

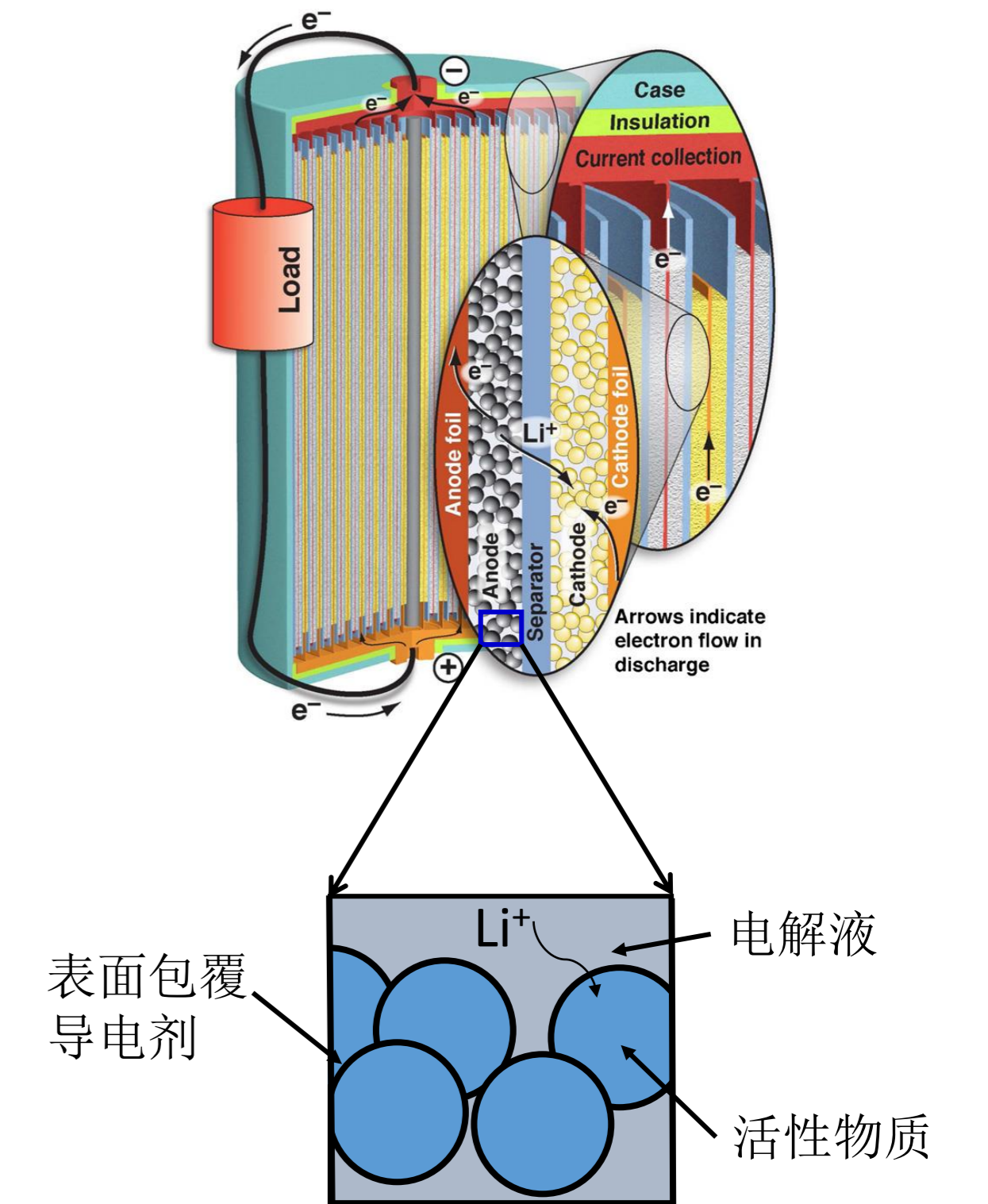
研究背景

- 以新能源汽车产业为代表的战略性新兴产业已成为当前的关注焦点和研究热点, 而新能源汽车发展的关键是电池技术。
- 锂离子电池由于具有工作电压高、能量密度高、循环寿命长、无记忆效应等优点, 成为汽车动力电池的首选。
- 锂离子电池是一个复杂的能源系统, 其内部各个部分和因素关联复杂, 整体行为具有时空多尺度特性。
- 利用 COMSOL Multiphysics® 仿真软件, 实现多物理场的仿真模拟, 构建相关物理模型, 进行仿真计算。



多尺度特征

- 电池电流和传热**
集流体、极耳、盖帽等
涉及尺度: $10^{-2} \sim 10^0$ m。
- 极片设计及锂传输**
极片选取、锂传输、孔隙率、扭曲率
涉及尺度: $10^{-5} \sim 10^{-2}$ m。
- 电极结构设计**
锂传输途径、电极比表面积、结构稳定性
涉及尺度: $10^{-8} \sim 10^{-6}$ m。
- 电极材料设计**
电压、容量、传输性质
涉及尺度: $10^{-10} \sim 10^{-8}$ m。



创建模型

电化学模型

- 动力学:
$$j_{loc,i} = j_{0,i} \left\{ \exp \left[\frac{\alpha_{a,i} \eta_i F}{RT} \right] - \exp \left[-\frac{\alpha_{c,i} \eta_i F}{RT} \right] \right\}$$

$$j_{0,i} = F k_i c_2^{a_i} (c_{1,max,i} - c_{1,surf,i})^{b_i} c_{1,surf,i}^{c_i}$$

$$\eta_i = \phi_{1,i} - \phi_{2,i} - U_{rect,i}$$
- 物质守恒:
$$\frac{\partial c_{1,i}}{\partial t} - \frac{D_{1,i}}{r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial c_{1,i}}{\partial r} \right) \right] = D_{1,i} \left[\frac{2}{r} \frac{\partial c_{1,i}}{\partial r} + \frac{\partial^2 c_{1,i}}{\partial r^2} \right]$$

$$c_2 \frac{dc_2}{dt} + \nabla \cdot (-D_2^eff \nabla c_2) = \frac{S_{ai} j_{loc,i}}{F} (1 - t_+)$$
- 电荷守恒:
$$\nabla \cdot (-k_2^eff \nabla \phi_2) = -S_{ai} \left(j_{loc,i} + C_i \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial t} - \frac{\partial \phi_2}{\partial t} \right) \right)$$

$$\nabla \cdot \left[k_2^eff \left[-\nabla \phi_2 + \frac{2RT}{F} \left(1 + \frac{\partial \ln F}{\partial \ln c_2} \right) (1 - t_+) \nabla c_2 \right] \right] = S_{ai} j_{loc,i}$$

热模型

- 产热方程:
$$Q_{total} = Q_{ohm} + Q_{chem}$$
- 传热方程:
电池内部: $\rho_i C_{p,i} \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (-k_i \nabla T) = Q_{total}$
电池外部: $-\lambda \frac{\partial T}{\partial x} = -h(T_{amb} - T) - \epsilon(T_{amb} - T^4)$

模型假设

- 传热模型中电池内部假定为均一物质
- 电极材料假定为球型
- 不考虑内部副反应和气体
- 电池内部无对流

多维仿真

Electrode 层次

主要内容

- 电势
- 极化
- 形貌影响
- 材料性质
- 工况
- 发热量计算

Cell 层次

主要内容

- 电势分布
- 温度分布
- 电流密度分布
- 离子浓度分布
- SOC 分布
- 工况

Pack 层次

主要内容

- 外壳设计
- 应力计算
- 工况影响
- 热管理策略
- 热滥用
- 电路仿真

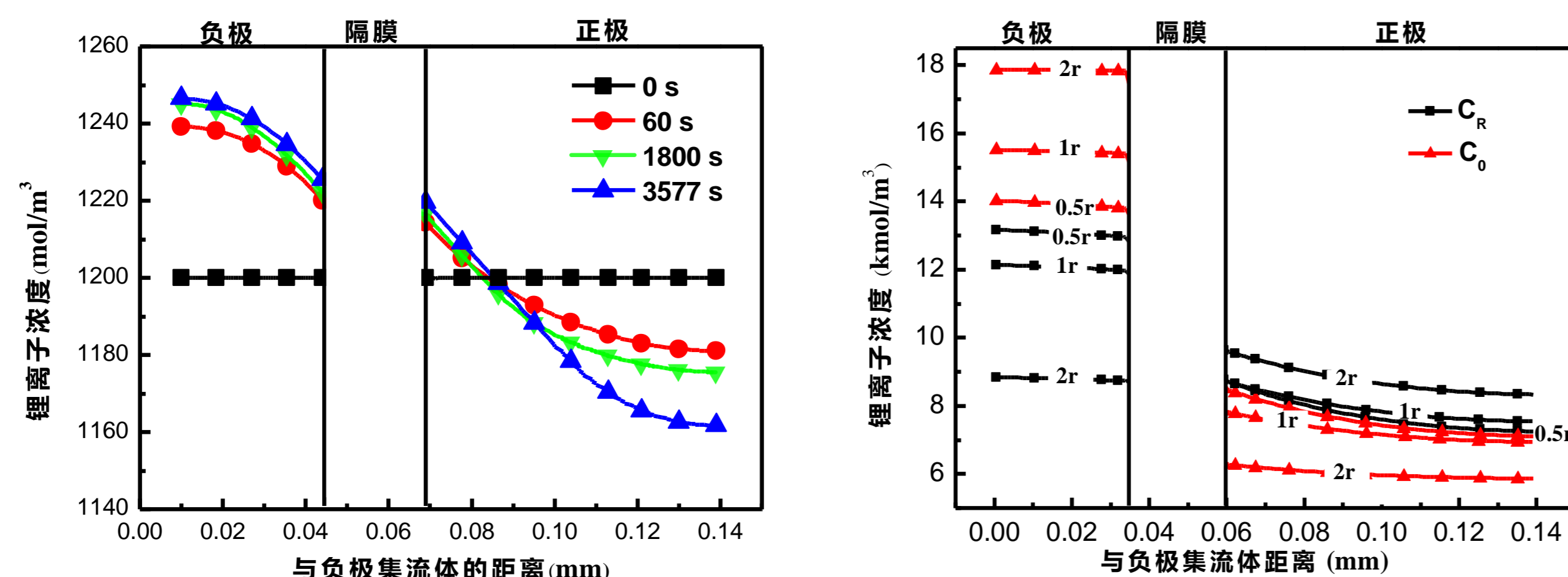
模型验证

主要内容

- 电池闲置测试
- 容量测试
- HPCC 测试
- 红外成像测试
- 循环寿命测试
- 微量量热仪

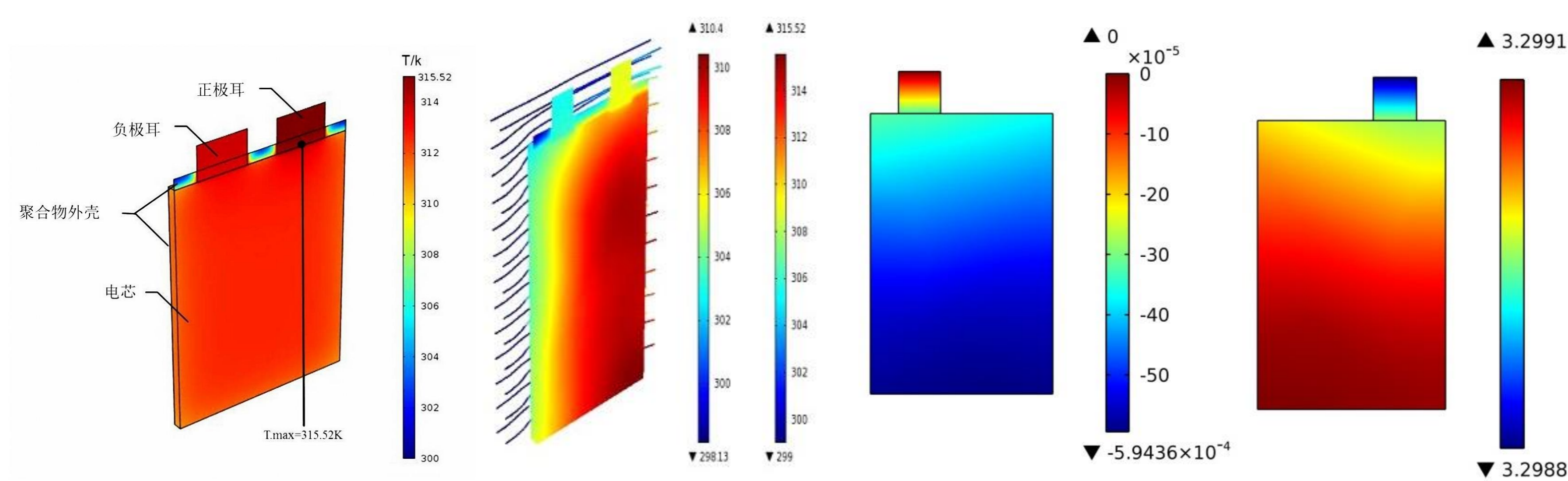
研究案例

Electrode 层次

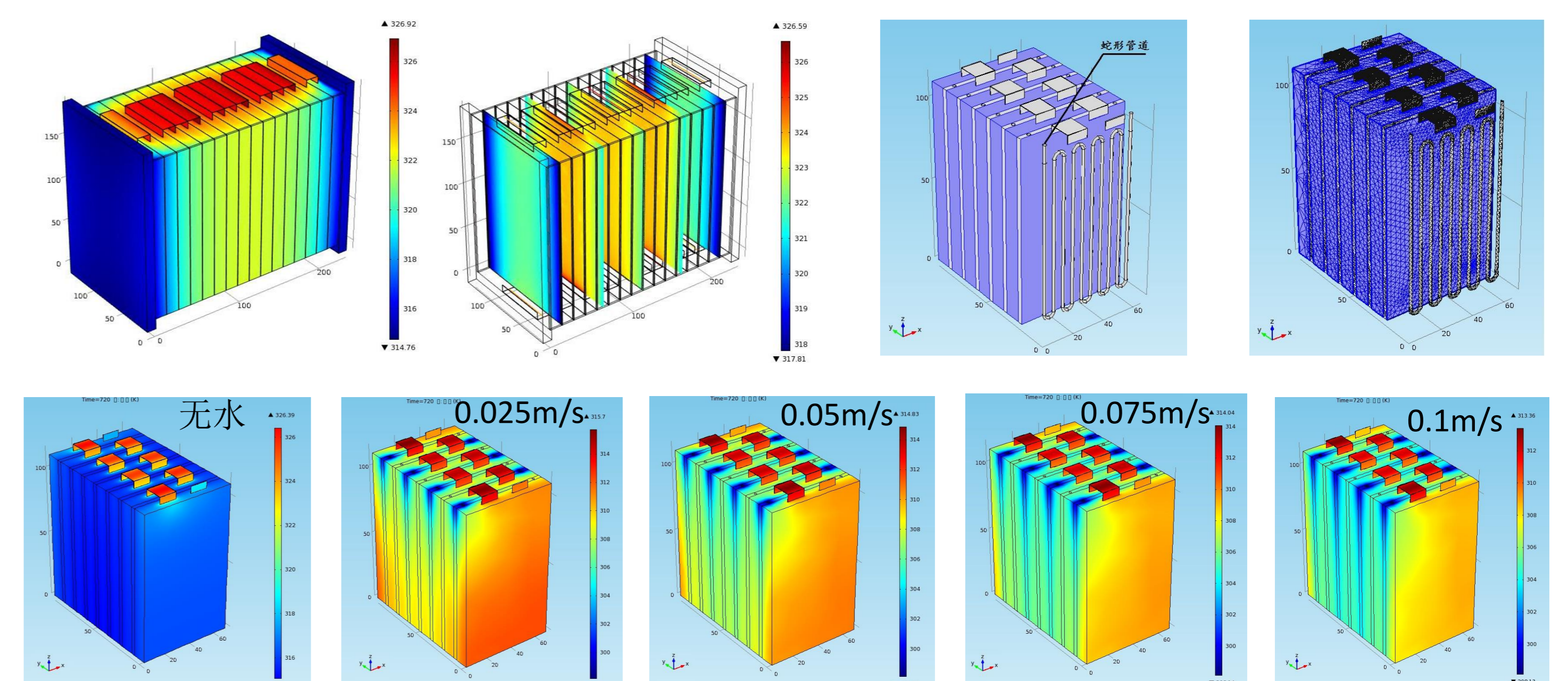


- 放电过程中, 电池内部存在明显的浓度梯度
- 活性物质粒径对固相浓度梯度有重要影响

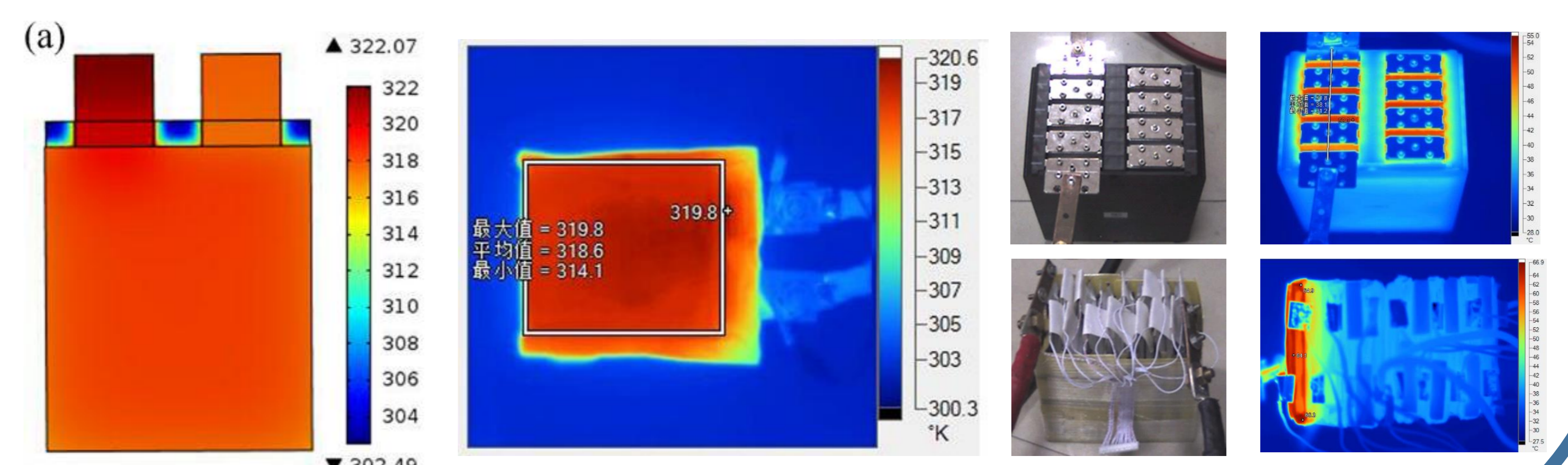
Cell 层次



Pack 层次



模型验证



结论

- 多尺度仿真能够对锂离子动力电池的电化学和热行为进行全面而细致的定量研究
- 多尺度仿真能够深化对锂离子电池的认识, 完善相关理论, 指导电池设计, 对锂离子电池发展具有重要意义

展望

- 锂离子电池是一种复杂多物理场体系, 使用 COMSOL 独特的多物理场耦合特性, 构建有效模型, 对锂离子电池体系的研究以及产品升级具有有效促进作用