(19)国家知识产权局

(12)发明专利申请

(10)申请公布号 CN 117524329 A
(43)申请公布日 2024.02.06

(21)申请号 202311247309.6

(22)申请日 2023.09.25

(71)申请人 四川大学
地址 610044 四川省成都市一环路南一段24号

(72)发明人 胡文曦 郑子萱 汪颖 肖先勇 陈智凡

(74)专利代理机构 西安正华恒远知识产权代理事务所(普通合伙) 61271
专利代理师 傅晓

(51)Int.Cl.
G16C 20/10(2019.01)
H01M 10/42(2006.01)
H01M 10/0525(2010.01)
G01R 31/36(2020.01)
G06F 30/20(2020.01)
G06T 17/20(2006.01)
G06F 119/08(2020.01)
G06F 111/10(2020.01)

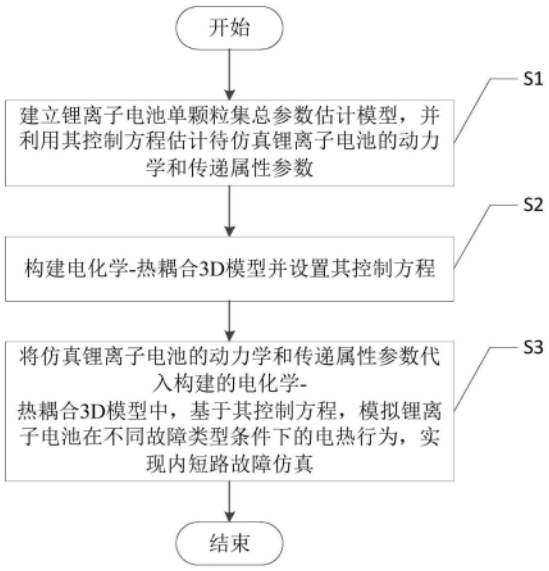
权利要求书4页 说明书12页 附图2页

(54)发明名称

一种锂离子电池内短路故障仿真方法

(57)摘要

本发明公开了一种锂离子电池内短路故障仿真方法,包括:S1、建立锂离子电池单颗粒集总参数估计模型,并利用其控制方程估计待仿真锂离子电池的动力学和传递属性参数;S2、构建电化学-热耦合3D模型并设置其控制方程;S3、将仿真锂离子电池的动力学和传递属性参数代入构建的电化学-热耦合3D模型中,基于其控制方程,模拟锂离子电池在不同故障类型条件下的电热行为,实现内短路故障仿真。本发明解决了现有故障仿真方案在模拟准确性、计算快速性以及应用广泛性上的缺陷,建立内短路故障电化学-热耦合3D模型,为内短路故障检测方法提供仿真数据基础。



CN 117524329 A

1.一种锂离子电池内短路故障仿真方法,其特征在于,包括以下步骤:

S1、建立锂离子电池单颗粒集总参数估计模型,并利用其控制方程估计待仿真锂离子电池的动力学和传递属性参数;

S2、构建电化学-热耦合3D模型并设置其控制方程;

S3、将仿真锂离子电池的动力学和传递属性参数代入构建的电化学-热耦合3D模型中,基于其控制方程,模拟锂离子电池在不同故障类型条件下的电热行为,实现内短路故障仿真。

2.根据权利要求1所述的锂离子电池内短路故障仿真方法,其特征在于,所述步骤S1中,所述集总参数估计模型的输入参数包括待仿真锂离子电池的电池容量、电压、初始荷电状态以及测得开路电压与SOC,输出参数为1C倍率下的欧姆过电位$\eta_{IR,1C}$、电荷交换电流J_0和扩散时间常数τ;

所述集总参数估计模型中的控制方程包括电解液中集总溶液电阻项所表示的欧姆电势降过程方程、单粒子扩散过程所引起的潜在损耗方程、颗粒表面的荷电状态方程以及浓度过电位导致的电压损失方程。

3.根据权利要求2所述的锂离子电池内短路故障仿真方法,其特征在于,所述集总参数估计模型中,欧姆电势降过程方程为:

$$\eta_{IR}=\eta_{IR,1C}\frac{I_{cell}}{I_{1C}}$$

$$\eta_{act}=\frac{2RT}{F}asinh\left(\frac{I_{cell}}{2J_0I_{1C}}\right)$$

式中,η_{IR}为欧姆过电位,$\eta_{IR,1C}$为1C倍率对应的欧姆过电位,I_{cell}为外加电流,$I_{1C}=\frac{Q_{cell,0}}{3600s}$,$Q_{cell,0}$为电池容量,s为时间单位秒;$\eta_{act}$为正负电极上的电荷转移过程所造成的集总电压损失,R为摩尔气体常数,F为法拉第常数,T为温度,asinh(•)为反双曲线正弦函数,J_0为无量纲的电荷交换电流;

单粒子扩散过程所引起的潜在损耗方程为:

$$\tau\frac{\partial SOC}{\partial t}=-\nabla\cdot(-\nabla SOC)$$

式中,τ为扩散时间常数,SOC为荷电状态,t为时间,∇为散度;

颗粒表面的荷电状态方程为:

$$SOC_{average}=\frac{\int SOC4\Pi X^2dX}{\int_0^1 4\Pi X^2dX}=3\int_0^1 SOCX^2dX$$

式中,$SOC_{average}$为平均荷电状态,Π为π,X为颗粒半径;

浓度过电位导致的电压损失方程为:

$$\eta_{conc}=E_{OCV}(SOC_{surface})-E_{OCV}(SOC_{average})$$

式中,η_{conc}为浓度过电位导致的电压损失,E_{OCV}(•)为开路电压,$SOC_{surface}$为X=1处颗粒表面的荷电状态。

4.根据权利要求2所述的锂离子电池内短路故障仿真方法,其特征在于,所述步骤S2

中,所述电化学-热耦合3D模型的几何结构包括长方体极芯、铝制外壳和极耳,且不考虑方形卷绕式极芯的边缘曲率对电化学反应的影响;

所述电化学-热耦合3D模型的采用局部的P2D电化学模型和整体的3D热模型相耦合的方式,模拟不同故障类型条件下的电热行为。

5.根据权利要求3所述的锂离子电池内短路故障仿真方法,其特征在于,所述步骤S3中,所述电化学-热耦合3D模型的控制方程包括P2D电化学模型到3D热模型平均产热功率转化方程,以及锂离子电池单体的电化学反应控制方程;

其中,锂离子电池单体的电化学反应控制方程包括电势控制方程、电解液电势控制方程、极芯中的电荷传输过程方程、电解液中的液相锂离子平衡控制方程、热平衡方程、电化学反应速率方程、内短路电流方程、内短路反应方程以及参数有效性校正方程。

6.根据权利要求5所述的锂离子电池内短路故障仿真方法,其特征在于,所述P2D电化学模型到3D热模型平均产热功率转化方程为:

$$Q_{3D}=Q_{P2D}\frac{L_{CC}^{+}+L_{CC}^{-}}{L^{+}+L^{-}+L^{SEI}}\frac{r_{P2D}^{2}-r_{nail}^{2}}{r_{P2D}^{2}}$$

$$\rho_{p}=\frac{\sum L_i\rho_i}{\sum L_i},C_{p}=\frac{\sum L_iC_{p,i}}{\sum L_i},k_{p}=\frac{\sum L_i}{\sum L_i/k_{T,i}}$$

式中,Q_{3D}、Q_{P2D}分别为3D热模型和P2D电化学模型的产热功率,L_{CC}^{+}为正极的集流体极片厚度,L_{CC}^{-}为负极的集流体极片厚度,L^{+}为正极的极片厚度,L^{-}为负极的极片厚度,L^{SEI}为SEI膜的极片厚度,r_{P2D}为P2D电化学模型半径,r_{nail}为金属丝半径,ρ_p为P2D电化学模型密度,L_i为3D热模型第i层厚度,ρ_i为3D热模型第i层密度,C_p为3D热模型第i层比热容,$C_{p,i}$为P2D电化学模型第i层比热容,k_p为3D热模型热导率,$k_{T,i}$为P2D电化学模型第i层热导率。

7.根据权利要求5所述的锂离子电池内短路故障仿真方法,其特征在于,所述电势控制方程为:

$$\nabla\cdot\left(\sigma^{eff}\nabla\phi_s\right)=j^{Li}$$

式中,∇为散度,σ^{eff}为有效电导率,φ_s为固相电势,j^{Li}为锂电池反应电流损耗;

电解液电势控制方程为:

$$\nabla\cdot\left(\kappa\nabla\phi_e\right)+\nabla\cdot\left(\kappa_D\nabla\ln c_e\right)=-j^{Li}$$

式中,∇为散度,κ为化学反应速率,φ_e为液相电势,κ_D为液相化学反应速率,c_e为液相反应物浓度,j^{Li}为锂电池反应电流损耗;

极芯中的电荷传输过程方程:

$$\frac{\partial c_S}{\partial t}=\frac{D_S}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial c_S}{\partial r}\right)$$

式中,c_S为固相反应物浓度,r为极芯半径,D_S为多孔电极中锂离子的扩散系数,t为多孔电极的径向坐标;

电解液中的液相锂离子平衡控制方程为:

$$\frac{\partial(\varepsilon_e c_e)}{\partial t}=\nabla\cdot\left(D_e\nabla c_e\right)+\frac{1-t_+^0 j^{Li}}{F}$$

式中，ε_e为液相孔隙率，t为多孔电极的径向坐标，c_e为液相反应物浓度，∇为散度，D_e为电解质扩散系数，t_+^0为锂离子转移系数，j^{Li}为锂电池反应电流损耗，F为法拉第常数；

热平衡方程为：

$$\frac{\partial\left(\rho c_p T\right)}{\mathrm{d}t}=\nabla\cdot(k\nabla T)+Q_{\mathrm{P2D}}$$

$$Q_{P2D}=Q_{rev}+Q_{pol}+Q_{TR}+Q_{ISC}$$

式中，ρ为密度，c_p为均质比热容，T为温度，t为时间，∇为散度，k为热导率，Q_{P2D}为P2D电化学模型的产热功率，Q_{rev}为P2D电化学模型的可逆反应产热功率，Q_{pol}为P2D电化学模型的极化产热功率，Q_{TR}为P2D电化学模型的热失控产热功率，Q_{ISC}为P2D电化学模型的内短路产热功率；

电化学反应速率方程为：

$$j^{\mathrm{Li}}=a_s i_o\left[\exp\left(\frac{\alpha_a F}{RT}\eta\right)-\exp\left(-\frac{\alpha_c F}{RT}\eta\right)\right]$$

$$\eta=\phi_s-\phi_e-U-\frac{R_{SEI}}{a_s}j^{\mathrm{Li}}$$

式中，j^{Li}为锂电池反应电流损耗，a_s为颗粒每单位体积的活性表面积，α_a和α_c均为电极反应的传递系数，i_0为电极交换电流面密度，η为电极反应的过电位，R为摩尔气体常数，F为法拉第常数，T为温度，φ_s为固相电势，φ_e为液相电势，U为电位，R_{SEI}为SEI膜单位面积电阻；

内短路电流方程为：

$$I_{ISC}=-\Delta\Phi_S/R_{ISC}=\int i_S\mathrm{d}A=N\cdot A\cdot i_S$$

式中，I_{ISC}内短路电流，$\Delta\Phi_S$为内短路通路截面积对应的固体电势梯度，R_{ISC}为内短路通路等效电阻，i_S为SEI膜单位面积电阻，A为极芯面积，N为卷绕式极片的叠片层数；

内短路反应方程为：

$$\Delta H_{TR}=M\cdot C_{P1}\cdot\Delta T$$

式中，ΔH_{TR}为热失控焓，M为极芯的质量，C_{P1}为极芯视为均值的比热容，ΔT为单体最高温度与热失控起始温度之间的温差；

参数有效性校正方程为：

$$\sigma^{\mathrm{eff}}=\sigma\varepsilon_s,\kappa^{\mathrm{eff}}=\kappa\varepsilon_e$$

$$D_e^{\mathrm{eff}}=D_e\varepsilon_e$$

$$\kappa_D^{\mathrm{eff}}=\frac{2RT\kappa^{\mathrm{eff}}}{F}\left(t_+^0-1\right)\left(1+\frac{d\ln f_{\pm}}{d\ln c_e}\right)$$

式中，σ^{eff}为有效电导率，σ为电导率，ε_s为固相孔隙率，κ^{eff}为有效化学反应速率，κ为化学反应速率，ε_e为液相孔隙率，D_e^{eff}为有效电解质扩散系数，D_e为电解质扩散系数，κ_D^{eff}为校正化学反应速率，R为摩尔气体常数，T为温度，F为法拉第常数，t_+^0为锂离子转移系数，d为可简化的层间距离，$f_{\pm}$为正负极反应速率，c_e为液相反应物浓度。

8.根据权利要求5所述的锂离子电池内短路故障仿真方法，其特征在于，所述步骤S4具

体为:

S41、将电化学仿真数值局限在电化学-热耦合3D模型的几何结构中内短路点周围的电池P2D局部区域内,并将其作为内短路故障局部模型;

其中,内短路故障局部模型与P2D电化学模型对应,电化学-热耦合3D模型的整体几何结构与3D热模型对应;

S42、将待仿真锂离子电池的动力学和传递参数代入内短路故障局部模型;

S43、在内短路故障局部模型内模拟内短路过程,根据传热学原理,基于电化学反应控制方程描述电池的热平衡,计算内短路故障局部模型的平均产热率;

S44、将计算的平均产热率从P2D电化学模型转换到3D热模型,计算电芯的平均产热功率;

S45、根据计算的平均产热功率,根据Arrhenius公式定量调整3D热模型对应数值模型的参数,并将其反馈至P2D电化学模型中;

S46、重复步骤S42～S45,通过热平衡参数的调整与传递,实现电化学-热耦合过程,进而模拟锂离子电池在不同故障类型条件下的电热行为,实现内短路故障仿真。

一种锂离子电池内短路故障仿真方法

技术领域

[0001] 本发明属于锂离子电池电热仿真技术领域,具体涉及一种锂电池内短路故障仿真方法。

背景技术

[0002] 锂离子电池能量密度高、循环寿命长、无记忆效应,已被广泛用于储能系统、电子产品及各类机电设备。但锂离子电池存在的安全风险也在近年来逐步凸显,随着锂离子电池比能量的逐步提高,隔膜厚度不断降低,电极材料厚度增大,内短路故障逐渐成为锂离子电池安全事故中最常见的诱因。内短路故障广义上是指电池内部隔膜因机械挤压、异物刺穿、高温熔融而受到破坏之后,正负电极材料直接接触,形成电气连接导通放电的现象,是机械滥用、电滥用和热滥用向电池热失控发展的关键环节。在内短路早期阶段如果未能及时发现,内短路通路产生的电阻热将导致电池局部热量随时间大量积聚,放热分解反应在高温下加速,造成单体热失控甚至向相邻单体热蔓延,最终引发起火、爆燃等严重安全事故。因此,内短路故障已经成为锂离子电池储能系统运行事故的主要原因,严重威胁安全生产。

[0003] 目前,学者们深入研究内短路故障的事故致因和触发机理,形成几类数值仿真技术方案,但锂离子电池的内短路故障仿真建模是一个复杂的多因素耦合过程,如何在保证模拟电热特性接近工程实际的前提下,对数值仿真模型中的电化学机理和控制方程进行简化,学术界尚未形成共识。

[0004] 内短路故障的电化学-热耦合仿真模型可以与内短路故障的模拟触发实验交叉验证,弥补部分模拟触发实验无法控制不同内短路故障类型或者无法获得部分监测数据的缺点,但应当认识到,内短路故障是一个复杂的多因素耦合过程,其数值仿真必然在某些机理和控制方程存在简化。Newman,Doyle和Fuller等人建立了电化学-热耦合模型,其基本形态为基于第一性原理所建立的电池准二维模型(pseudo-two-dimensions,P2D),该模型经过多年的实验验证,是学术界目前使用最广泛的内短路简化模型,通过热平衡方程,P2D模型的产热率和各项参数可以转换为3D电-热耦合仿真模型,在其基础上对电池内短路故障的电化学-产热特性进行模拟验证。

[0005] 基于3D电化学-热耦合模型建立的内短路故障模型存在两条技术路线,Zavalis通过钢针作为内短路通路,建立了针刺电化学-热耦合模型,通过合理设置钢针的各项电化学参数,可以对内短路故障工况下锂离子电池局部的电流密度和电解质浓度分布进行模拟,但该模型计算量较大,一般只用于2D模型的简单计算。Zhang和Wang将Zavalis的2D模型拓展至3D,建立了锂离子电池内短路故障的温度场仿真模型,但Zhang和Wang的简化模型中将短路产热视为电阻产热,并将内短路产热归因于锂离子电池经钢钉通道所产生的外部短路焦耳热,假设所有产热均在电池内部发生。

[0006] 基于此,现有的锂离子电池内短路故障仿真存在以下缺点:

[0007] 1)锂离子电池的内短路故障仿真建模是一个复杂的多因素耦合过程,现有故障仿

真建模方法无法在保证模拟电热特性接近工程实际的前提下,对数值仿真模型中的电化学机理和控制方程进行简化,针对工程用大容量锂离子电池的内短路故障仿真求解速度慢、计算误差大。

[0008] 2)现有方法大都聚焦于小容量锂离子电池(0.5-2Ah)的单层极片,并且局限于内短路局部区域,对大容量锂离子电池的模拟准确性低。

[0009] 3)现有锂离子电池的内短路故障仿真建模方法难以获取被测对象的动力学和传递属性,一般采用经验估计的方法,仿真结果偏离工程实际。

发明内容

[0010] 针对现有技术中的上述不足,本发明提供的一种锂离子电池内短路故障仿真方法解决了故障仿真方案在模拟准确性、计算快速性以及应用广泛性上的问题。

[0011] 为了达到上述发明目的,本发明采用的技术方案为:一种锂离子电池内短路故障仿真方法,包括以下步骤:

[0012] S1、建立锂离子电池单颗粒集总参数估计模型,并利用其控制方程估计待仿真锂离子电池的动力学和传递属性参数;

[0013] S2、构建电化学-热耦合3D模型并设置其控制方程;

[0014] S3、将仿真锂离子电池的动力学和传递属性参数代入构建的电化学-热耦合3D模型中,基于其控制方程,模拟锂离子电池在不同故障类型条件下的电热行为,实现内短路故障仿真。

[0015] 进一步地,所述步骤S1中,所述集总参数估计模型的输入参数包括待仿真锂离子电池的电池容量、电压、初始荷电状态以及测得开路电压与SOC,输出参数为1C倍率下的欧姆过电位$\eta_{IR,1C}$、电荷交换电流J_0和扩散时间常数τ;

[0016] 所述集总参数估计模型中的控制方程包括电解液中集总溶液电阻项所表示的欧姆电势降过程方程、单粒子扩散过程所引起的潜在损耗方程、颗粒表面的荷电状态方程以及浓度过电位导致的电压损失方程。

[0017] 进一步地,所述集总参数估计模型中,欧姆电势降过程方程为:

[0018] $$\eta_{IR}=\eta_{IR,1C}\frac{I_{cell}}{I_{1C}}$$

[0019] $$\eta_{act}=\frac{2RT}{F}asinh\left(\frac{I_{cell}}{2J_0I_{1C}}\right)$$

[0020] 式中,η_{IR}为欧姆过电位,$\eta_{IR,1C}$为1C倍率对应的欧姆过电位,I_{cell}为外加电流,$I_{1C}=\frac{Q_{cell,0}}{3600s}$,$Q_{cell,0}$为电池容量,s为时间单位秒;$\eta_{act}$为正负电极上的电荷转移过程所造成的集总电压损失,R为摩尔气体常数,F为法拉第常数,T为温度,asinh(•)为反双曲线正弦函数,J_0为无量纲的电荷交换电流;

[0021] 单粒子扩散过程所引起的潜在损耗方程为:

[0022] $$\tau\frac{\partial SOC}{\partial t}=-\nabla\cdot(-\nabla SOC)$$

[0023] 式中,τ为扩散时间常数,SOC为荷电状态,t为时间,∇为散度;

[0024] 颗粒表面的荷电状态方程为:

[0025] $$SOC_{average}=\frac{\int SOC4\Pi X^2dX}{\int_0^1 4\Pi X^2dX}=3\int_0^1 SOCX^2dX$$

[0026] 式中,$SOC_{average}$为平均荷电状态,Π为π,X为颗粒半径;

[0027] 浓度过电位导致的电压损失方程为:

[0028] $$\eta_{conc}=E_{OCV}(SOC_{surface})-E_{OCV}(SOC_{average})$$

[0029] 式中,η_{conc}为浓度过电位导致的电压损失,$E_{OCV}(\bullet)$为开路电压,$SOC_{surface}$为X=1处颗粒表面的荷电状态。

[0030] 进一步地,所述步骤S2中,所述电化学-热耦合3D模型的几何结构包括长方体极芯、铝制外壳和极耳,且不考虑方形卷绕式极芯的边缘曲率对电化学反应的影响;

[0031] 所述电化学-热耦合3D模型的采用局部的P2D电化学模型和整体的3D热模型相耦合的方式,模拟不同故障类型条件下的电热行为。

[0032] 进一步地,所述步骤S3中,所述电化学-热耦合3D模型的控制方程包括P2D电化学模型到3D热模型平均产热功率转化方程,以及锂离子电池单体的电化学反应控制方程;

[0033] 其中,锂离子电池单体的电化学反应控制方程包括电势控制方程、电解液电势控制方程、极芯中的电荷传输过程方程、电解液中的液相锂离子平衡控制方程、热平衡方程、电化学反应速率方程、内短路电流方程、内短路反应方程以及参数有效性校正方程。

[0034] 进一步地,所述P2D电化学模型到3D热模型平均产热功率转化方程为:

[0035] $$Q_{3D}=Q_{P2D}\frac{L_{CC}^{+}+L_{CC}^{-}}{L^{+}+L^{-}+L^{SEI}}\frac{r_{P2D}^2-r_{nail}^2}{r_{P2D}^2}$$

[0036] $$\rho_p=\frac{\sum L_i\rho_i}{\sum L_i},C_p=\frac{\sum L_iC_{p,i}}{\sum L_i},k_p=\frac{\sum L_i}{\sum L_i/k_{T,i}}$$

[0037] 式中,Q_{3D}、Q_{P2D}分别为3D热模型和P2D电化学模型的产热功率,L_{CC}^{+}为正极的集流体极片厚度,L_{CC}^{-}为负极的集流体极片厚度,L^{+}为正极的极片厚度,L^{-}为负极的极片厚度,L^{SEI}为SEI膜的极片厚度,r_{P2D}为P2D电化学模型半径,r_{nail}为金属丝半径,ρ_p为P2D电化学模型密度,L_i为3D热模型第i层厚度,ρ_i为3D热模型第i层密度,C_p为3D热模型第i层比热容,$C_{p,i}$为P2D电化学模型第i层比热容,k_p为3D热模型热导率,$k_{T,i}$为P2D电化学模型第i层热导率。

[0038] 进一步地,所述电势控制方程为:

[0039] $$\nabla\cdot\left(\sigma^{eff}\nabla\phi_s\right)=j^{Li}$$

[0040] 式中,∇为散度,σ^{eff}为有效电导率,φ_s为固相电势,j^{Li}为锂电池反应电流损耗;

[0041] 电解液电势控制方程为:

[0042] $$\nabla\cdot\left(\kappa\nabla\phi_e\right)+\nabla\cdot\left(\kappa_D\nabla\ln c_e\right)=-j^{Li}$$

[0043] 式中,∇为散度,κ为化学反应速率,φ_e为液相电势,κ_D为液相化学反应速率,c_e为液相反应物浓度,j^{Li}为锂电池反应电流损耗;

[0044] 极芯中的电荷传输过程方程:

[0045] $$\frac{\partial c_S}{\partial t}=\frac{D_S}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial c_S}{\partial r}\right)$$

[0046] 式中，c_S为固相反应物浓度，r为极芯半径，D_S为多孔电极中锂离子的扩散系数，t为多孔电极的径向坐标；

[0047] 电解液中的液相锂离子平衡控制方程为：

[0048] $$\frac{\partial(\varepsilon_e c_e)}{\partial t}=\nabla\cdot(D_e\nabla c_e)+\frac{1-t_+^0 j^{Li}}{F}$$

[0049] 式中，ε_e为液相孔隙率，t为多孔电极的径向坐标，c_e为液相反应物浓度，∇为散度，D_e为电解质扩散系数，t_+^0为锂离子转移系数，j^{Li}为锂电池反应电流损耗，F为法拉第常数；

[0050] 热平衡方程为：

[0051] $$\frac{\partial(\rho c_p T)}{\mathrm{d}t}=\nabla\cdot(k\nabla T)+Q_{P2D}$$

[0052] $Q_{P2D}=Q_{rev}+Q_{pol}+Q_{TR}+Q_{ISC}$

[0053] 式中，ρ为密度，c_p为均质比热容，T为温度，t为时间，∇为散度，k为热导率，Q_{P2D}为P2D电化学模型的产热功率，Q_{rev}为P2D电化学模型的可逆反应产热功率，Q_{pol}为P2D电化学模型的极化产热功率，Q_{TR}为P2D电化学模型的热失控产热功率，Q_{ISC}为P2D电化学模型的内短路产热功率；

[0054] 电化学反应速率方程为：

[0055] $$j^{Li}=a_s i_o\left[\exp\left(\frac{\alpha_a F}{RT}\eta\right)-\exp\left(-\frac{\alpha_c F}{RT}\eta\right)\right]$$

[0056] $$\eta=\phi_s-\phi_e-U-\frac{R_{SEI}}{a_s}j^{Li}$$

[0057] 式中，j^{Li}为锂电池反应电流损耗，a_s为颗粒每单位体积的活性表面积，α_a和α_c均为电极反应的传递系数，i_0为电极交换电流面密度，η为电极反应的过电位，R为摩尔气体常数，F为法拉第常数，T为温度，φ_s为固相电势，φ_e为液相电势，U为电位，R_{SEI}为SEI膜单位面积电阻；

[0058] 内短路电流方程为：

[0059] $I_{ISC}=-\Delta\Phi_S/R_{ISC}=\int i_S dA=N\cdot A\cdot i_S$

[0060] 式中，I_{ISC}内短路电流，$\Delta\Phi_S$为内短路通路截面积对应的固体电势梯度，R_{ISC}为内短路通路等效电阻，i_S为SEI膜单位面积电阻，A为极芯面积，N为卷绕式极片的叠片层数；

[0061] 内短路反应方程为：

[0062] $\Delta H_{TR}=M\cdot C_{P1}\cdot\Delta T$

[0063] 式中，ΔH_{TR}为热失控焓，M为极芯的质量，C_{P1}为极芯视为均值的比热容，ΔT为单体最高温度与热失控起始温度之间的温差；

[0064] 参数有效性校正方程为：

[0065] $\sigma^{eff}=\sigma\varepsilon_s$，$\kappa^{eff}=\kappa\varepsilon_e$

[0066] $$D_e^{eff}=D_e\varepsilon_e$$

[0067] $$\kappa_{\mathrm{D}}^{\mathrm{eff}}=\frac{2RT\kappa^{\mathrm{eff}}}{F}\left(t_{+}^{0}-1\right)\left(1+\frac{d\ln f_{\pm}}{d\ln c_{\mathrm{e}}}\right)$$

[0068] 式中,σ^{eff}为有效电导率,σ为电导率,ε_{s}为固相孔隙率,κ^{eff}为有效化学反应速率,κ为化学反应速率,ε_{e}为液相孔隙率,$D_{\mathrm{e}}^{\mathrm{eff}}$为有效电解质扩散系数,$D_{\mathrm{e}}$为电解质扩散系数,$\kappa_{\mathrm{D}}^{\mathrm{eff}}$为校正化学反应速率,R为摩尔气体常数,T为温度,F为法拉第常数,t_{+}^{0}为锂离子转移系数,d为可简化的层间距离,$f_{\pm}$为正负极反应速率,c_{e}为液相反应物浓度。

[0069] 进一步地,所述步骤S4具体为:

[0070] S41、将电化学仿真数值局限在电化学-热耦合3D模型的几何结构中内短路点周围的电池P2D局部区域内,并将其作为内短路故障局部模型;

[0071] 其中,内短路故障局部模型与P2D电化学模型对应,电化学-热耦合3D模型的整体几何结构与3D热模型对应;

[0072] S42、将待仿真锂离子电池的动力学和传递参数代入内短路故障局部模型;

[0073] S43、在内短路故障局部模型内模拟内短路过程,根据传热学原理,基于电化学反应控制方程描述电池的热平衡,计算内短路故障局部模型的平均产热率;

[0074] S44、将计算的平均产热率从P2D电化学模型转换到3D热模型,计算电芯的平均产热功率;

[0075] S45、根据计算的平均产热功率,根据Arrhenius公式定量调整3D热模型对应数值模型的参数,并将其反馈至P2D电化学模型中;

[0076] S46、重复步骤S42～S45,通过热平衡参数的调整与传递,实现电化学-热耦合过程,进而模拟锂离子电池在不同故障类型条件下的电热行为,实现内短路故障仿真。

[0077] 本发明的有益效果为:

[0078] (1)本发明基于电池单体的充放电循环监测数据进行参数估计,所获取的模型参数满足工程应用需求,兼顾了较高的模拟准确性和较低的计算复杂性。能够利用有限的监测数据来求解锂离子电池动力学和传递属性,以设置复杂数值仿真模型中电池的初始条件,具有更好的仿真应用效果。

[0079] (2)本发明中通过集总参数估计模型获取锂离子电池动力学和传递属性参数的方法,相比于传统方法根据经验或生产商所提供的说明书获得模型参数,减少建模难度但是增大了模型误差,本发明基于电池单体的充放电循环监测数据进行参数估计,所获取的模型参数满足工程应用需求,兼顾了较高的模拟准确性和较低的计算复杂性。

[0080] (3)本发明合理简化模型几何结构,构建多尺度的电化学-热耦合模型采用构建电化学-热耦合3D模型,采用局部电化学模型和整体热模型相耦合的方式,模拟不同故障类型和串并联形式下故障电池的电热行为。相比传统全尺寸电化学-热耦合模型,本发明在保证模拟准确性的前提下大大降低了建模及仿真难度,解决了传统方法计算量大,建模困难,难以应用于实际内短路故障建模的缺点。

附图说明

[0081] 图1为本发明提供的锂离子电池内短路故障仿真方法流程图。

[0082] 图2为本发明提供的电化学-热耦合3D模型示意图。

[0083] 图3为本发明提供的电化学-热耦合3D模型耦合方式示意图。

具体实施方式

[0084] 下面对本发明的具体实施方式进行描述,以便于本技术领域的技术人员理解本发明,但应该清楚,本发明不限于具体实施方式的范围,对本技术领域的普通技术人员来讲,只要各种变化在所附的权利要求限定和确定的本发明的精神和范围内,这些变化是显而易见的,一切利用本发明构思的发明创造均在保护之列。

[0085] 在描述本发明的具体实施例之前,为使本发明的方案更加清楚完整,首先对本发明中出现的缩略语和关键术语定义进行说明:

[0086] 锂离子电池:锂离子电池是一种二次电池(充电电池),它主要依靠锂离子在正极和负极之间移动来工作。在充放电过程中,Li^+在两个电极之间往返嵌入和脱嵌:充电时,Li^+从正极脱嵌,经过电解质嵌入负极,负极处于富锂状态;放电时则相反。

[0087] 内短路故障:内短路故障是指电池内部隔膜因机械挤压、异物刺穿、高温熔融而受到破坏之后,正负电极材料直接接触,形成电气连接导通放电的现象。

[0088] 电化学-热耦合3D模型:一种锂离子电池电化学-热耦合模型,该模型能够模拟锂离子电池在内短路故障工况下的电池电热行为,提取内短路故障演变过程中电池的电热特性与故障特征。

[0089] 在本发明实施例中,为了充分了解内短路故障演变过程中电池的电热特征与故障特征,为开展锂离子电视内短路故障的实验方案设计与故障检测打下稳固的研究基础,有必要建立锂离子电池储能系统电-热耦合仿真模型,对铝-铜短路、铜-正极短路-正极-负极短路以及铝-负极短路等不同内短路故障类型进行模拟,并通过电解质浓度分布、锂离子电池内部温度场分布描述内短路故障演变过程中电池的内短路发展演变过程。

[0090] 本发明实施例构建了一个锂离子电池单颗粒集总参数估计模型和多尺度绕卷式锂离子电池电化学-热耦合模型,前者用于估计锂离子电池的动力学和传递属性,后者用于模拟四种类型的内短路故障条件下,多层卷绕式电池的电热行为。

[0091] 基于此,本发明实施例提供了一种锂离子电池内短路故障仿真方法,如图1所示,包括以下步骤:

[0092] S1、建立锂离子电池单颗粒集总参数估计模型,并利用其控制方程估计待仿真锂离子电池的动力学和传递属性参数;

[0093] S2、构建并设置其控制方程;

[0094] S3、将仿真锂离子电池的动力学和传递属性参数代入构建的电化学-热耦合3D模型中,基于其控制方程,模拟锂离子电池在不同故障类型条件下的电热行为,实现内短路故障仿真。

[0095] 在本发明实施例中,锂离子电池储能系统可以看作是一个“黑箱”,其内部参数无法精确获得。例如:电池容量随时间的衰减特性,不同SOC下的电池开路电压,不同电流下的欧姆过电位,电极表面的活化过电位,粒子扩散时间常数等。部分参数可以根据经验或生产商所提供的说明书获得,而另一些参数,如动力学和传递属性则与电池单体的性能密切相关,无法直接获得。

[0096] 为了利用有限的监测数据来求解锂离子电池的基本参数、设置复杂数值仿真模型

中电池的初始条件,本发明实施例的步骤S1中,建立了一个锂离子电池单颗粒集总参数估计模型,其输入参数包括待仿真锂离子电池的电池容量、电压、初始荷电状态以及测得开路电压与SOC,输出参数为1C倍率下的欧姆过电位$\eta_{IR,1C}$、电荷交换电流J_0和扩散时间常数τ;该模型假设电池由一个电极中的扩散过程控制,忽略电解质中的浓度梯度和局部电位,将电解质中的电阻项取集总形式以进行模型简化,模型的参数及输入输出值如表1所示;

[0097] 表1:集总参数估计模型输入输出参数

[0098]

参数		单位	备注	值
输入	$Q_{cell,0}$	A·h	电池容量	120
	SOC_0	1	初始荷电状态	0.8
输出	$\eta_{IR,1C}$	mV	1C 倍率下的欧姆过电位	4.65
	J_0	1	电荷交换电流（无量纲）	1.22
	τ	s	扩散时间常数	1410

[0099] 在本发明实施例中,集总参数估计模型中的控制方程包括电解液中集总溶液电阻项所表示的欧姆电势降过程方程、单粒子扩散过程所引起的潜在损耗方程、颗粒表面的荷电状态方程以及浓度过电位导致的电压损失方程。

[0100] 具体地,电解液中集总溶液电阻项所表示的欧姆电势降过程方程为:

[0101] $$\eta_{IR}=\eta_{IR,1C}\frac{I_{cell}}{I_{1C}}$$

[0102] $$\eta_{act}=\frac{2RT}{F}asinh\left(\frac{I_{cell}}{2J_0I_{1C}}\right)$$

[0103] 式中,η_{IR}为欧姆过电位,$\eta_{IR,1C}$为1C倍率对应的欧姆过电位,I_{cell}为外加电流,$I_{1C}=\frac{Q_{cell,0}}{3600s}$,$Q_{cell,0}$为电池容量,s为时间单位秒;$\eta_{act}$为正负电极上的电荷转移过程所造成的集总电压损失,R为摩尔气体常数,F为法拉第常数,T为温度,asinh(•)为反双曲线正弦函数,J_0为无量纲的电荷交换电流;

[0104] 基于菲克扩散理论在一个额外的维度中单独求解单粒子扩散过程所引起的潜在损耗,该维度中粒子长度为1,使用球对称形式,得到潜在损耗方程为:

[0105] $$\tau\frac{\partial SOC}{\partial t}=-\nabla\cdot(-\nabla SOC)$$

[0106] 式中,τ为扩散时间常数,SOC为荷电状态,t为时间,∇为散度;

[0107] 上式为控制电机反应的平均粒子,粒子的表面和中心分别对应于X=1和X=0,对应边界条件:

[0108] $$\nabla SOC=0\big|_{X=0},\nabla SOC=\frac{\tau I_{cell}}{N_{shape}Q_{cell,0}}\bigg|_{X=1}$$

[0109] 式中,$N_{shape}=3$(球形颗粒),SOC_0为电池初始荷电状态,$SOC_{surface}$为X=1处颗粒表面的荷电状态;

[0110] 在球坐标系中对颗粒进行积分得到颗粒表面的荷电状态方程为:

[0111] $$SOC_{average}=\frac{\int SOC4\Pi X^2dX}{\int_0^1 4\Pi X^2dX}=3\int_0^1 SOCX^2dX$$

[0112] 式中,$SOC_{average}$为平均荷电状态,Π为π,X为颗粒半径;

[0113] 浓度过电位导致的电压损失方程为:

[0114] $\eta_{conc}=E_{OCV}(SOC_{surface})-E_{OCV}(SOC_{average})$

[0115] 式中,η_{conc}为浓度过电位导致的电压损失,$E_{OCV}(\bullet)$为开路电压,$SOC_{surface}$为X=1处颗粒表面的荷电状态。

[0116] 在本发明实施例中,综合上述因素后,通过对电池电压进行估计,以验证上述估计的动力学和传递属性参数的准确性;其中,对电池电压E_{cell}进行估计的公式为:

[0117] $E_{cell}=E_{OCV}(SOC_{average})+\eta_{IR}+\eta_{act}+\eta_{conc}$

[0118] 在本发明实施例基于集总参数估计模型获取的锂离子电池动力学和传递属性参数构建电化学-热耦合3D模型,该模型模拟的是长方形包卷绕式锂离子电池,锂离子电池的极片卷绕层叠于芯轴,单层极片的厚度一般为数十微米,长、宽为数十厘米,使用全尺寸的锂离子电池模型模拟内短路电热过程计算量很大,因此本发明合理简化模型几何结构,构建多尺度的电化学-热耦合模型。

[0119] 基于此,本发明实施例步骤S2中提供的电化学-热耦合3D模型的几何结构包括长方体极芯(如图2(a)所示,极芯x方向长155mm,y方向宽125mm,Z方向单层厚度为180μm并在Z轴放大100倍)、铝制外壳和极耳,且不考虑方形卷绕式极芯的边缘曲率对电化学反应的影响;如图2(c)所示为锂离子电池模组串并联的示意图,图中所示为#1、2并联后与#3、4、5串联,实验中按此形式将电池以1P3S串联形成电池模组,各单体顺序编号为串联#1、2、3;以2P2S先并后串形式形成电池模组,各单体顺序编号为并联#1、2、3、4。图1的叉形和菱形分别表示温度探针和电压探针位置,进行温度和电压的监测。

[0120] 在本发明实施例周总,上述电化学-热耦合3D模型的几何结构的电芯单体三维(three-dimensions,3D)模型如图2(d)所示,极芯由多层极片堆叠、采用一层无厚度壁面分隔并卷绕芯轴三整圈而形成,各层极片厚度与所设材料为:

[0121] 1)正极集流体:$L_{CC}^{+}=25\mu m$,Aluminum;

[0122] 2)阴极多孔电极:$L^{+}=45\mu m$,$LiFePO_4$;

[0123] 3)隔膜:$L^{SEI}=40\mu m$,PE;

[0124] 4)阳极多孔电极:$L^{-}=50\mu m$,$LixC_6$ MCMB;

[0125] 5)负极集流体:$L_{CC}^{-}=20\mu m$,Copper;

[0126] 6)铝外壳及极芯间隙以电解液填充:$LiPF_6$,3:7:3EC:DMC:EMC。

[0127] 在本发明实施例中,所述电化学-热耦合3D模型的采用局部的P2D电化学模型和整体的3D热模型相耦合的方式,模拟不同故障类型条件下的电热行为。

[0128] 具体地,为了简化计算,如图2(b)所示,将内短路故障的电化学数值仿真局限在内短路点周围半径为25mm圆柱形的电池P2D局部区域,并采用热平衡方程将3D热模型与电化学P2D模型耦合。如图2(b)框内的单层内短路局部模型所示,利用穿透隔膜,连接各层的可变电阻金属丝,模拟四种类型的内短路故障,采用阶跃函数设置通断时间以模拟软/硬短路,当t=0时,将导线的电导率设为一个很低的值(等效绝缘),在t=1s时通过平滑阶跃函

数使其上升到最大电导率(等效短路),一直持续到短路温度稳定(t＝30s),铝-负极以及铝-铜内短路中可变电阻金属丝通/断阻值为4.5/5kΩ,铜-正极及正极-负极内短路中金属丝通/断阻值为100/5kΩ。

[0129] 在本发明实施例中内短路故障局部模型的尺寸和计算网格图如2(b)、(d)所示,对短路点以及金属丝附近的网格进行细化,以保证大变量梯度下仿真模型的计算收敛性。

[0130] 在本发明实施例的步骤S3中,所述电化学-热耦合3D模型的控制方程包括P2D电化学模型到3D热模型平均产热功率转化方程,以及锂离子电池单体的电化学反应控制方程;

[0131] 其中,锂离子电池单体的电化学反应控制方程包括电势控制方程、电解液电势控制方程、极芯中的电荷传输过程方程、电解液中的液相锂离子平衡控制方程、热平衡方程、电化学反应速率方程、内短路电流方程、内短路反应方程以及参数有效性校正方程。

[0132] 具体地,所述P2D电化学模型到3D热模型平均产热功率转化方程为:

[0133] $$Q_{3D}=Q_{P2D}\frac{L_{CC}^{+}+L_{CC}^{-}}{L^{+}+L^{-}+L^{SEI}}\frac{r_{P2D}^{2}-r_{nail}^{2}}{r_{P2D}^{2}}$$

[0134] $$\rho_{p}=\frac{\sum L_i\rho_i}{\sum L_i},C_{p}=\frac{\sum L_iC_{p,i}}{\sum L_i},k_{p}=\frac{\sum L_i}{\sum L_i/k_{T,i}}$$

[0135] 式中,Q_{3D}、Q_{P2D}分别为3D热模型和P2D电化学模型的产热功率,L_{CC}^{+}为正极的集流体极片厚度,L_{CC}^{-}为负极的集流体极片厚度,L^{+}为正极的极片厚度,L^{-}为负极的极片厚度,L^{SEI}为SEI膜的极片厚度,r_{P2D}为P2D电化学模型半径,r_{nail}为金属丝半径,ρ_p为P2D电化学模型密度,L_i为3D热模型第i层厚度,ρ_i为3D热模型第i层密度,C_p为3D热模型第i层比热容,$C_{p,i}$为P2D电化学模型第i层比热容,k_p为3D热模型热导率,$k_{T,i}$为P2D电化学模型第i层热导率。

[0136] 锂离子电池单体的电化学反应控制方程如下:

[0137] 通过欧姆定律描述电势控制方程为:

[0138] $$\nabla\cdot\left(\sigma^{eff}\nabla\phi_s\right)=j^{Li}$$

[0139] 式中,∇为散度,σ^{eff}为有效电导率,φ_s为固相电势,j^{Li}为锂电池反应电流损耗;

[0140] 电解液电势控制方程为:

[0141] $$\nabla\cdot\left(\kappa\nabla\phi_e\right)+\nabla\cdot\left(\kappa_D\nabla\ln c_e\right)=-j^{Li}$$

[0142] 式中,∇为散度,κ为化学反应速率,φ_e为液相电势,κ_D为液相化学反应速率,c_e为液相反应物浓度,j^{Li}为锂电池反应电流损耗;

[0143] 极芯中的电荷传输过程方程:

[0144] $$\frac{\partial c_S}{\partial t}=\frac{D_S}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial c_S}{\partial r}\right)$$

[0145] 式中,c_S为固相反应物浓度,r为极芯半径,D_S为多孔电极中锂离子的扩散系数,t为多孔电极的径向坐标;

[0146] 电解液中的液相锂离子平衡控制方程为:

[0147] $$\frac{\partial\left(\varepsilon_e c_e\right)}{\partial t}=\nabla\cdot\left(D_e\nabla c_e\right)+\frac{1-t_+^0}{F}j^{Li}$$

[0148] 式中,ε_e为液相孔隙率,t为多孔电极的径向坐标,c_e为液相反应物浓度,∇为散度,

D_e为电解质扩散系数，t_+^0为锂离子转移系数，j^{Li}为锂电池反应电流损耗，F为法拉第常数；

[0149] 热平衡方程为：

[0150] $$\frac{\partial\left(\rho c_p T\right)}{\mathrm{d}t}=\nabla\cdot(k\nabla T)+Q_{\mathrm{P2D}}$$

[0151] $Q_{P2D}=Q_{rev}+Q_{pol}+Q_{TR}+Q_{ISC}$

[0152] $$Q_{\mathrm{rev}}=j^{\mathrm{Li}}\left(T\frac{\partial U}{\partial T}\right)$$

[0153] $Q_{pol}=j^{Li}(\varphi_s-\varphi_e-U)$

[0154] $$Q_{\mathrm{TR}}=\Delta H_{\mathrm{TR}}\frac{dc_t}{dt}\frac{1}{V_{\mathrm{bat}}}(t\geq T_{\mathrm{TR}})$$

[0155] $$Q_j=\sigma(\nabla\phi_s)^2+\kappa(\nabla\phi_e)^2+\kappa_D\nabla\ln c_e\nabla\phi_e$$

[0156] $$Q_{\mathrm{ISC}}=I_{\mathrm{ISC}}^2R_{\mathrm{ISC}}$$

[0157] $$I_{\mathrm{ISC}}=\iiint_{\mathrm{a.or.c}}j^{\mathrm{Li}}\mathrm{d}v(\mathrm{NPpoint})$$

[0158] 式中，ρ为密度，c_p为均质比热容，T为温度，t为时间，∇为散度，k为热导率，Q_{P2D}为P2D电化学模型的产热功率，Q_{rev}为P2D电化学模型的可逆反应产热功率，Q_{pol}为P2D电化学模型的极化产热功率，Q_{TR}为P2D电化学模型的热失控产热功率，Q_{ISC}为P2D电化学模型的内短路产热功率；

[0159] 采用Bultler-Volmer方程量化电极/电解液交界面的电化学反应速率，电化学反应速率方程为：

[0160] $$j^{\mathrm{Li}}=a_s i_o\left[\exp\left(\frac{\alpha_a F}{RT}\eta\right)-\exp\left(-\frac{\alpha_c F}{RT}\eta\right)\right]$$

[0161] $$\eta=\phi_s-\phi_e-U-\frac{R_{\mathrm{SEI}}}{a_s}j^{\mathrm{Li}}$$

[0162] 式中，j^{Li}为锂电池反应电流损耗，a_s为颗粒每单位体积的活性表面积，α_a和α_c均为电极反应的传递系数，i_0为电极交换电流面密度，η为电极反应的过电位，R为摩尔气体常数，F为法拉第常数，T为温度，φ_s为固相电势，φ_e为液相电势，U为电位，R_{SEI}为SEI膜单位面积电阻；

[0163] 假设内短路为瞬时离散的电化学过程，在内短路发生后时，电池单体内存在一条连续的内短路通路，采用欧姆定律描述内短路电流方程为：

[0164] $I_{ISC}=-\Delta\Phi_S/R_{ISC}=\int i_S dA=N\cdot A\cdot i_S$

[0165] 式中，I_{ISC}内短路电流，$\Delta\Phi_S$为内短路通路截面积对应的固体电势梯度，R_{ISC}为内短路通路等效电阻，i_S为SEI膜单位面积电阻，A为极芯面积，N为卷绕式极片的叠片层数；

[0166] 根据绝热热失控实验描述的内短路反应过程，计算得到热失控的对应焓，其中，内短路反应方程为：

[0167] $\Delta H_{TR}=M\cdot C_{P1}\cdot\Delta T$

[0168] 式中，ΔH_{TR}为热失控焓，M为极芯的质量，C_{P1}为极芯视为均值的比热容，ΔT为单体

最高温度与热失控起始温度之间的温差；

[0169] 综上，电化学反应控制方程计算得到的3D热模型平均产热功率和平均电位为：

[0170] $$\overline{T}(t)=\frac{1}{A_{\text{cell}}}\iint_{\Omega_{\text{cell}}}T\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

[0171] $$\overline{T}(t)=\frac{1}{A_{\text{cell}}}\iint_{\Omega_{\text{cell}}}T\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

[0172] 上述各参数有效性校正方程为：

[0173] $\sigma^{\text{eff}}=\sigma\varepsilon_s$，$\kappa^{\text{eff}}=\kappa\varepsilon_e$

[0174] $$D_e^{\text{eff}}=D_e\varepsilon_e$$

[0175] $$\kappa_D^{\text{eff}}=\frac{2RT\kappa^{\text{eff}}}{F}\left(t_+^0-1\right)\left(1+\frac{d\ln f_\pm}{d\ln c_e}\right)$$

[0176] 式中，σ^{eff}为有效电导率，σ为电导率，ε_s为固相孔隙率，κ^{eff}为有效化学反应速率，κ为化学反应速率，ε_e为液相孔隙率，D_e^{eff}为有效电解质扩散系数，D_e为电解质扩散系数，κ_D^{eff}为校正化学反应速率，R为摩尔气体常数，T为温度，F为法拉第常数，t_+^0为锂离子转移系数，d为可简化的层间距离，$f_\pm$为正负极反应速率，c_e为液相反应物浓度。

[0177] 其中电极和电解质的有效导电率由$\sigma^{\text{eff}}=\sigma\varepsilon_s$，$\kappa^{\text{eff}}=\kappa\varepsilon_e$描述，电解质的有效扩散系数由$D_e^{\text{eff}}=D_e\varepsilon_e$描述，有效扩散电导率由$\kappa_D^{\text{eff}}=\frac{2RT\kappa^{\text{eff}}}{F}\left(t_+^0-1\right)\left(1+\frac{d\ln f_\pm}{d\ln c_e}\right)$描述。

[0178] 模型的散热通过空气热对流完成，其对流换热系数按自然对流冷却条件设为5W·m^{-2}·K^{-1}，利用牛顿冷却定律描述锂离子电池单体与空气的热模型边界条件，

[0179] $$-\lambda\left(\frac{\partial T}{\partial n}\right)=h\left(T_s-T_\infty\right)$$

[0180] 式中，T_{amb}为环境温度，T_∞为电池表面温度；λ为锂离子电池外壳导热系数，n代表电池表面的法向。

[0181] 以上控制方程描述了锂离子电池内短路故障电-热耦合模型的关键电化学过程，图3基于上述控制方程的电化学-热耦合模型的耦合方式，基于此，本发明实施例的步骤S4具体为：

[0182] S41、将电化学仿真数值局限在电化学-热耦合3D模型的几何结构中内短路点周围的电池P2D局部区域内，并将其作为内短路故障局部模型；

[0183] 其中，内短路故障局部模型与P2D电化学模型对应，电化学-热耦合3D模型的整体几何结构与3D热模型对应；

[0184] S42、将待仿真锂离子电池的动力学和传递参数代入内短路故障局部模型；

[0185] S43、在内短路故障局部模型内模拟内短路过程，根据传热学原理，基于电化学反应控制方程描述电池的热平衡，计算内短路故障局部模型的平均产热率；

[0186] S44、将计算的平均产热率从P2D电化学模型转换到3D热模型，计算电芯的平均产热功率；

[0187] S45、根据计算的平均产热功率，根据Arrhenius公式定量调整3D热模型对应数值

模型的参数,并将其反馈至P2D电化学模型中;

[0188] S46、重复步骤S42～S45,通过热平衡参数的调整与传递,实现电化学-热耦合过程,进而模拟锂离子电池在不同故障类型条件下的电热行为,实现内短路故障仿真。

[0189] 其中,数值模型的热平衡参数包括密度、比热容和热导率,考虑电池单体中集流体、极芯和外壳的热传导与热损失;

[0190] 在本实施例中,基于图3所示的耦合方式,按照$Q_{3D}=Q_{P2D}\frac{L_{CC}^{+}+L_{CC}^{-}}{L^{+}+L^{-}+L^{SEI}}\frac{r_{P2D}^{2}-r_{nail}^{2}}{r_{P2D}^{2}}$将计算的产热率从P2D模型转换到3D模型,根据式$\rho_{p}=\frac{\sum L_i\rho_i}{\sum L_i},C_{p}=\frac{\sum L_iC_{p,i}}{\sum L_i},k_{p}=\frac{\sum L_i}{\sum L_i/k_{T,i}}$调整数值模型的密度、比热容和热导率,以充分考虑电芯单体中集流体、极芯和外壳的热传导与热损失,计算热传导时将极芯视为均质。

[0191] 本发明中应用了具体实施例对本发明的原理及实施方式进行了阐述,以上实施例的说明只是用于帮助理解本发明的方法及其核心思想;同时,对于本领域的一般技术人员,依据本发明的思想,在具体实施方式及应用范围上均会有改变之处,综上所述,本说明书内容不应理解为对本发明的限制。

[0192] 本领域的普通技术人员将会意识到,这里所述的实施例是为了帮助读者理解本发明的原理,应被理解为本发明的保护范围并不局限于这样的特别陈述和实施例。本领域的普通技术人员可以根据本发明公开的这些技术启示做出各种不脱离本发明实质的其它各种具体变形和组合,这些变形和组合仍然在本发明的保护范围内。

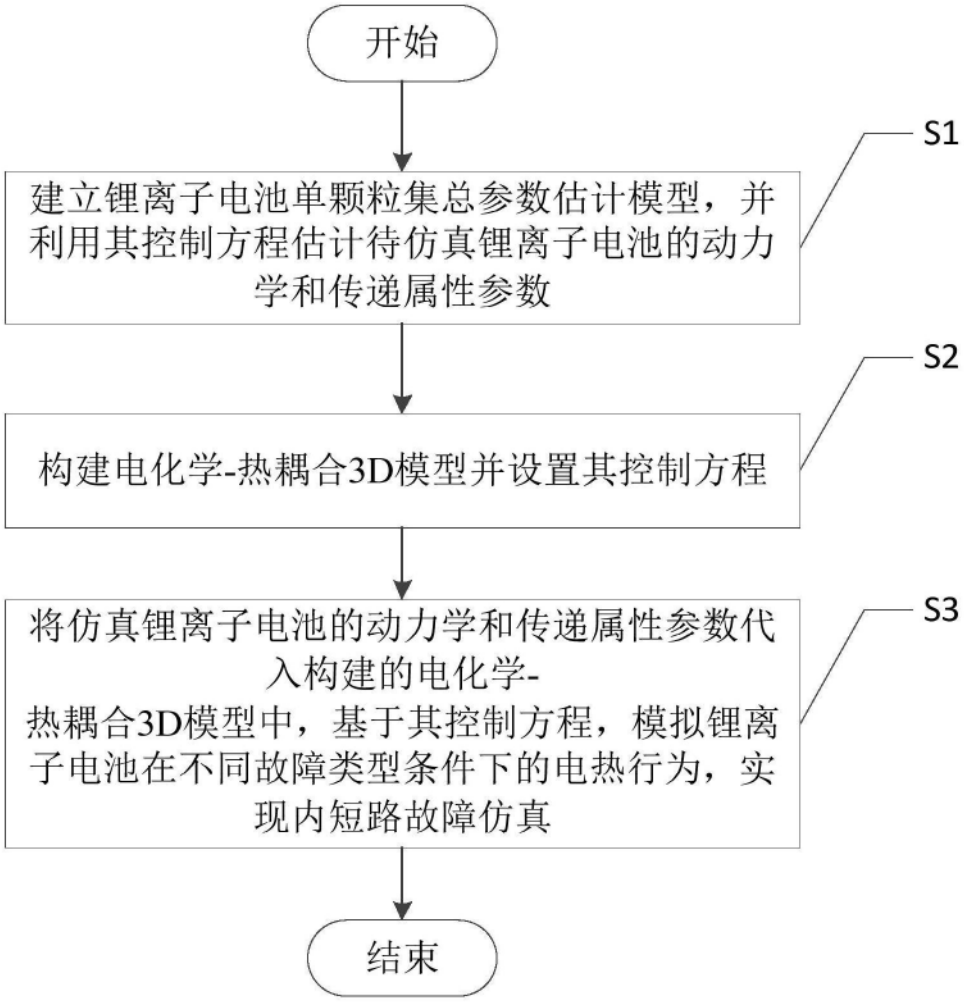

开始
S1
建立锂离子电池单颗粒集总参数估计模型，并利用其控制方程估计待仿真锂离子电池的动力学和传递属性参数
S2
构建电化学-热耦合3D模型并设置其控制方程
S3
将仿真锂离子电池的动力学和传递属性参数代入构建的电化学-热耦合3D模型中，基于其控制方程，模拟锂离子电池在不同故障类型条件下的电热行为，实现内短路故障仿真
结束

图1

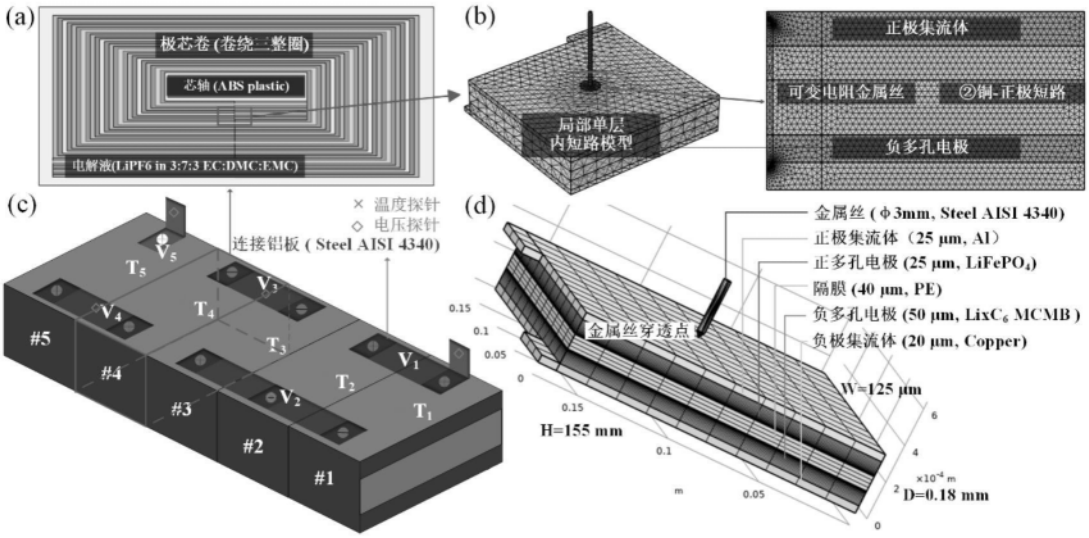

(a)
极芯卷 (卷绕二整圈)
芯轴 (ABS plastic)
电解液(LiPF6 in 3:7:3 EC:DMC:EMC)
(b)
局部单层内短路模型
正极集流体
可变电阻金属丝
②铜-正极短路
负多孔电极
(c)
× 温度探针
◇ 电压探针
连接铝板 (Steel AISI 4340)
(d)
金属丝 (ϕ3mm, Steel AISI 4340)
正极集流体 (25 μm, Al)
正多孔电极 (25 μm, LiFePO4)
隔膜 (40 μm, PE)
负多孔电极 (50 μm, LixC6 MCMB)
负极集流体 (20 μm, Copper)
金属丝穿透点
W=125 μm
H=155 mm
D=0.18 mm

图2

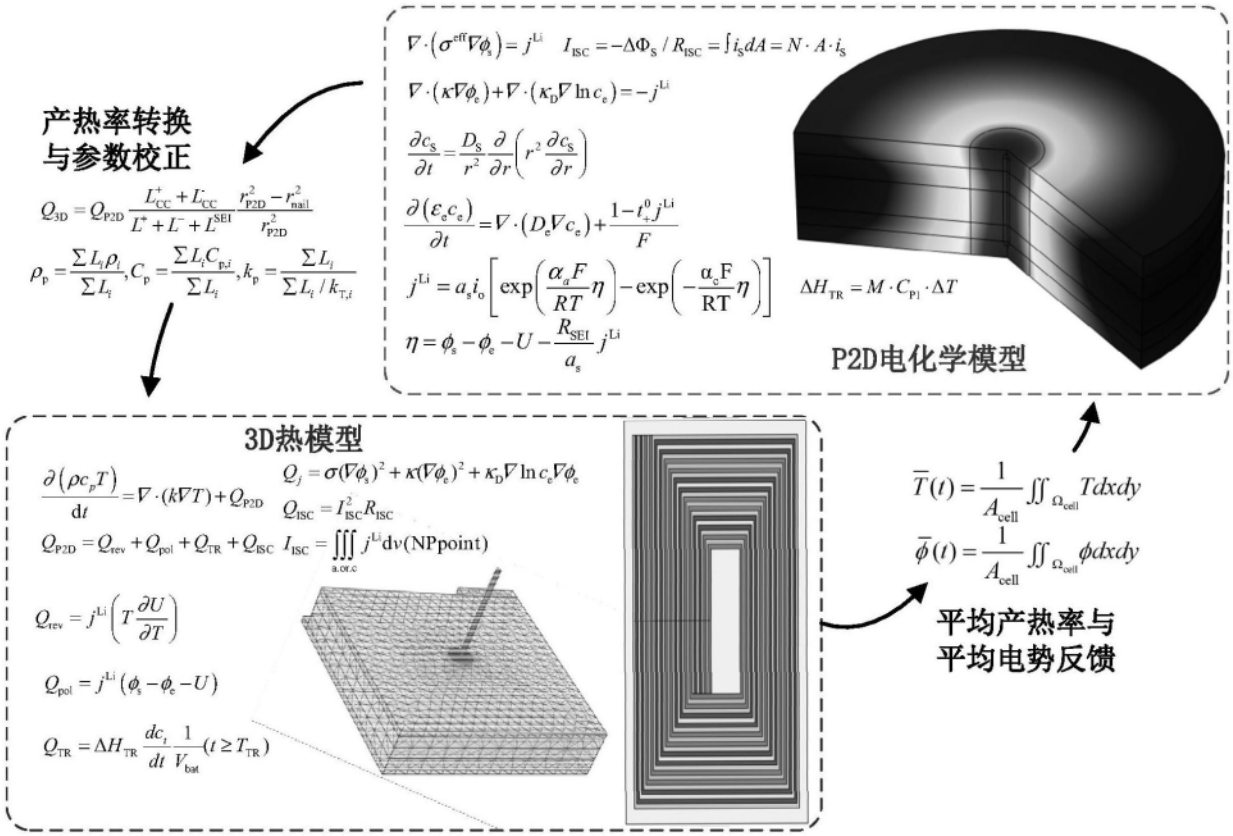


图3