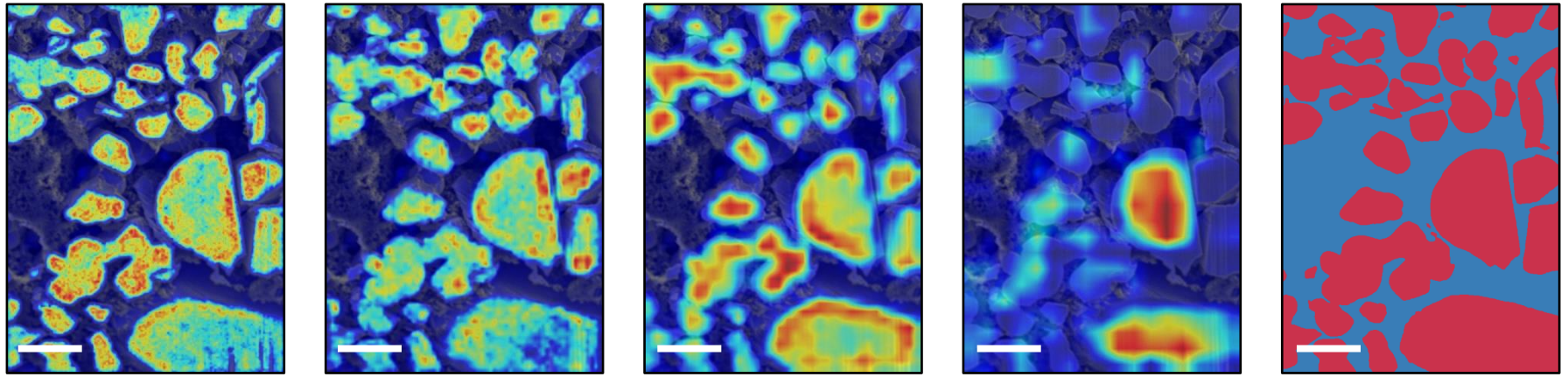
- 基于电子显微、断层扫描等形貌表征，抽取极片层次的结构特征

Appl. Phys. Lett. 2024, 125, 173902

计算机视觉算法赋能空间几何准确识别

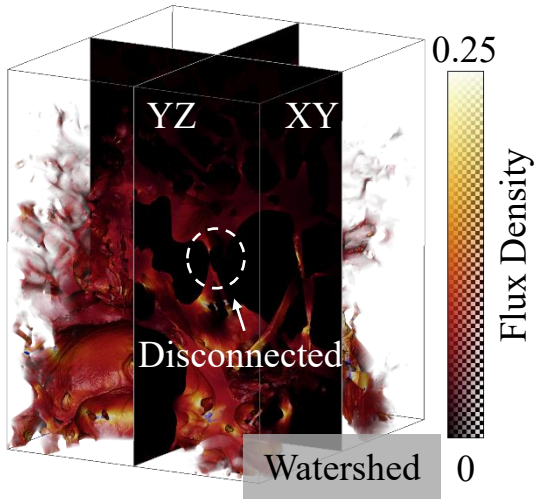
- **通过style transfer方式引入背散射电子显微像，开发可进行颗粒识别的深度神经网络**

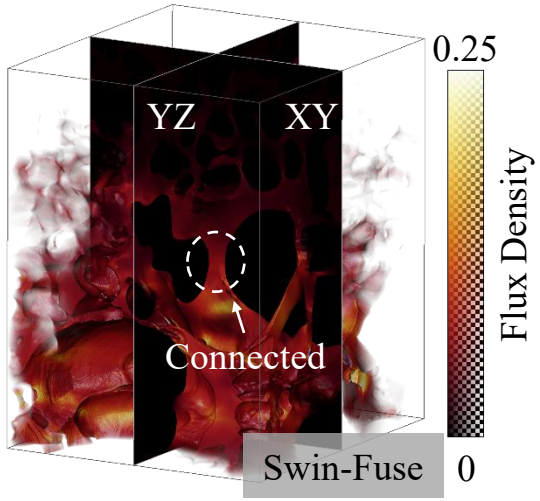


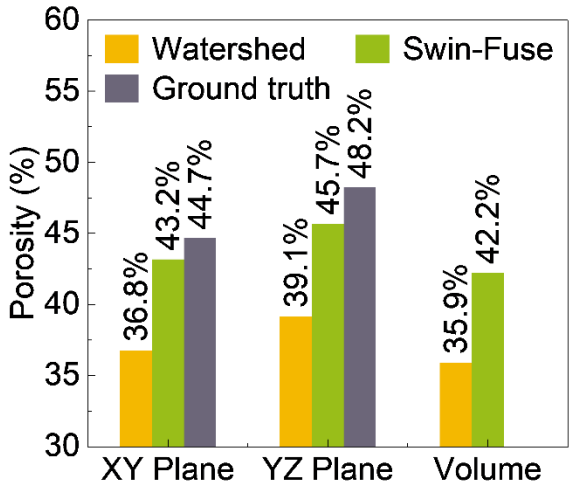


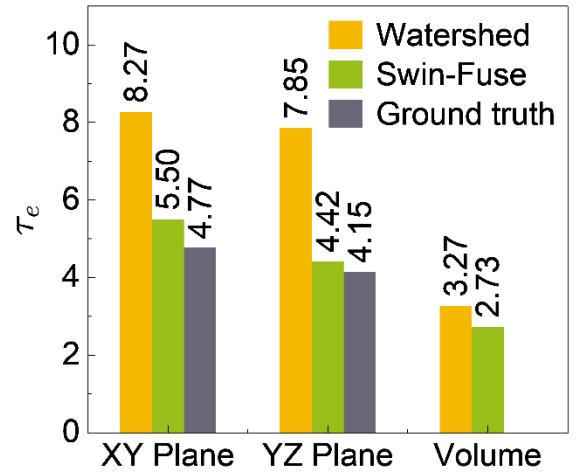
Appl. Phys. Lett. 2024, 125, 173902

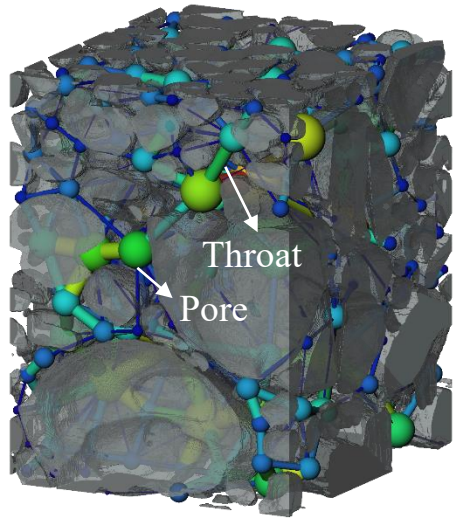
计算机视觉算法赋能空间几何准确识别

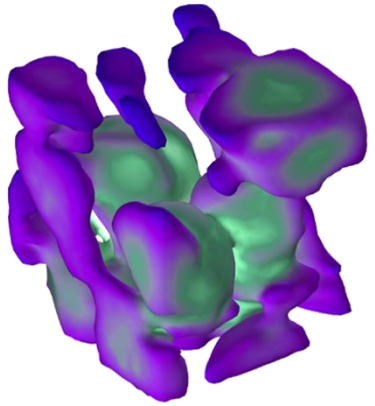










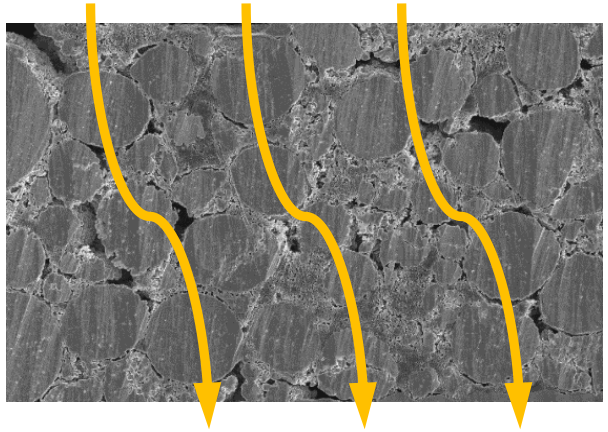


- **相比普遍使用的图像分割方法，神经网络模型给出的空间几何达到真实值水平，对迂曲度、空隙结构描述非常准确。**

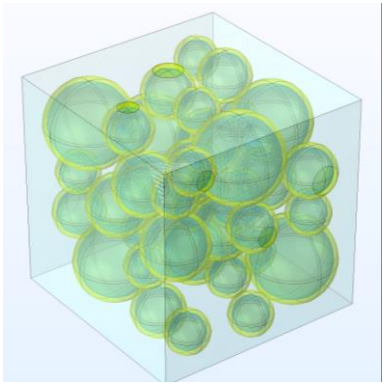
Appl. Phys. Lett. 2024, 125, 173902

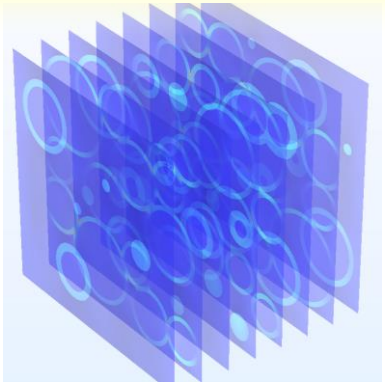
高密颗粒堆积的离子输运问题

- 高载量的电极片
- 紧密压实的固体电解质
- 高填充的原位固化复合膜



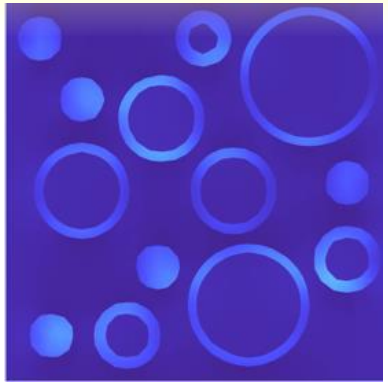
离子流贯穿的复合固相





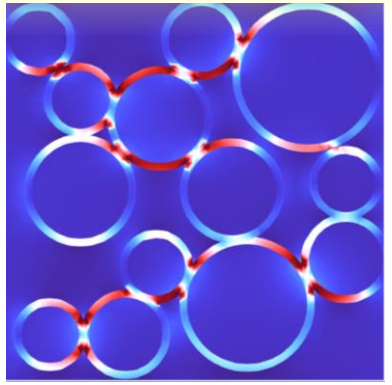
颗粒3D堆积结构

- 颗粒相对位置
- 孔隙关联关系
- 堆积密度优化
- ……



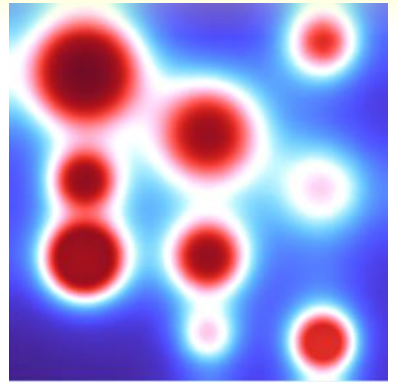
颗粒性质3D分布

- 粒径大小不一
- 形状存在起伏
- 界面层有分布
- ……



离子流场3D连通

- 离子流场分布
- 流线迂曲连通
- 覆盖颗粒不匀
- ……



化学3D非均匀性

- 颗粒间不均匀
- 颗粒内不均匀
- 反应相互关联
- ……

颗粒复合相表观总离子电导的规律探索

颗粒体积分数、空间分布如何定量影响总离子电导

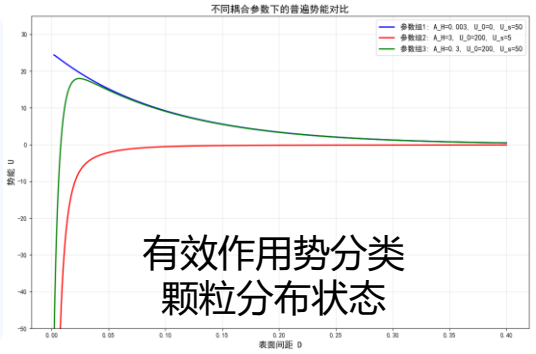
颗粒空间分布建模

有效相互作用势（建模核心）

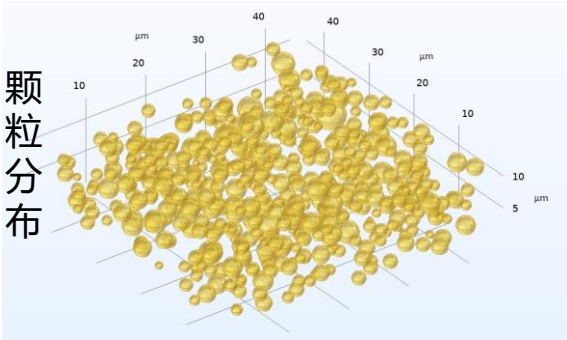
积分消去溶剂自由度，仅建模颗粒系统：

$$Z \propto \int dR^N \exp(-\beta U_{eff})$$

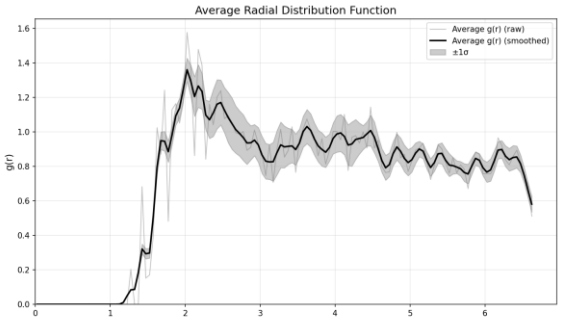
$$U_{eff} = U_{vdW} + U_{rps} + U_{att}$$



有效作用势分类
颗粒分布状态



颗粒分布

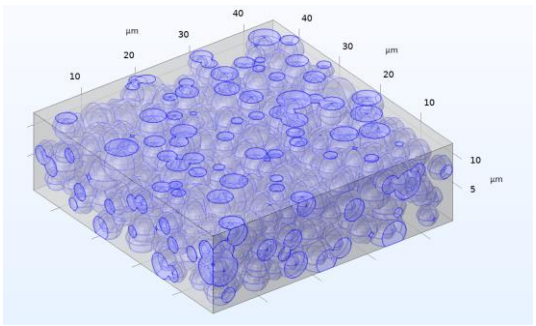


径向分布函数

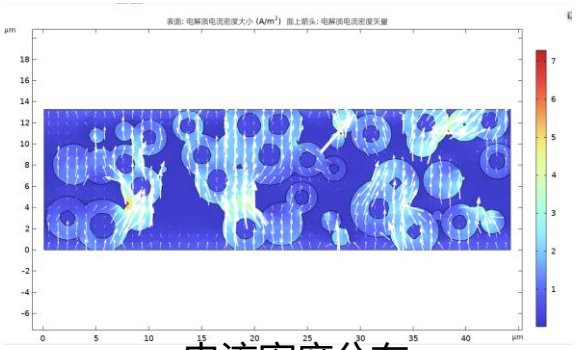
离子流场模拟

三相电导率(S/m)：连续相 0.01、颗粒相 0.1、界面 0.5

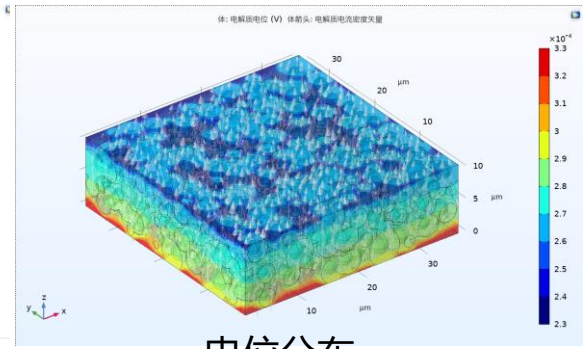
- 界面层厚度正比于颗粒半径
- 相同粒径分布、同等数量球体、相同体积分数
- 有限元稳态求解，提取表观电导率



界面层分布



电流密度分布



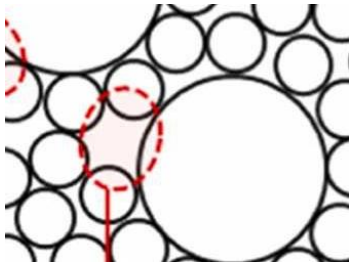
电位分布

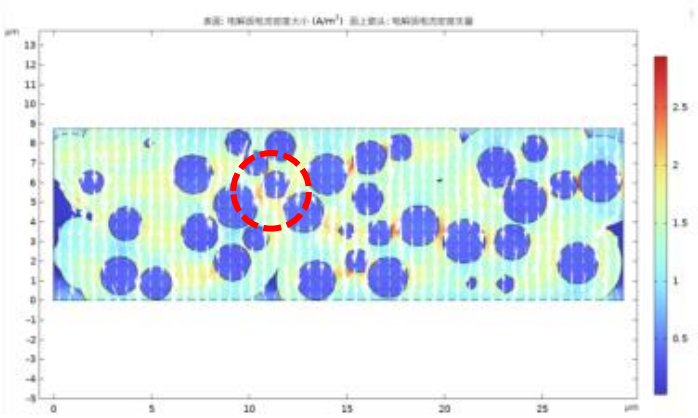
改变作用势 → 改变空间分布 → 改变表观离子电导

未发表

电导率随颗粒体积分数变化的结构基础

- **悬挂/死端**（dangling / dead end）：虽可导电但无净电流，对整体电导率贡献极低
- **主干道**（backbone）：有净电流通过的骨干网络
- 关键结论：平均电导率主要取决于主干道的占比

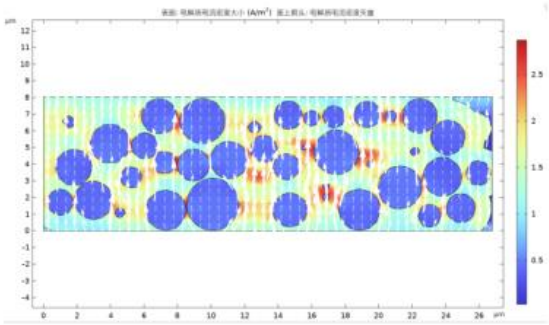


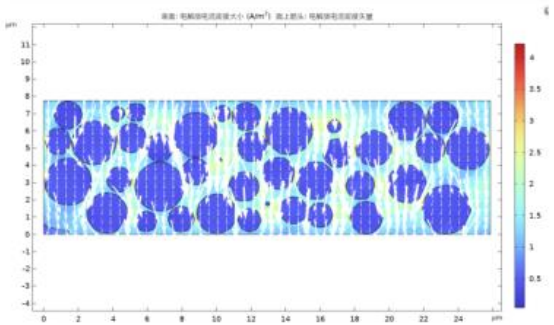


Stauffer D, Aharony A. Introduction to percolation theory [M]. 2nd ed. Taylor & Francis, 1992.

高 ϕ 段（$\phi \gtrsim 0.35$）推测

- 新增无机颗粒优先填充界面相" 死端" 区域，主干道占比增加或结构反而优化
- 颗粒堆积结构微变，无机相渗流网络更发达
- 整体效果：主干道优化及无机相渗流影响大于界面相减少影响 $\Rightarrow$ 电导率二次上升

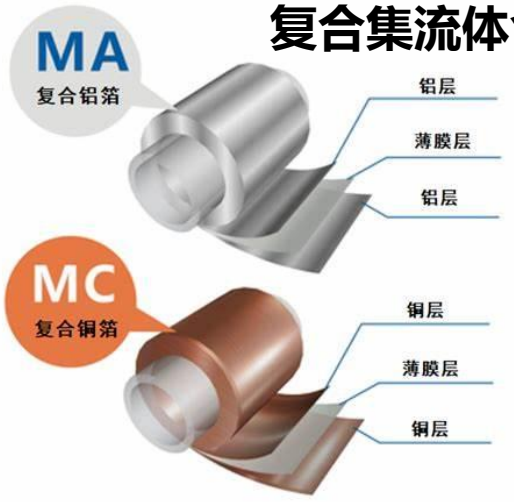


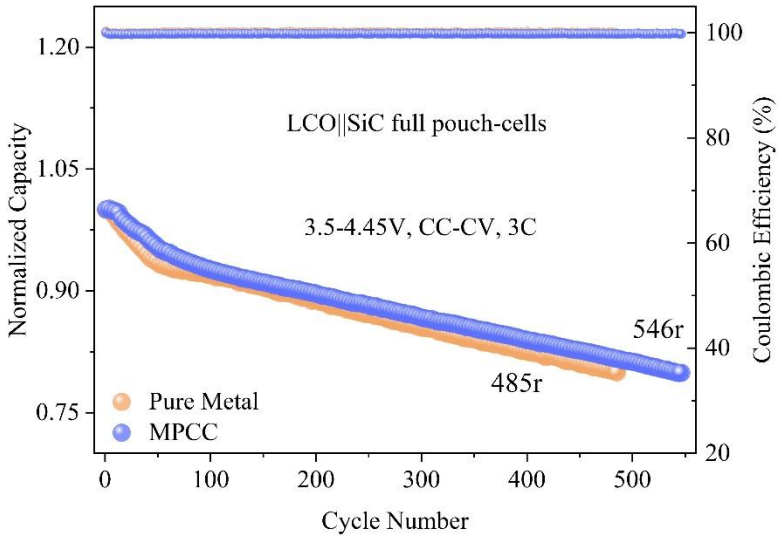


未发表

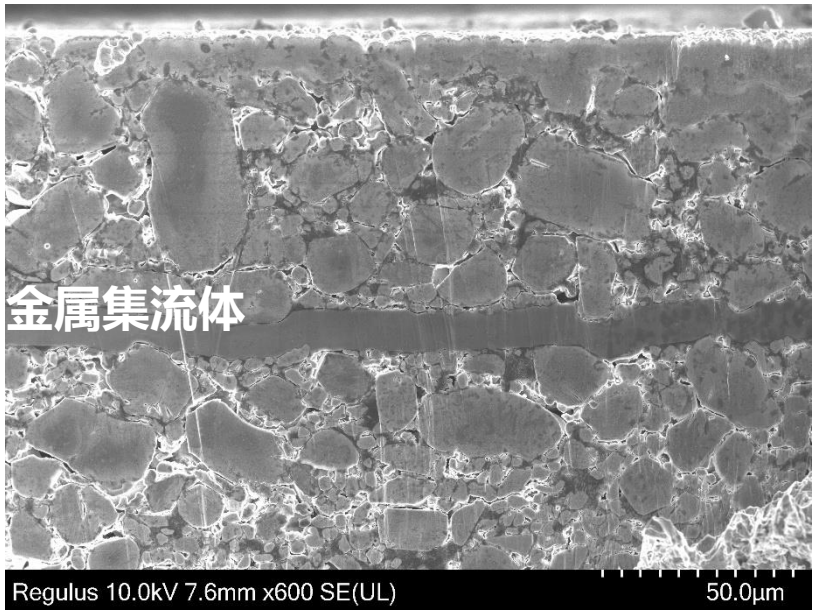
电芯层次的物化现象

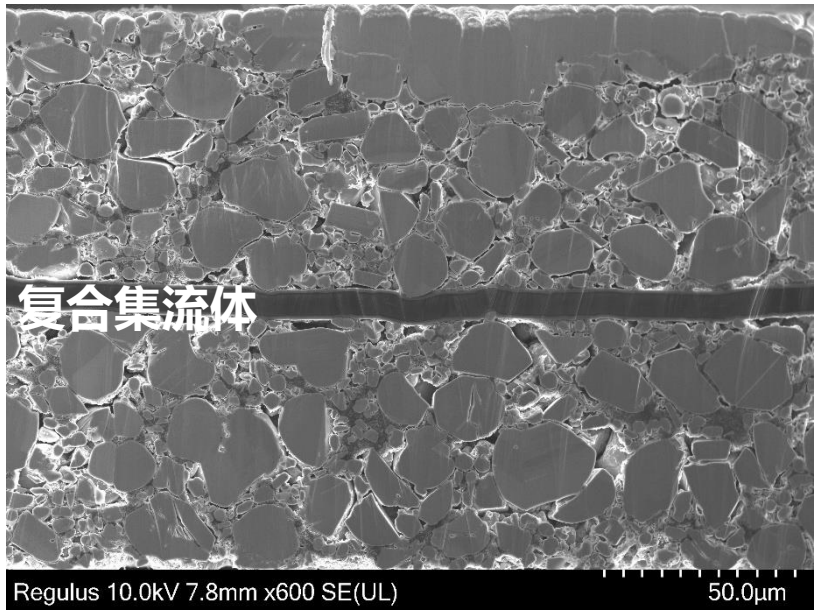






- 为了减轻电芯重量、提高安全性引入的复合集流体，还会影响电化学表现

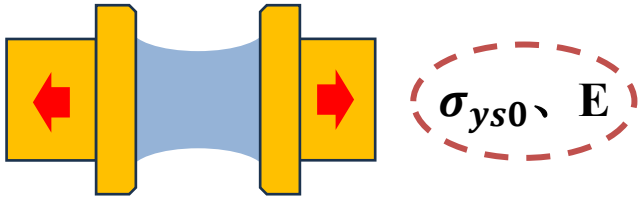


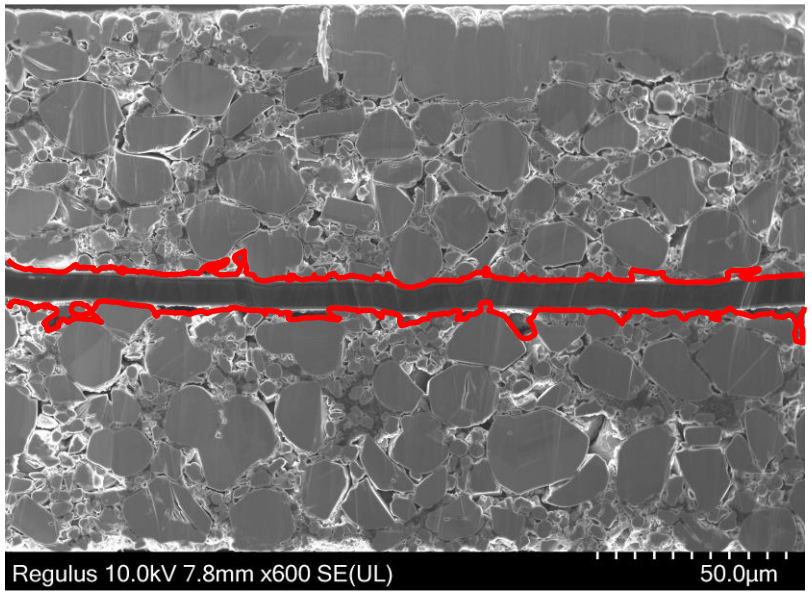


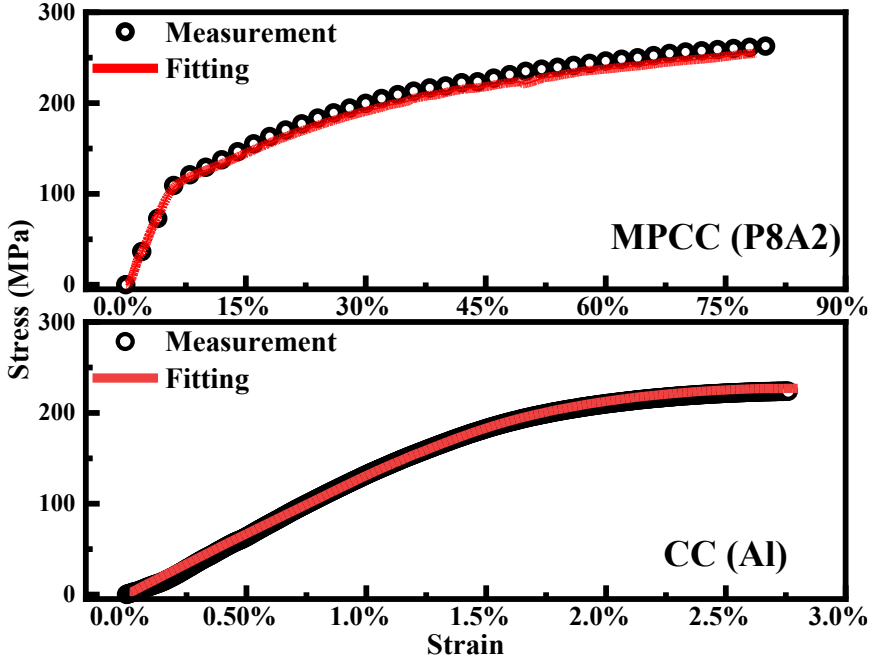
AFM (2026): e77067

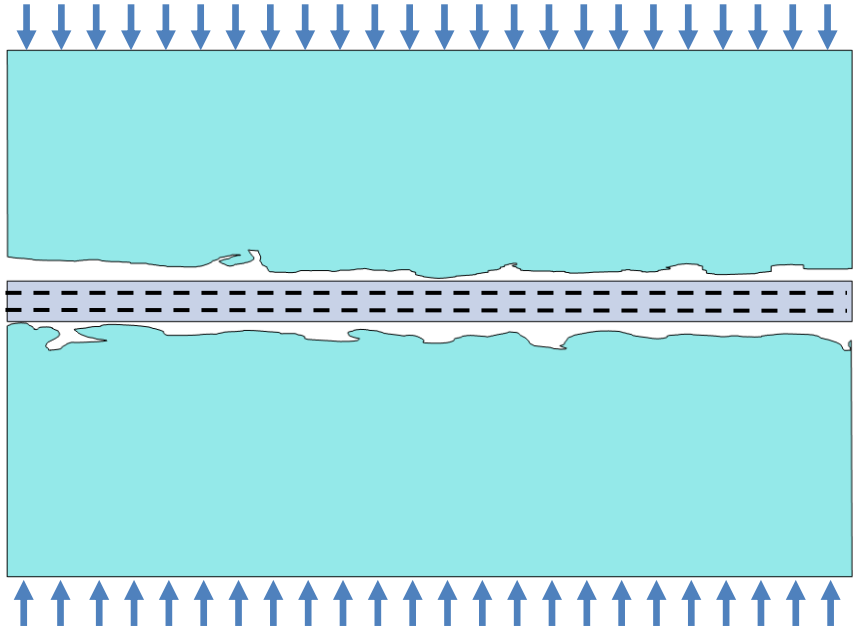
形貌数据与力学参数获取

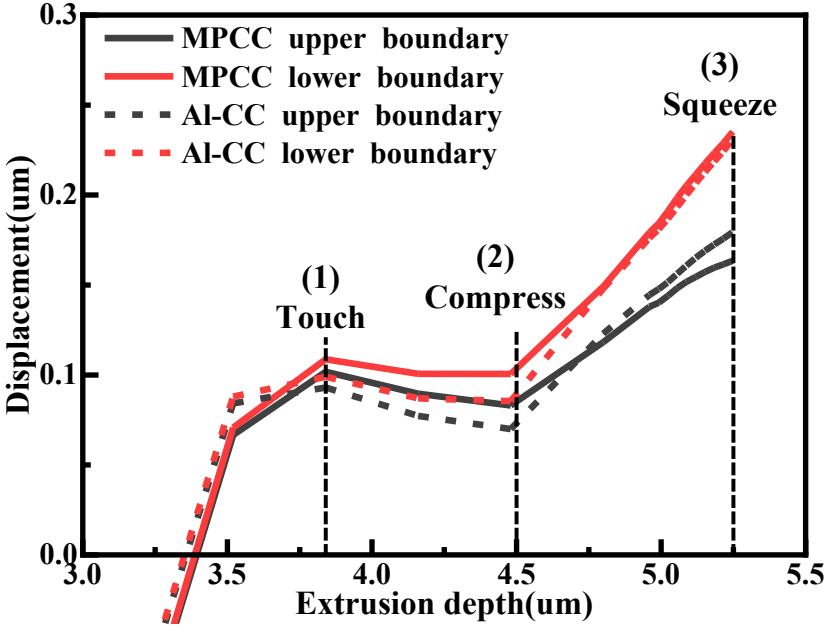






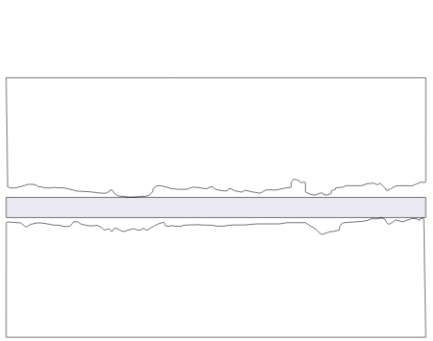




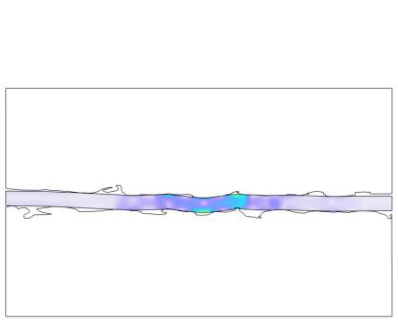


AFM (2026): e77067

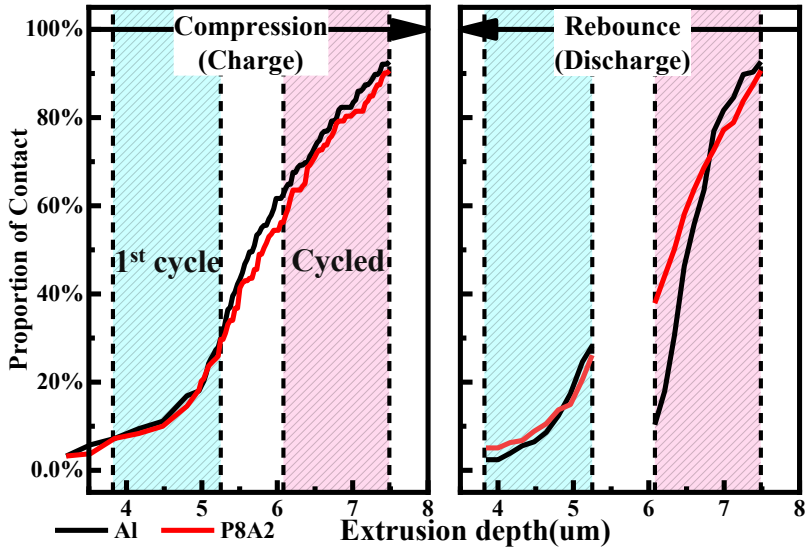
力电耦合模拟揭示电性能差异来源

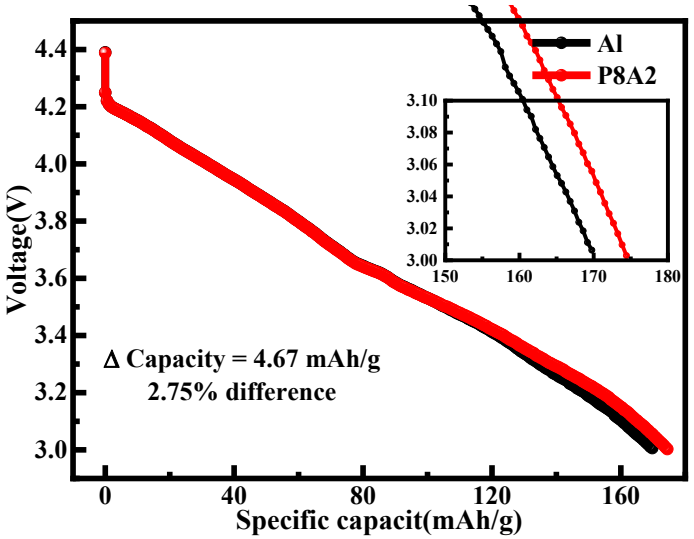


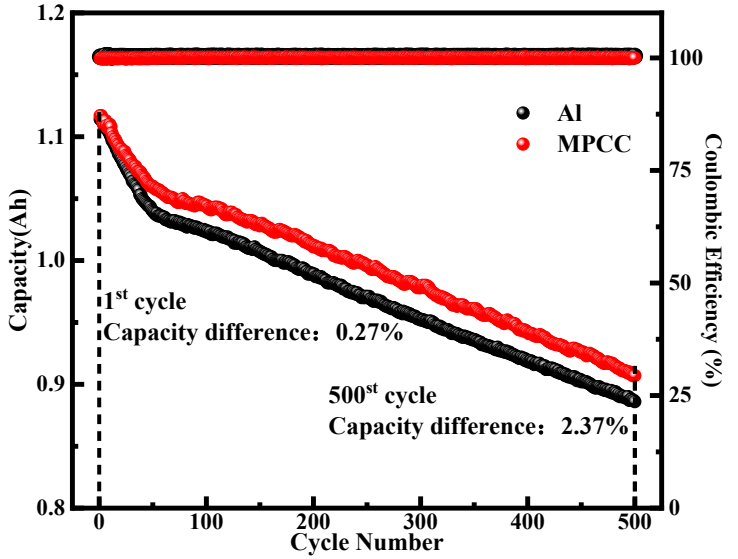
金属

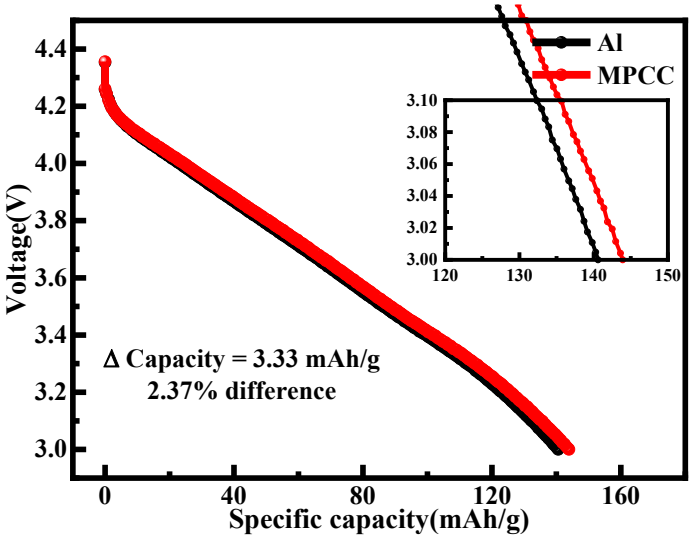


复合集流体









- 塑性的金属集流体在电芯反复膨胀收缩中变形严重，弹性的复合集流体则保持相对完整和良好接触

AFM (2026): e77067

怀柔-北京清洁能源前沿研究中心





- 中心位于中科院物理所怀柔园区，地处怀柔科学城核心起步区，占地约44亩；
- 拥有专业分析测试设备500余台套，硬件投资约4.2亿元；
- https://cebic.iphy.ac.cn/，联系人：陈一霞 老师，cyxia@iphy.ac.cn

详细地址：北京市怀柔区雁栖镇雁栖东二路中科院物理所清洁能源平台EA楼

欢迎大家前来指导交流！

清洁能源平台的数据来源

- 涵盖**30余种材料**成分、结构、形貌、表界面测试表征方法；
- 涵盖**单体电池到系统**的测试、评价与诊断分析能力；
- 满足**国标GB 31241-2014**电池系列安全性测试能力；
- 拥有**北京唯一**的针对轻元素的高分辨俄歇成像、连接真空转移的TOF-SIMS等分析设备；


X射线粉末衍射仪


核磁共振仪


拉曼光谱仪


红外光谱仪


高效液相色谱


离子色谱仪


液相色谱质谱联用


元素分析仪


微分电化学质谱


X线断层扫描


场发射扫描电子显微镜/能谱


飞行时间二次离子质谱仪


X射线光电子能谱仪


原子力显微镜



同步热分析仪



示差扫描量热仪



场发射透射电子显微镜


比表面仪


电导率仪


俄歇电子能谱


荧光光谱仪


电感耦合等离子体发射光谱/质谱仪



绝热加速量热仪


等温量热仪



毛细管孔径分析仪


自动压汞仪


闪电测试仪


真密度计


压实密度仪


激光粒度分析仪


充放电装置




电化学工作站

专业分析测试设备500余台套

清洁能源平台的数据来源

前段 | 中段 | 后段

匀浆 | 涂布 | 辊压分切 | 热复合叠片 | 自动装配 | 烘烤 | 注液 | 化成分容 | 电芯测试











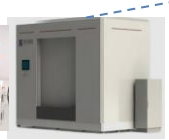














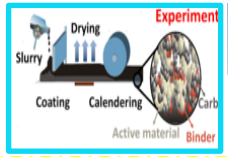

粒度仪 | 流变分析 | CCD | 激光测厚 | 二次元 | X/β-Ray | PPG | 内阻测试 | 水分 | 微纳CT | 超声探伤 | OCV | 原位膨胀

传感、在线检测、AGV

CRM、ERP、MES、FMEA

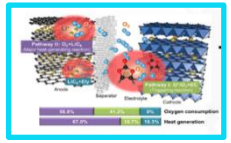


数据智能收集



电池工艺机理

电池缺陷演化



电化学机理



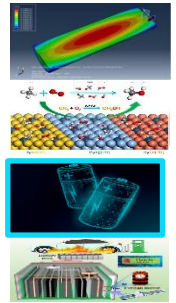
数据整合分析

模拟仿真

理论计算

数字孪生

失效分析



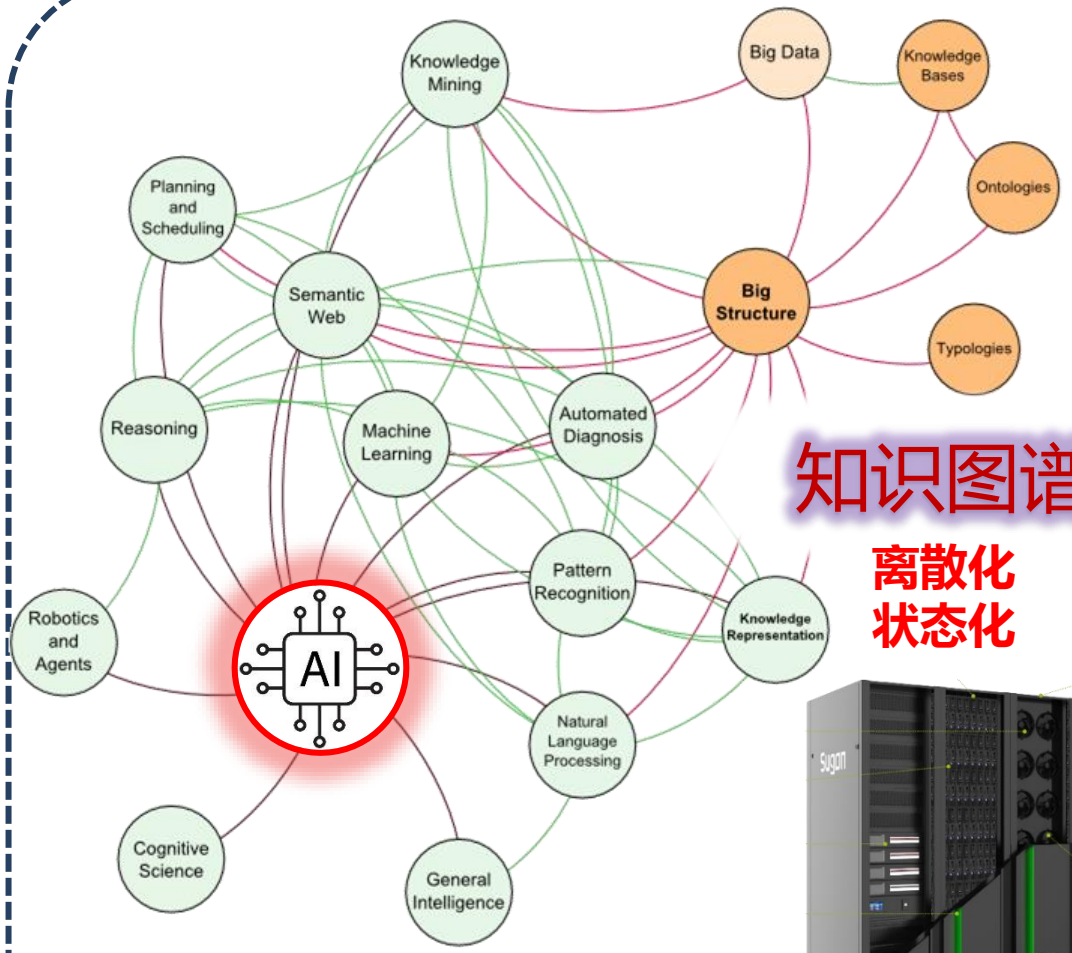
数据驱动

持续优化



智能研发

建立面向电池器件研发AI智能体的知识图谱

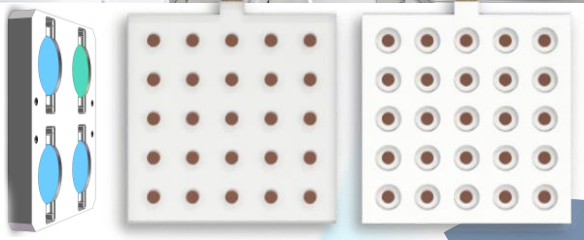


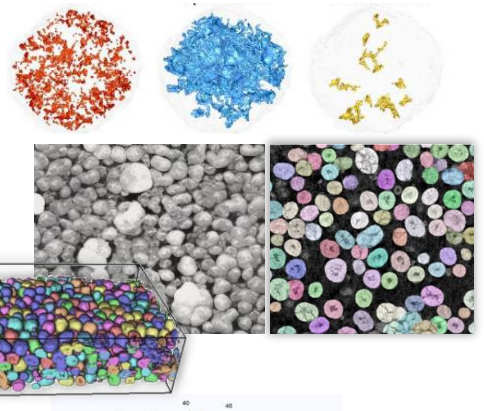
知识图谱

离散化
状态化

自动化的高通量实验（大量）

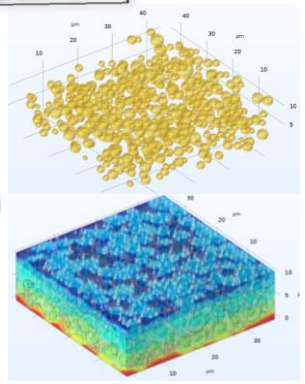




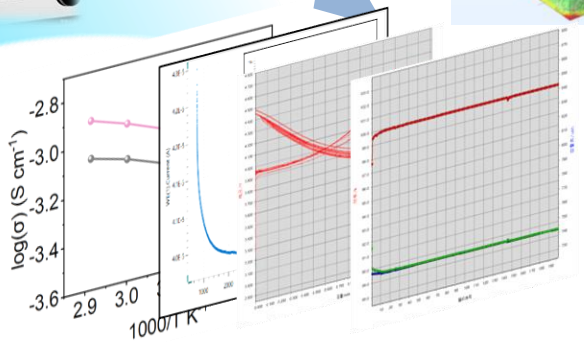








物理仿真
边界约束



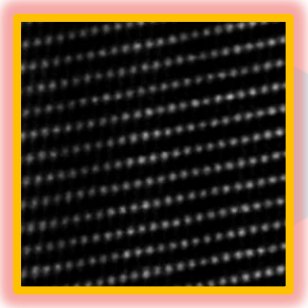
AI辅助的精准测量评估
（高质）

若要充分使用当前LLM的能力，使智能体能真正的赋能电池器件的研发，需要把电池连续变化的内部结构离散化，像材料研究一样准确定义内部颗粒、极片状态，成为LLM可以使用理解的“语料”。

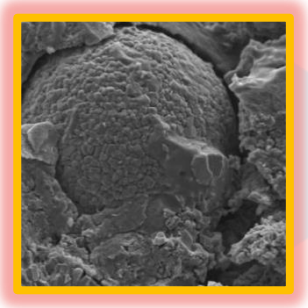
跨尺度多模态的知识图谱是形成电池研发AI智能体的关键

全尺度的模拟仿真

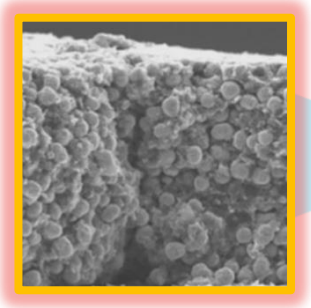
原子结构



颗粒结构

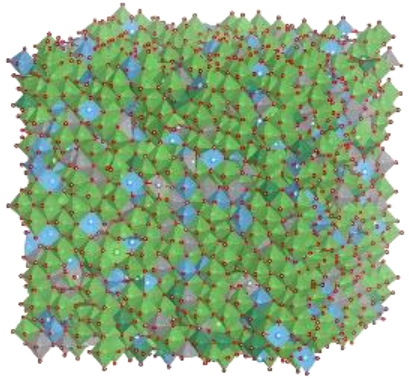


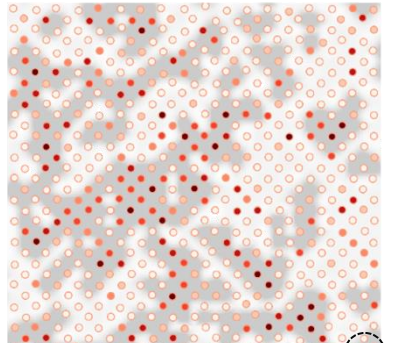
电极结构

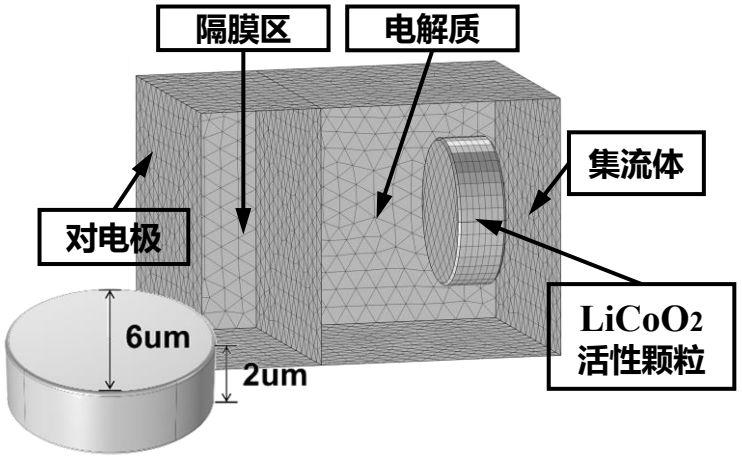


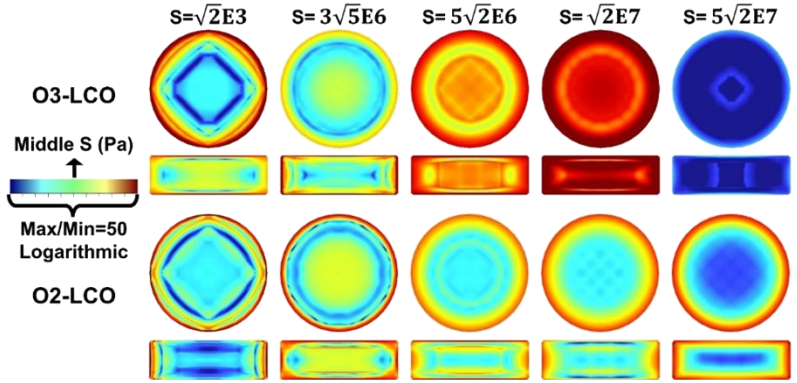
电芯结构

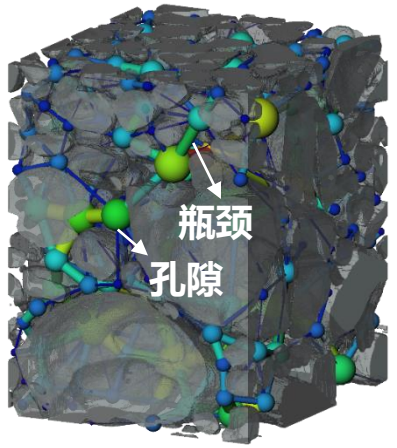


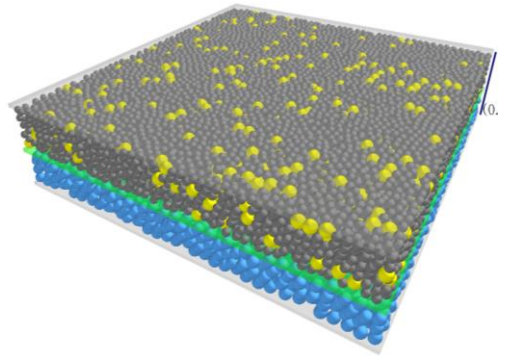


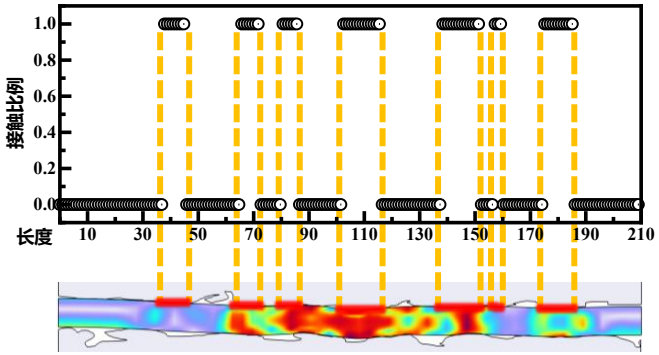


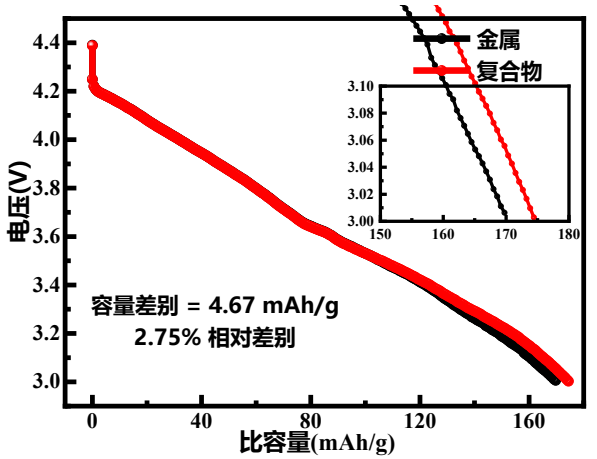




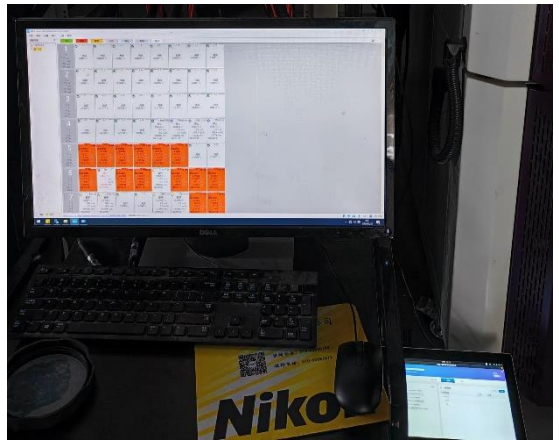


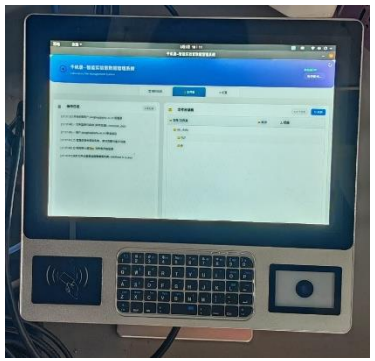


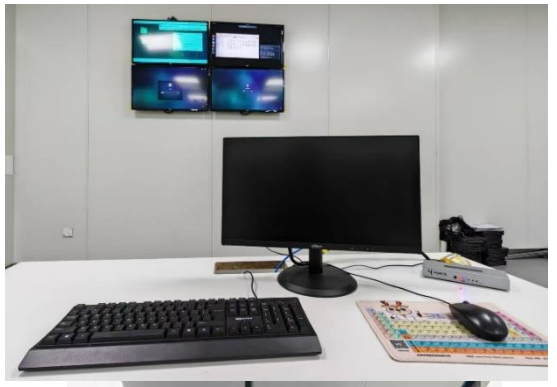




数据采集与分析系统









统一接口

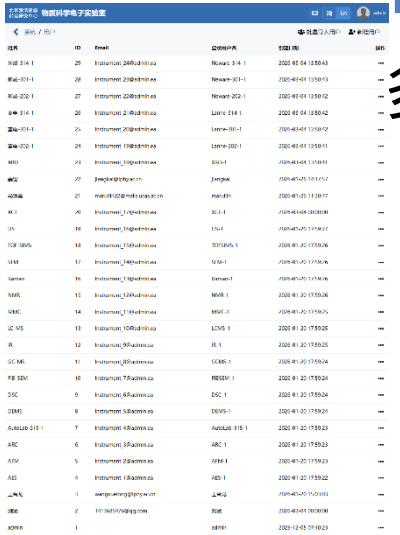
高速网络

多模态融合









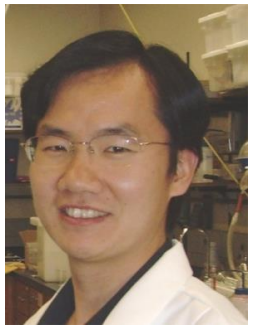
与高通量检测平台紧密结合的数据采集和存储系统，可支撑涵盖数十种类别信息的电池数据库

致谢

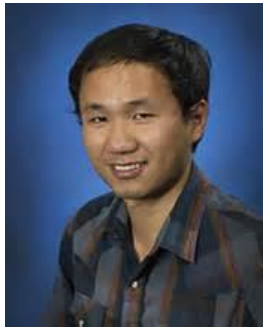

陈立泉


黄学杰


李泓


胡勇胜


肖睿娟


禹习谦


索鎏敏

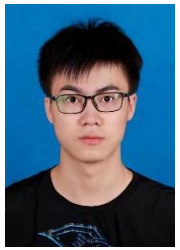

陈一霞


姜锴


王碧童


谢鸿盛


宋峻杰


李宏坤


周婉婷


马瑞霖


苗祥雨

多尺度模拟仿真和表征分析

敬请批评指正!