

白皮书

# 电池仿真

作者 HENRIK EKSTRÖM 和 ED FONTES

## 目录

简介 .....	3
仿真的应用范围 .....	3
多物理场仿真 .....	4
微尺度 .....	4
电芯尺度 .....	4
电池模组和电池包尺度 .....	5
电池仿真的趋势和结语 .....	6

### 更多资源

#### 用户故事

[www.comsol.com/stories](http://www.comsol.com/stories)

#### 案例下载

[www.comsol.com/models](http://www.comsol.com/models)

#### 论文和技术资料

[www.comsol.com/papers-presentations](http://www.comsol.com/papers-presentations)

#### COMSOL 博客

[www.comsol.com/blogs](http://www.comsol.com/blogs)

### 联系信息

了解如何使用 COMSOL® 软件进行数值仿真和仿真 App 设计, 完成您的建模方案, 请访问:  
[comsol.com/contact](http://comsol.com/contact)

联系技术支持, 请访问: [comsol.com/support](http://comsol.com/support)

原始出版物: *Tech Briefs* - February 2021 - Vol. 45 No. 2, *Battery Technology* Pages 8–11.

### 关于作者

#### Henrik Ekström, COMSOL

Henrik Ekström 于瑞典斯德哥尔摩的皇家理工学院 (KTH) 获得应用电化学博士学位。现就职于 COMSOL 公司, 任电化学技术经理, 负责为电池、燃料电池、腐蚀、电镀以及其他常规电化学应用开发仿真解决方案。

#### Ed Fontes, COMSOL

Ed Fontes 于瑞典斯德哥尔摩的皇家理工学院 (KTH) 获得应用电化学博士学位。现担任 COMSOL 公司的首席技术官, 负责 COMSOL 公司的技术开发工作。

## 简介

对电池进行研究和开发时，仿真模拟是一种经济、高效的方法。

仿真通常会与实验相结合，通过实验方法来验证仿真模型。在基于物理原理的基准模型经过验证后，研究人员就可以在理论适用的范围内使用仿真模型进行预测，从而极大的扩展了研究范围。

在整个研发过程中，研究人员和工程师可以借助仿真来进行虚拟实验，测试自己的想法。这些假设性的研究可以帮助我们更深入地了解电池系统，甚至可以激发新的灵感。通过模型，我们可以对电池系统进行预测、设计、优化和控制。

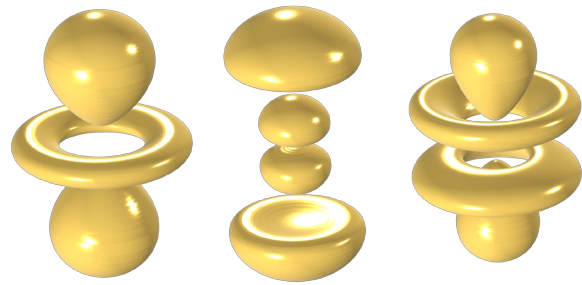
不同的用户研究电池系统的目标和计划各有不同。例如，在电动汽车中，电池系统的各个方面（包括能量密度、功率密度、寿命、成本和可持续性）可能决定了技术边界和用户的目标。

大学、研究机构和国家实验室通常有自己的研究计划，旨在从根本上了解电池用途的所有方面。研究主题包括新电池化学的材料研究；电芯和电池系统的设计；以及生命周期评估，包括原材料提取、处置和电池系统的回收过程。电池制造商也会做类似的研究，但他们更多的是关注电池的生产、集成和使用。原始设备制造商（OEM）会参与电芯和电池系统的设计，但他们通常更关注电池的使用，以及生命周期评估的各个方面。

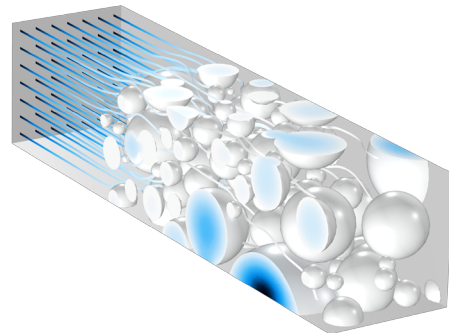
## 仿真的应用范围

根据用户和研究目标的不同，仿真可以在不同范围内进行，可能涉及在分子尺度、微观尺度、电池模组，以及电堆尺度的模拟过程。材料的提取、处置和回收等方面也会对仿真项目产生影响，间接地决定了电芯、电池模组和电池包的性能范围。

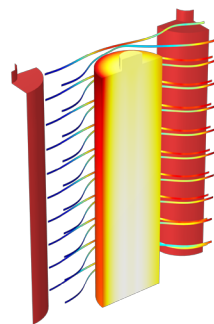
研究电池的材料学家、电化学家和物理学家可以使用分子动力学模型来模拟和预测可能的新材料和电池的化学行为。这种类型的研究通常在大学、研究机构、国家实验室和电池制造商的研发实验室中进行。



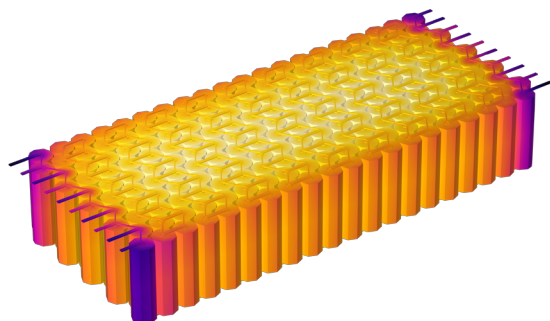
分子尺度  $\rightarrow 0.5 \text{ \AA}$



微尺度  $\rightarrow 5 \text{ \mu m}$



电芯尺度  $\rightarrow 2 \text{ mm}$



电池模组和电池包尺度  $\rightarrow 2 \text{ cm}$

图 1 建模尺度可以跨越从埃 ( $10^{-10} \text{ m}$ ) 到模组尺度 (1 m)。图中以圆柱形锂离子电芯和圆柱形电池模组为例对这些尺度进行了说明。

电池材料的微观结构和其物理特性是包括原始设备制造商在内的许多用户都感兴趣的问题，他们也同样关心电芯中的电极、电解液、隔膜和集流体的设计。在这些研究中，仿真对于理解和优化用于特定应用的良好电池设计方案发挥了重要作用。

电动汽车的电池系统由电池模组和电池包组成。电池制造商和原始设备制造商都很关注电池系统的设计。国家实验室和研究机构也经常参与这类用于航空航天和国防的研究中。仿真的重点是理解和提升系统性能（能量密度和功率密度）、热管理、安全性和电池寿命。

## 多物理场仿真

### 微尺度

在微观尺度上对电池进行仿真涉及到多孔结构和孔隙电解质的化学、物理特性和详细的几何形状。分子尺度的模拟可以为微观模型提供输入数据，包括速率常数、电极电位、传输特性，以及电池材料的其他化学和物理特性。

微尺度模型必须考虑电子导体（电极）的电势、孔隙电解质和自由电解质的离子势、离子和中性物质的浓度、电化学和化学反应、温度分布，以及由于热膨胀或化学物质的运输引起的机械位移。换句话说，对电池材料的精准描述涉及多个物理现象。

微尺度仿真项目的一个重要贡献是对决定电池性能和寿命的基本机制的深刻理解。借助这些仿真模型，我们可以对性能的绝对极限（能量密度和功率密度）、材料和设计参数的影响、电化学反应的分布、温度分布、短路和过早失效的风险、有害副产品的形成、疲劳和失效的风险，以及其他可能决定电池性能和寿命的因素进行定量评估。此外，这些仿真模型使得开发检测和评估电池健康状态的方法成为可能，因为性能衰减和失效几乎总是首先表现在微观尺度上，远远早于电芯的整体性能出现明显的问题。

### 电芯尺度

比微观尺度更大一级的电池建模是在电芯尺度。多孔电极可以被描述为均质板，其中孔隙电解质和电极材料被定义在模型的同一个空间点上，见图 1（上）。这意

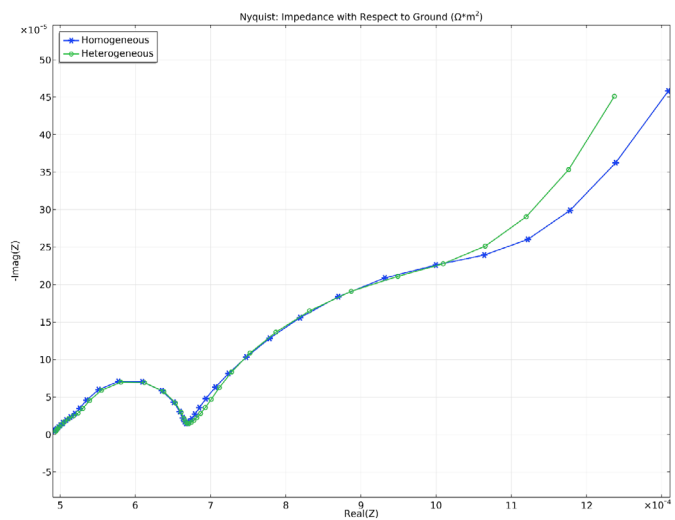
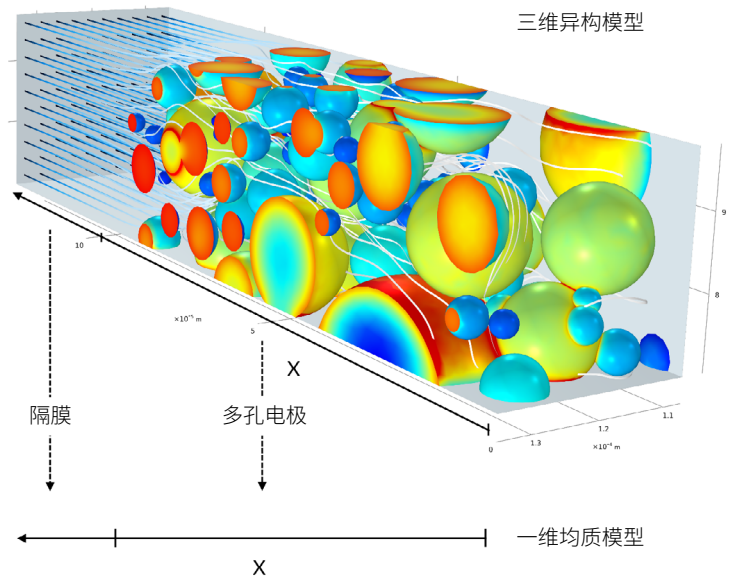


图 2 异构电极模型包含了基于球形颗粒的三维描述，这些颗粒是通过处理锂离子电池电极的显微照片获得的。异构模型可以用来计算孔隙率、比表面积和其他有效属性，这些属性可用于均质化的一维纽曼模型，其中电极被描述为一个均质板（上）。奈奎斯特图显示，详细的异构模型和平均的均质模型的结果非常吻合，尤其是在高频下。在这种情况下，异构模型验证了均质模型（下）。

味着电极的结构可以使用有效参数描述，如孔隙电解质的体积分数、电极的体积分数和迂曲度。这些模型利用了 Newman 等研究人员提出的多孔电极理论，这个理论构成了在电芯尺度上进行电池建模的基础。

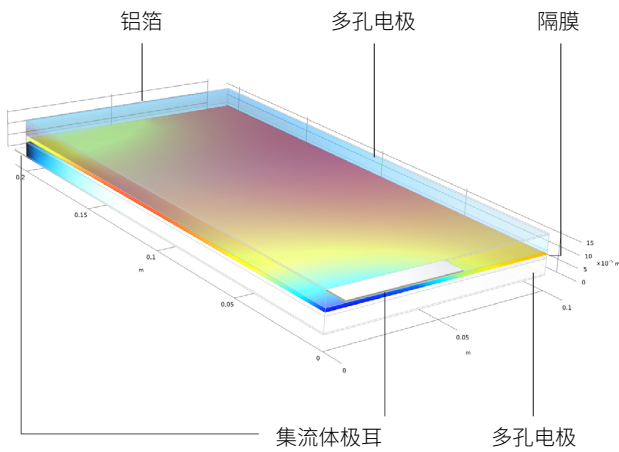
电芯尺度模型的研究涉及的方面与微尺度模型类似，但仅针对一个或几个电芯。典型的研究将涉及不同

材料和化学成分对性能和寿命的影响；电极的孔隙率；电极和不同电极材料的比表面积（如果同一电极有几种材料）；集流体、电极和隔膜的厚度、长度和宽度；充放电时几何形状和膨胀对电芯产生的机械负荷；热管理系统的影响；以及其他可能影响电芯的参数。

统和电池系统的宏观力学分析等。其中的电极和隔膜可以被描述为具有等效力学和热性能的均质材料。

这种宏观尺度的建模和仿真主要关注电池模组或电池包的材料特性、几何形状、运行条件、热管理系统、宏观力学设计和其他设计参数的影响。

电池模组和电池包模型的常见输出包括温度分布，单个电池之间的电流和电位分布，温度、充电和放电对不同电池的机械膨胀的影响，膨胀以及机械设计对电池模组或电池包的力学完整性的影响，电池中带有冷却和加热通道的热管理系统带来的温度分布，外部电流传导系统设计的影响，以及可能影响电池模组或电池包的其他方面。这些模型也可以用于设计感应电芯故障和热失控的早期预警系统。



**图 3** 使用一个锂离子电池包单元的三维纽曼模型模拟得到的隔膜中的电流密度分布。模型应用了多孔电极理论，包括老化的影响，如固体电解质界面（SEI）的增长。图中的电池由顶部和底部的两个铝箔、两个多孔电极（一个正极和一个负极）以及电极之间的隔膜组成。铝箔上各有一个极耳，连接到外部电路。这是一个典型的电芯尺度的高保真模型。

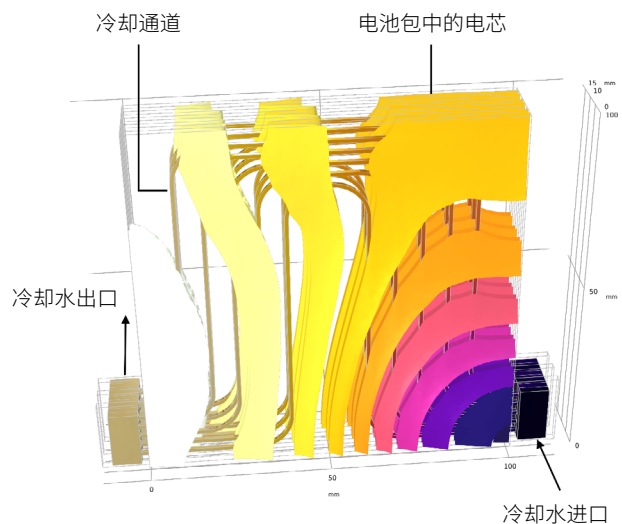
## 电池仿真的趋势和结语

电池系统模型的复杂程度取决于电池系统本身的用途。微观模型较为复杂，旨在详细了解电池的核心。作为电动汽车动力传动系统的一部分，用于控制电池包的模型可能不会有同样的复杂程度。这些可能使用了集总方法的模型通常并不涉及电池系统的物理原理。

在这种尺度下，仿真可以从电流和电位分布、温度分布、金属沉积和短路、充电和放电过程中由于膨胀造成的电极疲劳和开裂，以及副产品的形成和降低寿命的副反应的发生等各个方面，获得对电池性能、性能局限性和寿命的定量估计。这些模型的特点和性能以及定量预测可以用详细的微观模型进一步验证，即电芯模型可以与电池的详细微观特性联系起来。

## 电池模组和电池包尺度

单个电芯可能是一个电池模组或者电池包的一部分，这些模组可能由几十到上百个电芯组成，这意味着我们很难使用多孔电极理论对每个电芯进行三维模拟。因此，我们使用集总的方法建立零维和一维模型来描述每个电芯的电化学行为。这些模型可以经过验证，并连接回更详细的电芯模型。电池模组或者电池包的三维几何形状则被用于计算更加宏观的性能，如热管理、外部电流传导系



**图 4** 由平板锂离子电池组成的电池包的截面图。冷却通道被整合到电池包中，其中的流场和温度分布与每个电池的电化学反应耦合在一起。如图 2 (下) 所述，电池包中每个电芯的电化学用一个一维均质模型来描述，并与三维的传热模型相互耦合。电池包模型通过验证和参数估计连接到详细的微观模型。

即使是大型电池系统,也需要有先进的方法对电池故障和电池系统的健康状态进行早期检测。这些方法可能基于并连接了集总模型或微观模型,其中高保真模型可能是用于特定电池包的、位于中央服务器中的数字孪生的一部分。因为我们希望能够解释性能下降的原因,并且需要在故障未发生前就能够预测到。即使是很小的

故障,也必须能够从物理上解释故障发生和性能下降的原因,这样才能改进电池系统的检测、设计、控制和操作。多物理场仿真可以从电池的微观到宏观属性,进行定性和定量地分析,为电池系统提供了一个完整的仿真解决方案。

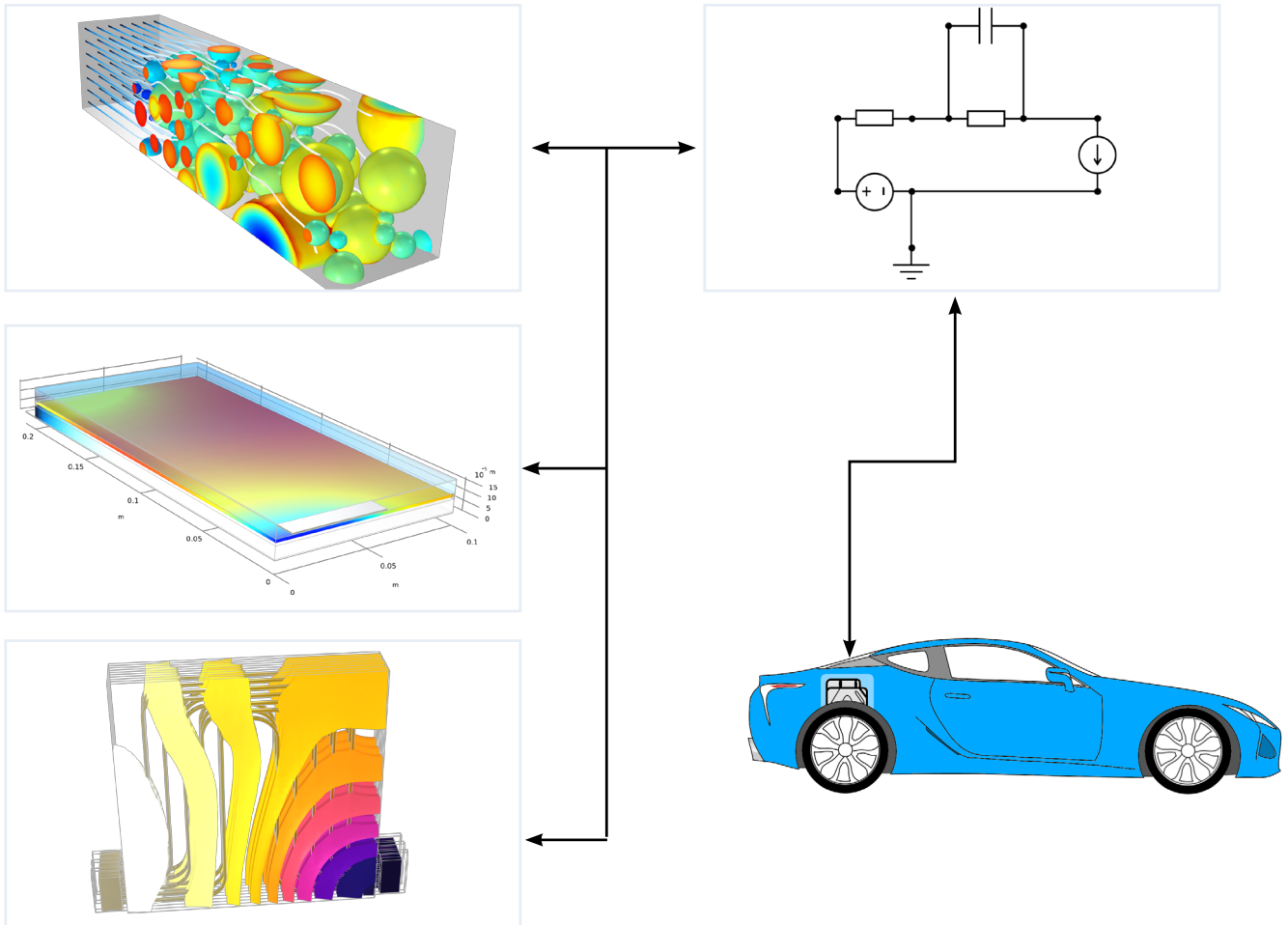


图 5 所有级别的复杂性都必须以某种方式嵌入到电动或混合动力汽车的电池包模型中。这可以通过经过验证的集总模型来实现,这些模型可以连接到电芯的基本属性,其中复杂的模型是位于中央服务器的数字孪生的一部分。本例中的集总模型采用的是等效电路,但它也可以是使用机器学习技术获得的高级表格查询类型的模型。

[www.comsol.com](http://www.comsol.com)

