

电池模块

简介

电池模块简介

© 1998–2020 COMSOL 版权所有

受列于 cn.comsol.com/patents 的美国专利 7,519,518、7,596,474、7,623,991、8,457,932、8,954,302、9,098,106、9,146,652、9,323,503、9,372,673、9,454,625、10,019,544、10,650,177 和 10,776,541 保护。专利申请中。

本文档和本文所述的程序根据《COMSOL 软件许可协议》(cn.comsol.com/comsol-license-agreement) 提供，且仅能按照许可协议的条款进行使用或复制。

COMSOL、COMSOL 徽标、COMSOL Multiphysics、COMSOL Desktop、COMSOL Compiler、COMSOL Server 和 LiveLink 为 COMSOL AB 的注册商标或商标。所有其他商标均为其各自所有者的财产，COMSOL AB 及其子公司和产品不与上述商标所有者相关联，亦不由其担保、赞助或支持。相关商标所有者的列表请参见 cn.comsol.com/trademarks。

版本：COMSOL 5.6

联系信息

请访问“联系我们”页面 cn.comsol.com/contact，以提交一般查询、联系技术支持或搜索我们的联系地址和电话号码。您也可以访问全球销售办事处页面 cn.comsol.com/contact/offices，获取更多地址和联系信息。

如需联系技术支持，请访问 COMSOL Access 页面 cn.comsol.com/support/case，创建并提交在线请求表单。其他常用链接包括：

- 技术支持中心：cn.comsol.com/support
- 产品下载：cn.comsol.com/product-download
- 产品更新：cn.comsol.com/support/updates
- COMSOL 博客：cn.comsol.com/blogs
- 用户论坛：cn.comsol.com/community
- 活动：cn.comsol.com/events
- COMSOL 视频中心：cn.comsol.com/video
- 技术支持知识库：cn.comsol.com/support/knowledgebase

文档编号：CM021502

目录

- 简介..... 5
- 电池建模..... 8
 - 电池建模物理场接口 12
- 基于空间维度和研究类型的物理场接口指南..... 14
 - 模型定义 17
 - 结果与讨论 18

简介

“电池模块”用于对电池的电极和电解质中的基本过程进行建模和仿真，其中可能涉及多孔电极中带电和中性物质的传递、电流传导、流体流动、传热和电化学反应。

您可以使用该模块研究电池采用不同的电极配置、隔膜、集流体和馈线、材料以及化学物质时，在不同工作条件下的性能。其中对所涉及的各种过程和现象进行了非常详细的描述，因此，您可以应用不同的假设来了解所研究的系统。您可以直接在该物理场接口中研究不同的电催化剂、孔隙分布、电解质成分和其他基本参数的影响。

除此之外，您还可以将电化学与其他物理场（例如传热、流体流动、结构力学和化学物质传递）进行耦合，以研究老化、热效应和应力 - 应变关系等现象。

下图显示“电池模块”接口以及 COMSOL Multiphysics 中由该模块修改的其他物理场接口，例如“化学物质传递”分支接口。

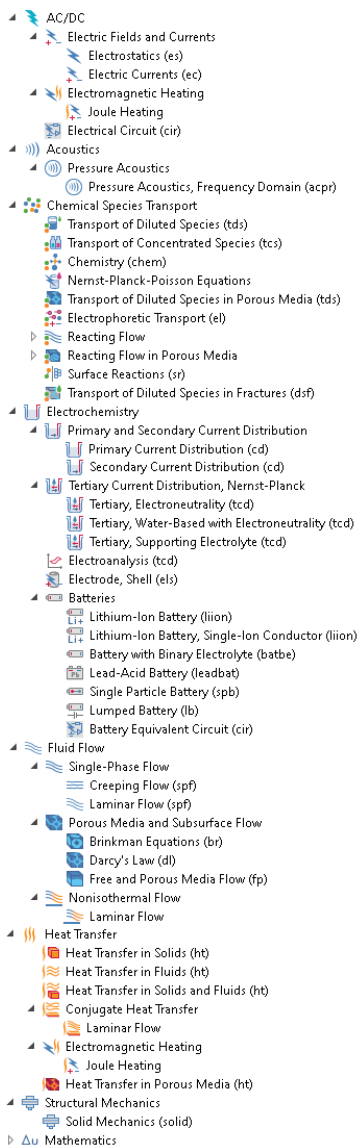






图1：“模型向导”中显示的“电池模块”的三维物理场接口。

“电化学” () 接口基于电流、电荷、化学物质和能量的守恒。“电池接口”构成了电池建模的基础，而“电流分布”接口通常可以作为燃料电池模型的起点。

“化学物质传递” ()、“流体流动” () 和“传热” () 接口通过电池和燃料电池建模的功能进行了扩展，例如，这些特征可用于处理多孔介质、气相质量传递以及通量、源和汇与电极反应的耦合。下面将进一步讨论不同的物理场接口。

电池建模

“电池模块”提供许多物理场接口用于对电池进行建模，选择哪种物理场接口取决于模型的总体目的。在研究电池的化学性质、老化或较高的充放电率时，人们通常使用微米级的空间相关模型来解析电池的不同层，而使用较粗的模型计算热源或预测低或中等充放电率的电压特性时，可以使用更集总的建模方法。

空间相关电池模型通常用于模拟由以下元素组成的单电池：

- a) 集流体和电流馈线
- b) 多孔或固体金属电极
- c) 用于分隔阳极和阴极的电解质

为了举例说明，我们在下面描述一些可充电电池的充放电过程。

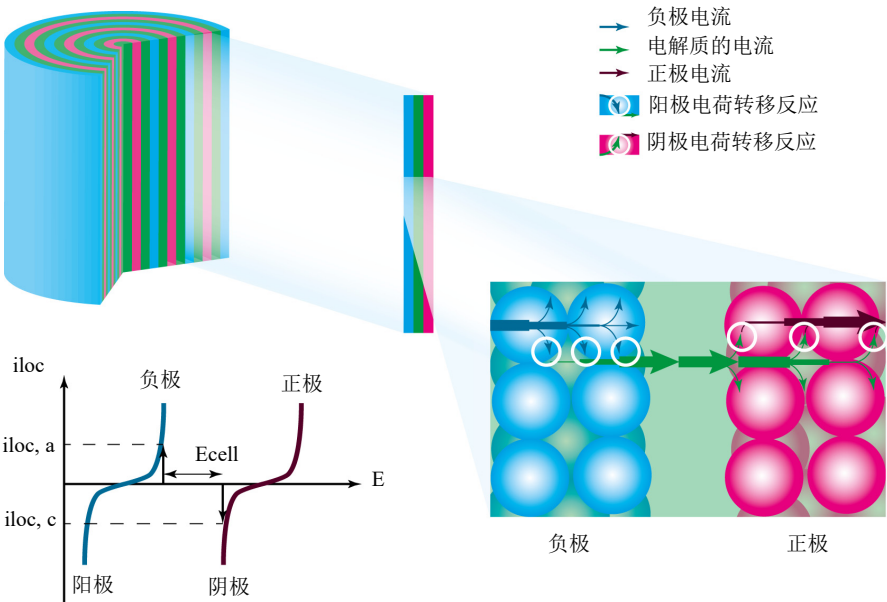


图2：多孔电极电池放电时，电流和电荷转移电流的方向。

放电时，在阳极和阴极的电荷转移反应中，化学能转化为电能。放电过程中化学能向电能的转化可能涉及电化学反应、电流的传输、电解质中离子和中性物质的传递、电极颗粒中的质量传递、流体流动以及不可逆损耗的热释放，例如欧姆损耗和活化能引起的损耗。

图 2 显示了放电过程的示意图。电流从负极的电流馈线进入电池。电极材料与多孔电极中包含的电解质（也称为孔隙电解质）之间的界面处发生电荷转移反应。这里，电极材料的氧化可以通过阳极电荷转移反应发生，如图 2 中的 $i_{loc, a}$ 所示。图中两条曲线的形状由特定材料的电极动力学进行描述。该反应还可能涉及来自孔隙电解质和电极颗粒的化学物质的传递。

电流通过离子在用于分离正负极（通过隔膜或储层）的电解质中的传输，从孔隙电解质传导至正极的孔隙电解质。

在孔隙电解质与多孔电极中颗粒表面的界面处，电荷转移反应将电解质电流转移到正极中由电子传导的电流。在这个界面上，电极材料的还原通过阴极电荷转移反应发生，如图 3 中的 $i_{loc, c}$ 所示。此外，电荷转移反应也可能涉及电解质和电极颗粒中化学物质的传递。

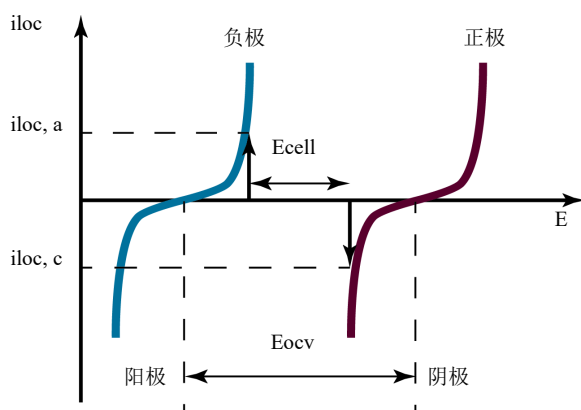


图3：放电过程中的电极极化。该图与图2 中的插图相同。

电流通过集流体离开电池。电流的传导和电化学反应也会由于欧姆损耗、活化损失和其他不可逆的过程而释放热量。

图 3 绘制了电荷转移电流密度 i_{loc} 随电极电位 E 的变化情况。这些曲线描述了放电过程中电极的极化。

负极在放电过程中发生阳极极化，如图 3 中箭头所示的正电流。负极的电位增加。正极被阴极极化，如箭头所示的负电流。正极的电位降低。

因此，图 3 也显示了电极之间的电位差（此处表示为 E_{cell} ）在放电时比开路电池电压（此处表示为 E_{ocv} ）有所减小。如果电池中的欧姆损耗可以忽略不计，则 E_{cell} 的值是给定电流 i_{loc} 下的电池电压。但大多数电池通常不是这种情况。这意味着在大多数情况下，电池电压比图 3 所示的电压略小。

充电期间，过程刚好相反（见图 4）。电能被转换成储存在电池中的化学能。

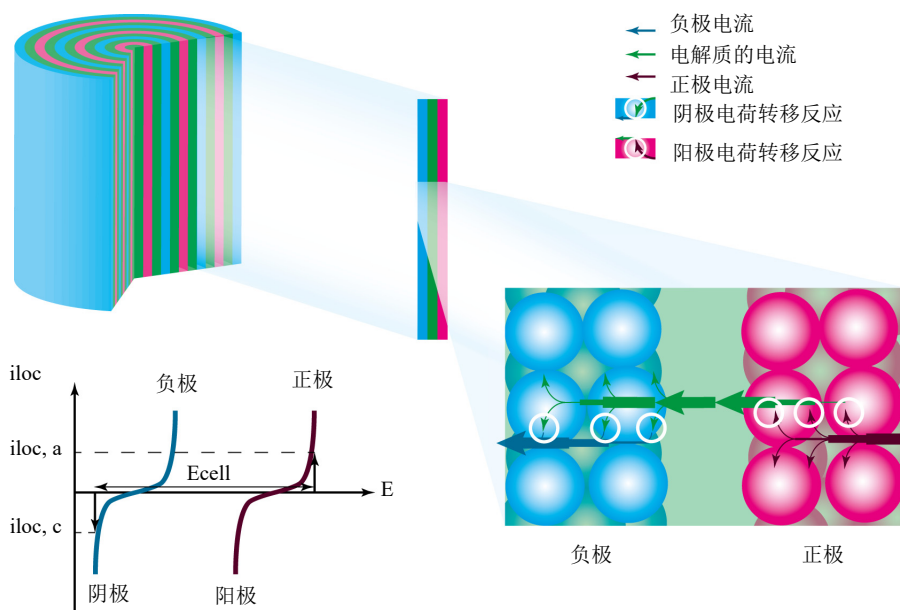


图 4：在充电期间，正极充当阳极，负极充当阴极。与开路电池电压相比，电池电压（在给定电流下）增大。注：此处的电流方向发生反转。

电流从正极进入电池。这里，在充电过程中，产物的氧化通过阳极电荷转移反应发生。正极发生阳极极化，具有正电流，且电极电位增大。

然后，电流通过孔隙电解质进行传导，从用于分离电极的隔膜（或储层）中的电解质传导到负极。

在负极，通过阴极电荷转移反应使先前放电反应的产物还原。负极发生阴极极化，电极电位降低。

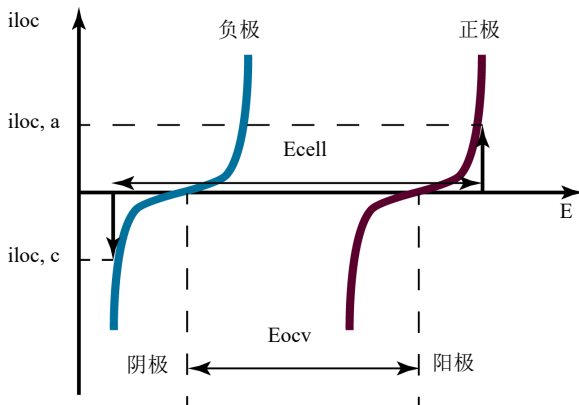



图5：充电过程中的电极极化。


电极之间的电位差（此处表示为 E_{cell} ）在给定的 i_{loc} 下，在充电时与开路电池电压（此处表示为 E_{ocv} ）相比有所增加，见图 5。当忽略欧姆损耗时， E_{cell} 的值等于电池电压。但在大多数电池中，我们不可以忽略这些损耗，它们会增加电池电压。


借助“电池模块”，您可以研究上图中描述的各种电池过程和现象。该模块包含的物理场接口可供您研究不同的参数对电池性能和热管理的影响，例如：


- 材料和化学选择
- 集流体和馈线的尺寸和几何形状
- 电极的尺寸和几何形状
- 组成多孔电极的颗粒的大小
- 多孔电极的孔隙率和比表面积
- 电池组件的配置
- 界面反应和本体反应动力学
- 电位或外加电流相关的负载循环
- 电化学电池的老化


电池建模物理场接口



“锂离子电池”接口 () 专用于液体电解质的锂离子电池，其中包含的功能可以描述带电物质在多孔电极中的传输、电解质、电极中的插层反应、黏合剂、电荷转移反应、内部颗粒扩散、传递物理量的温度依存性、老化机理和固体电解质界面 (SEI)。


“锂离子电池，单离子导体”接口 () 与上述接口类似，但是对电解质的电荷平衡方程使用不同的默认值，通常适用于固体电解质。


“单颗粒电池”接口 () 提供了一种简化的（例如，与“锂离子电池”接口相比）电池建模方法。该接口为电池的正极和负极分别使用一个单独的单颗粒模型来模拟电池中的电荷分布，使用集总溶液电阻项来解释电极颗粒中的固体扩散、插层反应动力学和隔膜中的欧姆电位降。





“二元电解质电池”接口 () 描述电极中的电流传导、多孔电极中的电荷转移反应、孔隙电解质和用于分离电极的电解质中离子的质量传递，以及形成多孔电极的颗粒中物质的插层。这些描述适用于具有碱性二元电解质的电池，涵盖了镍氢电池和镍镉电池。


“集总电池”接口 () 基于一个小的集总参数集来定义电池模型，用户无需了解电池电极的内部结构或设计，也无需了解如何选择材料。通过“集总电池”接口创建的模型通常可用于监控电池在一个负载周期内的荷电状态和电压响应。此外，该接口还定义可与“传热”接口耦合的电池热源，用于对电池冷却和热管理进行建模。


“电池等效电路” () 可用于基于任意数量的电路元件来定义电池模型。通过“电池等效电路”创建的模型通常可用于监控电池在一个负载周期内的荷电状态和电压响应。在“模型向导”中选择“电池等效电路”时，会在模型中添加一个“电路” () 接口，其中包含许多预定义的电路元件，用于定义开路电压、负载电流和内阻。用户可以添加附加电路元件，例如电阻器、电容器和电感器等。


“铅酸电池”接口 () 专为这种类型的电池而设计，其中包含的功能可以描述带电物质的传输、电荷转移反应、充放电引起的孔隙率变化，以及孔隙率变化引起的电解质的平均表面速度。

“三次电流分布，Nernst-Planck”接口 () 描述电解质中的带电物质通过扩散、迁移和对流进行的传输。此外，该接口还提供现成的公式用于计算多孔和非多孔电极，包括电子导体中的电荷转移反应和电流传导。

“化学物质传递”接口 () 描述孔隙电解质以及用于分隔阳极和阴极的电解质中的离子传输。此外，用户还可以添加其他反应（纯电化学反应除外），用来描述材料的降解等。通过与“二次电流分布”接口 ()、“浓物质传递”接口 () 和“多孔介质中的稀物质传递”接口 () 相结合，还可用于模拟大多数电池系统中带电物质的传输和电化学反应。

“化学”接口 () 位于“化学物质传递”分支，可用于定义反应物质、电极反应和普通化学反应体系。因此，该接口可以为空间相关的传递接口（例如“三次电流分布，Nernst-Planck”或“稀物质传递”接口）提供反应动力学和材料属性。

“流体流动”接口 () 描述与特定类型的电池（例如某些类型的铅酸电池）有关的多孔电极和自由介质中的流体流动。

“多孔介质传热”接口 () 描述单电池中的传热，包括电极材料和电解质中焦耳热的影响，电化学反应中的活化损失引起的加热以及净熵变的影响。除电化学反应以外的其他反应产生的热量也可以通过这些物理场接口进行描述。

基于空间维度和研究类型的物理场接口指南

下表列出了 COMSOL 基本许可证和“电池模块”提供的物理场接口。

| 物理场接口 | 图标 | 标记 | 空间维度 | 可用的研究类型 |
|--|---|--------|---------------------|---------------------------|
|  化学物质传递 | | | | |
| 表面反应 |  | sr | 所有维度 | 稳态（仅三维、二维和二维轴对称模型）；瞬态 |
| 稀物质传递 |  | tds | 所有维度 | 稳态；瞬态 |
| 多孔介质中的稀物质传递 |  | tds | 所有维度 | 稳态；瞬态 |
| 裂隙中的稀物质传递 |  | dsf | 三维、 二维、 二维轴对称 | 稳态；瞬态 |
| 电泳输送 |  | el | 所有维度 | 稳态；带初始化的稳态； 瞬态；带初始化的瞬态 |
| 化学 |  | chem | 所有维度 | 稳态；瞬态 |
| 浓物质传递 |  | tcs | 所有维度 | 稳态；瞬态 |
| Nernst-Planck-Poisson 方程 |  | tds+es | 所有维度 | 稳态；瞬态；稳态源扫描；小信号分析，频域 |
|  反应流 | | | | |
| 层流 |  | — | 三维、 二维、 二维轴对称 | 稳态；瞬态 |
| 层流，稀物质 |  | — | 三维、 二维、 二维轴对称 | 稳态；瞬态 |

| 物理场接口 | 图标 | 标记 | 空间维度 | 可用的研究类型 |
|---|--|---------|---------------------|--|
|  多孔介质反应流 | | | | |
| 稀物质传递 |  | rfds | 三维、 二维、 二维轴对称 | 稳态；瞬态 |
| 浓物质传递 |  | rfcs | 三维、 二维、 二维轴对称 | 稳态；瞬态 |
|  电化学 | | | | |
| 一次电流分布 二次电流分布 |   | cd | 所有维度 | 稳态；带初始化的稳态； 瞬态；带初始化的瞬态； 交流阻抗，初始值；交流 阻抗，稳态；交流阻抗， 瞬态 |
| 三次电流分布， Nernst-Planck（电中性， 水基电中性，支持电解质） |  | tcd | 所有维度 | 稳态；带初始化的稳态； 瞬态；带初始化的瞬态； 交流阻抗，初始值；交流 阻抗，稳态；交流阻抗， 瞬态 |
| 电分析 |  | tcd | 所有维度 | 稳态；瞬态；交流阻抗， 初始值；交流阻抗，稳 态；交流阻抗，瞬态； 循环伏安 |
| 电极，壳 |  | els | 三维、 二维、 二维轴对称 | 稳态；瞬态 |
|  电池接口 | | | | |
| 锂离子电池 （二元 1:1 液体电解 质，单离子导体） |  | liion | 所有维度 | 稳态；瞬态；交流阻抗， 初始值；交流阻抗，稳 态；交流阻抗，瞬态 |
| 二元电解质电池 |  | batbe | 所有维度 | 稳态；瞬态；交流阻抗， 初始值；交流阻抗，稳 态；交流阻抗，瞬态 |
| 铅酸电池 |  | leadbat | 所有维度 | 稳态；瞬态；交流阻抗， 初始值；交流阻抗，稳 态；交流阻抗，瞬态 |

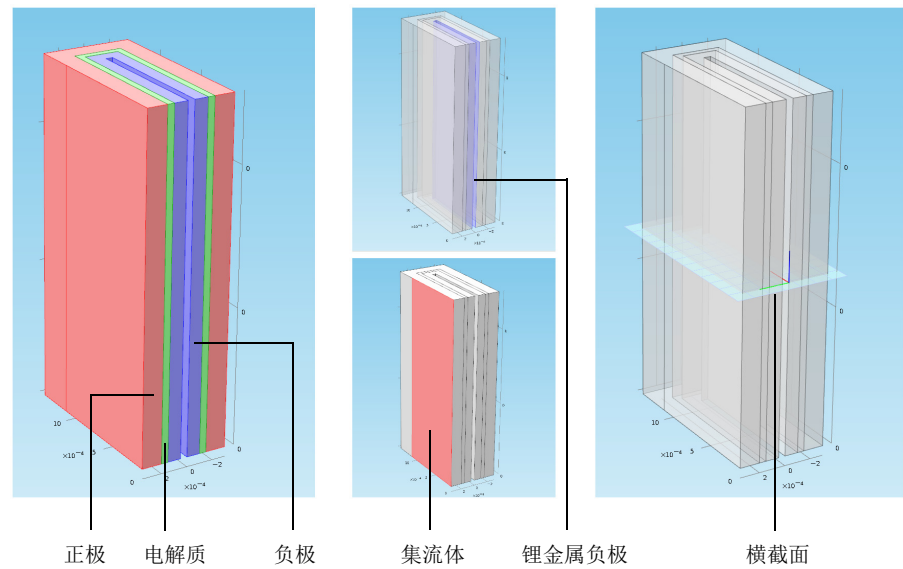
| 物理场接口 | 图标 | 标记 | 空间维度 | 可用的研究类型 |
|---|---|-----|---------------------|-------------|
| 单颗粒电池 |  | spb | 所有维度 | 瞬态；带初始化的瞬态 |
| 集总电池 |  | lb | 所有维度 | 瞬态；交流阻抗，初始值 |
| 电池等效电路 |  | ec | 非空间相关 | 稳态；瞬态；频域 |
|  流体流动 | | | | |
|  多孔介质和地下水流 | | | | |
| Brinkman 方程 |  | br | 三维、 二维、 二维轴对称 | 稳态；瞬态 |
| 达西定律 |  | dl | 所有维度 | 稳态；瞬态 |
| 自由和多孔介质流动 |  | fp | 三维、 二维、 二维轴对称 | 稳态；瞬态 |
|  传热 | | | | |
| 多孔介质传热 |  | ht | 所有维度 | 稳态；瞬态 |

锂离子电池教程

下面演示一个锂离子电池的二维模型。单电池几何结构可以是实验电池的一小部分，此处仅用于演示二维模型设置。电池包含多孔正极、电解质、锂金属负极和集流体。这种电池配置有时被称为“半电池”，这是因为人们通常认为锂金属电极对电池电压和极化的影响可以忽略不计。“电池模块”案例库提供的“卷绕式锂离子电池的边缘效应”模型显示了一个逼真的二维几何形状。

模型定义

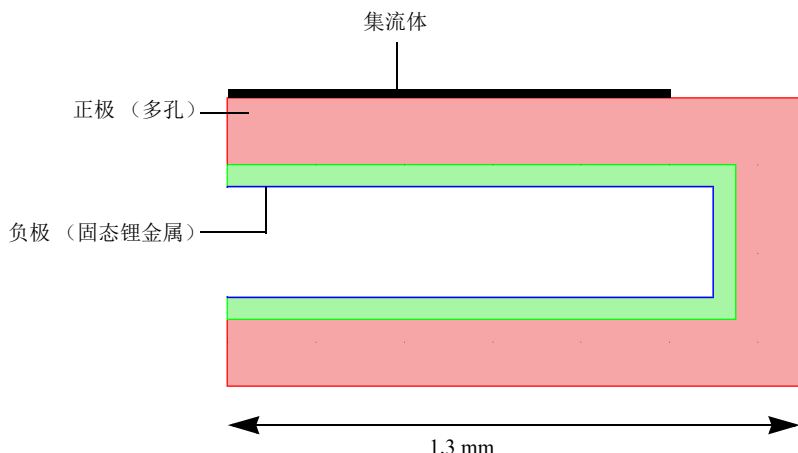
单电池几何结构如下图所示。由于该几何沿电池高度方向对称，因此可以使用二维横截面对这个三维几何进行建模。下图显示正负极的位置以及连接到正极的集流体。正极具有多孔结构，负极由锂金属构成。



模拟的二维横截面以浅蓝色显示（右）。

由于电化学反应只发生在与隔膜中的电解质接触的锂金属表面，并且与多孔正极相比，其电子电导率非常高，因此可以在模型几何中忽略金属厚度。模拟的

二维单电池几何形状如下图所示。在放电过程中，正极充当阴极，金属片的触点充当集流体。锂金属电极用作阳极和电流馈线。



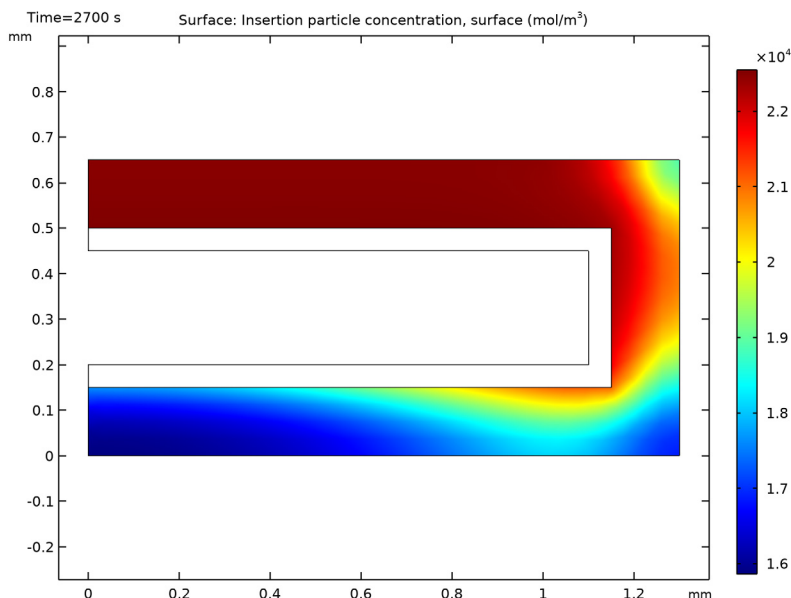
该模型定义并求解锂离子电池的电流和材料平衡问题。其中使用颗粒半径的第四个自变量 r （其他三个分别为 x 、 y 和 t ）来求解锂在正极颗粒中的嵌入问题。反应动力学和嵌入过程与颗粒表面的材料和电流平衡进行耦合。有关此模型的方程，请参阅 *Battery Design Module User's Guide*。该模型最初由加州大学伯克利分校的诺贝尔奖获得者 John Newman 和他的同事为进行一维仿真而建立。该模型在文献中通常称为伪二维模型（或 P2D 模型）。

结果与讨论

二维仿真的目的是揭示正极中放电深度与放电时间的关系。相应的电流分布与集流体的位置、正极和电解质层的厚度，以及电极动力学和传递属性相关。

下图显示了在 0.05 A 下放电 2700 s 后，电极中正极颗粒表面的锂离子浓度。

正极的高浓度与这些电极部分的局部放电深度成正比。从图中可以看出，相对于集流体的位置来说，电极背面在放电过程中的利用率较低。随着放电过程的继续，这些部分随后会放电。然而，对于单电池的反复循环（充放电），如果电极在循环过程中只进行中等程度的放电，则电极的不同部分会老化不均匀。





尽管这个模型很简单，但它揭示了实际电池几何中可能出现的问题，而借助建模和仿真对电极、集流体和电流馈线的形状和配置进行彻底的研究，可以避免这一问题。

以下操作说明阐述了如何建立、求解和重现此模型。






模型向导

注：这些操作说明适用于 Windows 用户界面，但同样适用于 Linux 和 macOS 系统，只是略有不同。

- 1 双击桌面上的 COMSOL 图标或从计算机的“开始”菜单启动软件。软件打开后，您可以选择使用“模型向导”来创建新的 COMSOL 模型，也可以使用“空模型”手动进行创建。对于本教程，单击“模型向导”按钮。


如果 COMSOL 已打开，您可以在“文件”菜单中选择“新建”，然后单击“模型向导”来启动它。

“模型向导”会引导您完成建立模型的最初几个步骤。首先，选择建模空间的维度。

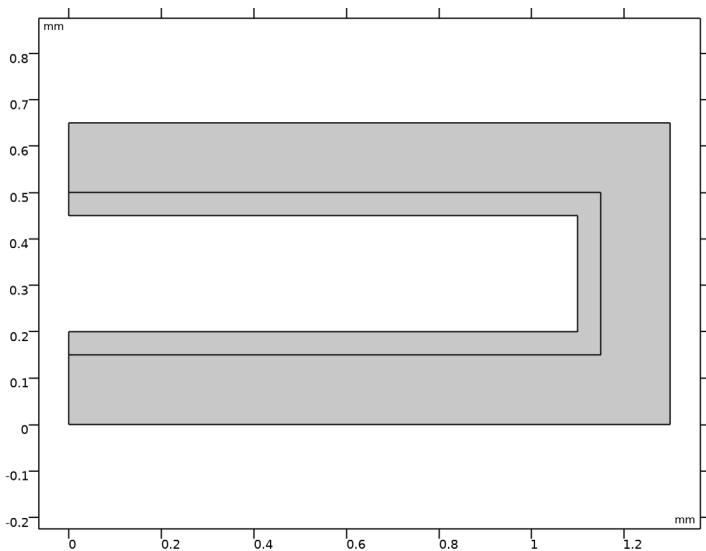
- 2 在“选择空间维度”窗口中单击“二维”按钮。
- 3 在“选择物理场”树的“电化学 > 电池”下，双击“锂离子电池 (liion)”将其加入“添加的物理场接口”列表。
- 4 单击“研究”。
- 5 在“研究”窗口的“预设研究”下，单击“带初始化的瞬态”。这种研究类型减少了需要通过计算电池接口中的初始电势来设置的初始值的数量，因此可以简化建模过程。
- 6 单击“完成”。

几何 1

从文件插入准备好的几何序列，然后，您可以研究该序列中的每个几何步骤。

- 1 在“几何”工具栏中单击“插入序列”。
- 2 浏览至案例库文件夹 Battery_Design_Module\Batteries_Lithium-Ion 中的 li_battery_tutorial_2d_geom_sequence.mph 文件。双击进行添加，或单击“打开”。
- 3 在“几何”工具栏中单击“全部构建”。
- 4 单击“缩放到窗口大小”按钮。


注：本练习中所用文件的位置根据 COMSOL Multiphysics 安装目录的不同而有所变化。例如，如果安装在硬盘上，文件路径应类似于 **C:\Program Files\COMSOL56\applications**。





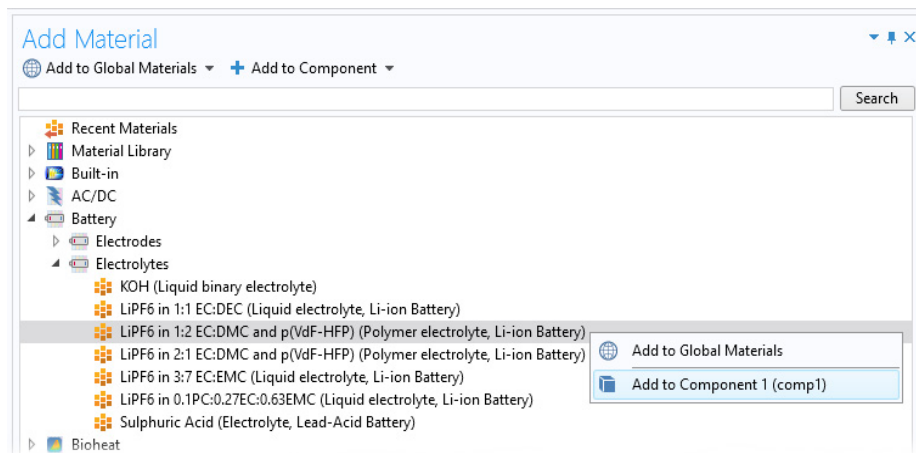
材料

使用“电池”材料库来设置电解质和电极（阳极和阴极）材料的材料属性。首先将电解质材料添加到模型中，该材料会成为所有域的默认材料。



添加材料

1 在“主屏幕”工具栏中单击“添加材料”。

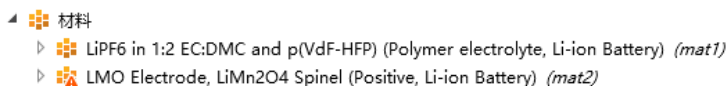
- 2 转到“添加材料”窗口。展开材料树的“电池”节点，在 Electrolytes 下右键单击 LiPF6 in 1:2 EC:DMC and p(VdF-HFP) (Polymer electrolyte, Li-ion Battery) ，然后选择  “添加到组件 1”。



LMO Electrode, LiMn2O4 Spinel (Positive, Li-ion Battery)

- 1 展开材料树的“电池”节点，在 Electrodes 下单击 LMO Electrode, LiMn2O4 Spinel (Positive, Li-ion Battery) 。在“添加材料”窗口中，单击  “添加到组件”。

在“模型开发器”中，“材料”节点下的节点序列此时应与下图相符。



默认情况下，第一种材料 (LiPF6 in 1:2 EC:DMC and p(VdF-HFP) (Polymer electrolyte, Li-ion Battery)) 已指派给所有域。您可以通过将电极材料指派给域 1 来替代默认选择。

- 2 在 LMO Electrode, LiMn2SO4 Spinel (Positive, Li-ion Battery) 中，选择“域”1。此时，模型树中的 LMO 材料节点将带有一个小红叉标记，表明缺少材料属性。这是预料之中的，我们将在设置多孔电极节点的物理场时解决这个问题。

现在，您可以根据需要进行单击，展开并检查“材料”节点中存在的各种属性（cEeqref 表示活性材料中的最大锂离子浓度）。您现在要继续定义的物理模型将使用其中的大部分属性。

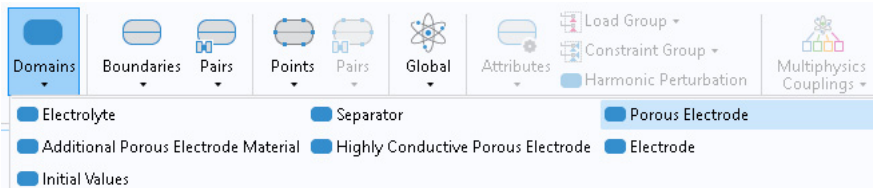
锂离子电池接口

默认情况下，“电解质”域节点已添加到模型中。电解质参数与电解质浓度相关，默认设置为从“材料”节点获取，因此无需对该节点进行进一步设置。


现在，使用多孔电极域节点在正极设置物理场。

多孔电极 1

1 在“物理场”工具栏中单击“域”。选择“多孔电极”将其添加到模型中。



2 定位到“多孔电极”节点的“域选择”栏，然后仅选择“域”1。

注：选择几何实体的方式有多种。当您知道要添加的几何实体时，例如本文的练习，可以单击“粘贴选择”按钮，然后在“选择”文本框中输入信息。有关在“图形”窗口中选择几何实体的更多信息，请参阅 *COMSOL Multiphysics Reference Manual*。

多孔电极节点定义了一个由电极（固体）和电解质（液体）相均匀混合而成的域。因此，您需要为不同的相指派不同的材料。默认情况下，每个相的材料属性将从“材料”节点下指派给域的材料获取，本例中为 LMO 电极材料。因此，您需要手动设置电解质相的材料选择。

3 在同一窗口的“电解质属性”栏中，从“电解质材料”列表中选择 LiPF6 in 1:2 EC:DMC and p(VdF-HFP) (Polymer electrolyte, Li-ion Battery)。

在此模型中，我们假设多孔电极由 40% 的电极和 15% 的惰性黏合材料混合而成，其余体中充满电解质。

4 在“多孔基体属性”栏的“电解质体积分数”文本框中，输入 1-0.4-0.15。

模型树中 LMO 材料节点上的小红叉现在应该已经消失了。

颗粒插层 1

默认情况下，“多孔电极”有两个子节点。“颗粒插层”节点在选定的域中添加额外维度，并假设其中为球形颗粒，从而求解固态锂在这个额外维度中的扩散问题。请保留此节点的默认设置。

多孔电极反应 1

“多孔电极反应”节点可以设置在多孔基体内的电解质与电极相界面处发生的锂离子插入反应的平衡电位、动力学和化学计量。这里同样保留此节点的默认设置。

电极电流 1

现在，我们定义电池的平均放电电流密度。

Electrolyte Properties

Electrolyte material:
LiPF6 in 1:2 EC:DMC and p(VdF-HFP) (Polymer ele

Electrolyte conductivity:
 σ_l From material

Electrolyte salt diffusivity:
 D_l From material

Transport number:
 t_+ From material

Activity dependence:
 $\frac{\partial \ln f}{\partial \ln c_l}$ From material

Electrode Properties

Electrode material:
Domain material

Electrical conductivity:
 σ_s From material

Particle Properties

Porous Matrix Properties

Electrode volume fraction:
 ϵ_s 0.4 1

Electrolyte volume fraction:
 ϵ_l 1-0.4-0.15 1

Lithium-Ion Battery (liion)

Electrolyte 1

No Flux 1

Insulation 1



Initial Values 1

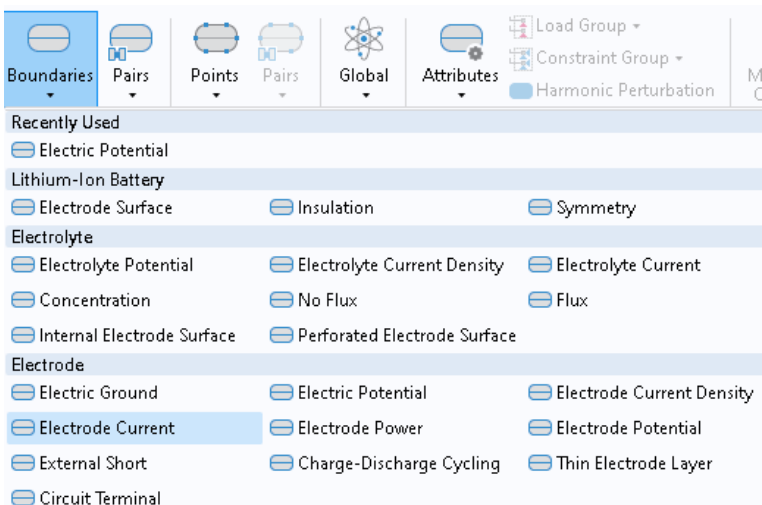
Porous Electrode 1

Particle Intercalation 1

Porous Electrode Reaction 1

Mesh 1

1 在“物理场”工具栏中，单击“边界” 并选择“电极电流”。





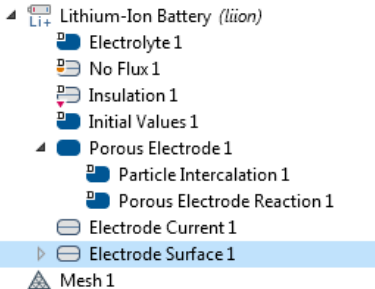
2 仅选择“边界”10。

3 定位到“电极电流”栏，从列表中选择“平均电流密度”，然后在“向内电极电流密度”文本框中输入 $-50[\text{A}/\text{m}^2]$ 。

电极表面 1

通过定义负极完成模型。由于锂金属的电导率较高，因此足以在锂金属域（未包含在此模型几何中）和电解质域（包含在此模型几何中）之间定义电极表面。

1 在“物理场”工具栏中，单击“边界” 并选择“电极表面”。




2 仅选择“边界”5、7和12。

默认情况下，电极的金属电位接地（设置为 0 V），因此无需对该节点进行进一步设置。

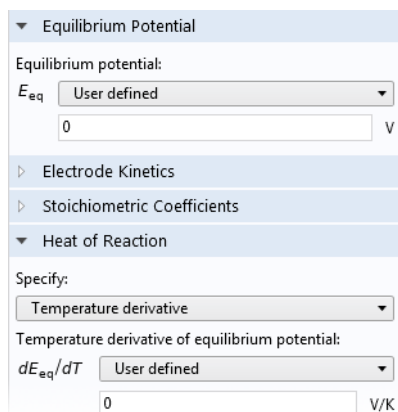
电极反应 1

与“多孔电极”节点类似，“电极表面”节点附带一个默认的“电极反应”子节点。请展开“电极表面”节点，并检查子节点的各种设置。您需要将平衡电位输入设置为适用于锂金属表面的值。

电极反应 1

- 1 在“模型开发器”中展开“电极表面 1”节点，并单击“电极反应 1”节点 。
- 2 定位到“平衡电位”栏，从“平衡电位”列表中选择“用户定义”。在 V 文本框中输入 0。
- 3 定位到同一窗口的“反应热”栏，从“平衡电位温度导数”列表中选择“用户定义”。在 V/K 文本框中输入 0。

两个输入的值分别为 0 V 和 0 V/K，它们适用于锂金属表面。



▼ Equilibrium Potential

Equilibrium potential:

E_{eq} User defined ▼

0 V

▶ Electrode Kinetics

▶ Stoichiometric Coefficients

▼ Heat of Reaction

Specify:

Temperature derivative ▼

Temperature derivative of equilibrium potential:

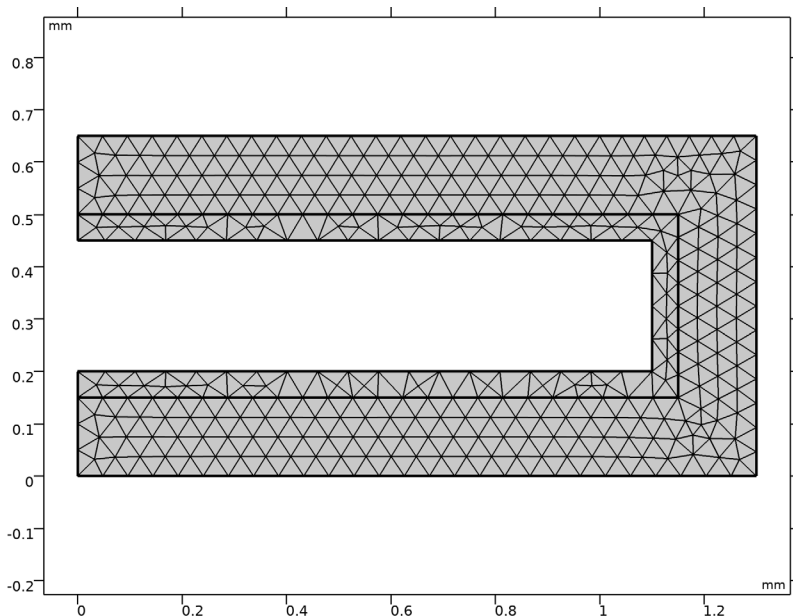
dE_{eq}/dT User defined ▼

0 V/K

网格 1

本例使用自动生成的网格，因此无需手动设置网格。您可以执行以下步骤来检查自动生成的网格：


- 1 在“模型开发器”窗口的“组件 1 (comp1)”节点下，右键单击“网格 1”并选择“全部构建”。




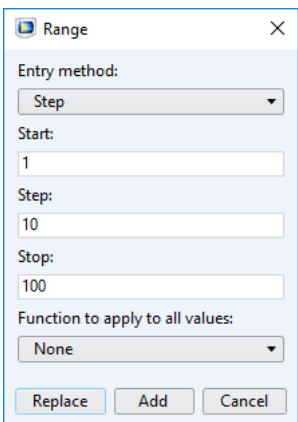
研究 1

设置一个 2700 秒的瞬态求解器，在前 100 秒内以 10 秒的间隔存储解，并在最后 2600 秒内以 100 秒的间隔存储解。然后对问题进行求解。

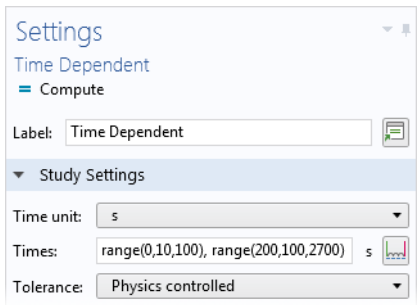
步骤 2：瞬态


- 1 在“模型开发器”中展开“研究 1”节点，并单击“步骤 2：瞬态”.
- 2 在“瞬态”的“设置”窗口中，定位到“研究设置”栏。

- 3 单击“范围”（“时间”文本框右侧的图标）。
- 4 在“范围”对话框的“步长”文本框中键入 10。
- 5 在“停止”文本框中键入 100。
- 6 单击“替换”。
- 7 再次单击“范围”，然后在“起始”文本框中键入 200。
- 8 在“步长”文本框中键入 100。
- 9 在“停止”文本框中键入 2700。
- 10 单击“添加”。



（此外，您也可以直接在“时间”文本框中键入表达式 `range(0,10,100)`
`range(200,100,2700)`。）




- 11 在“主屏幕”工具栏中单击“计算”。

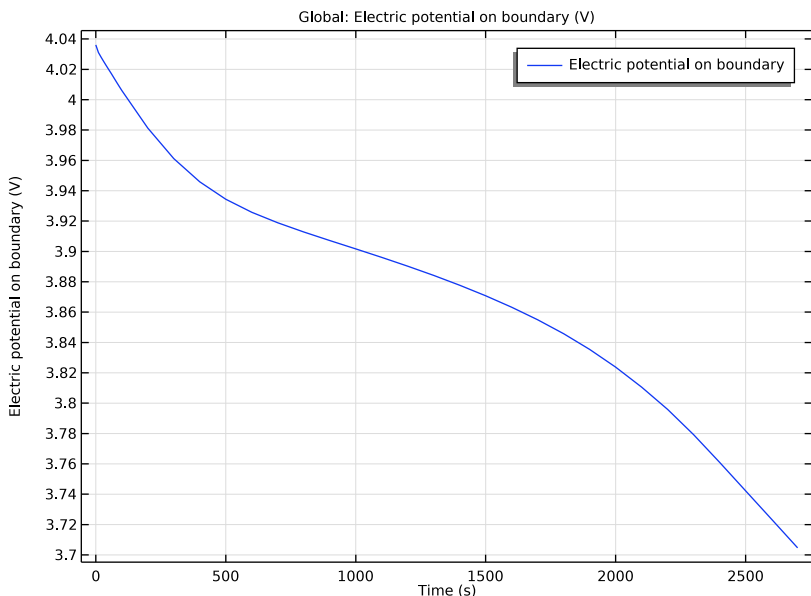
结果

对地边界电极电位 (liion)

默认情况下，系统会创建一个用于设置“电极电流”条件的电极电压图。由于您将另一个电极接地，因此在仿真过程中，这等于电池电压。

- 1 在“模型开发器”窗口的“结果”节点下，单击“对地边界电极电位 (liion)”。






- 2 通过在“设置”窗口的“标签”文本框中键入**电池电压**来重命名该绘图组，然后单击“绘制”。




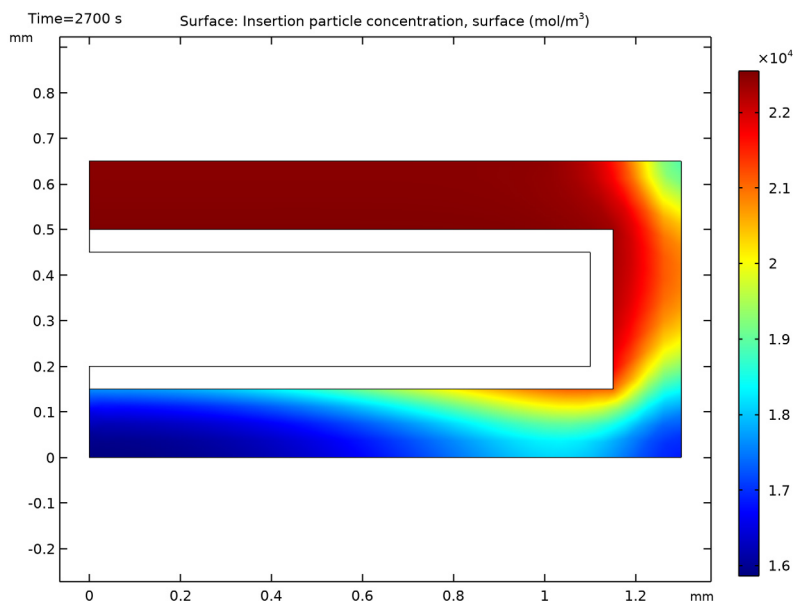
此外，您还可以浏览已创建的其他默认绘图。对于二维绘图，您可以在“数据”栏中选择要绘制的时间。

二维绘图组 8

以下步骤可以创建在 2700 秒时，电极颗粒表面的固态锂离子浓度图。



- 1 在“主屏幕”工具栏中，单击“添加绘图组” 并选择“二维绘图组”。
- 2 通过在“设置”窗口的“标签”文本框中键入**颗粒表面的锂离子浓度**来重命名该绘图组。
- 3 在**颗粒表面的锂离子浓度**工具栏中单击“表面”。
- 4 在“表面”的“设置”窗口中单击“替换表达式” (位于“表达式”栏右上角)。转到“组件 1”下的“锂离子电池”菜单。从“颗粒插层”菜单下的列表中选择“嵌入颗粒浓度，表面 (liion.cs_surface)”。
- 5 在**颗粒表面的锂离子浓度**工具栏中单击“绘制”。

6 在“图形”工具栏中，单击“缩放到窗口大小”按钮 。




数据集


如前所述，“颗粒插层”节点在多孔电极域中添加了额外维度，并求解这个额外维度中的固态锂离子浓度。为了创建正极颗粒中的锂浓度图，您需要先创建一个引用该额外维度的“解”数据集。

- 1 在“结果”工具栏中，单击“更多数据集”  并选择“解” .
- 2 在“解”的“设置”窗口中，定位到“解”栏，并从“组件”列表中选择“来自‘颗粒插层1’的额外维度(liion_pce1_pin1_xdim)”。

一维绘图组 9

从设置着手，绘制负极的固态锂浓度图。

- 1 在“结果”工具栏中，单击“一维绘图组” .
- 2 通过在“设置”窗口的“标签”文本框中键入正极颗粒的锂离子浓度来重命名该绘图组。
- 3 在“一维绘图组”的“设置”窗口中，定位到“数据”栏，然后从“数据集”列表中选择“无”。

4 在“颗粒的锂离子浓度”工具栏中单击“线图”。

5 在“线图”的“设置”窗口中，定位到“数据”栏中的“数据集”列表，然后选择“研究 1/解 1 (3)”。

6 从“时间选择”列表中选择“最后一个”，从而仅绘制解的最后一个时间步。

7 从“选择”栏的“选择”列表中，选择“所有域”。

8 `atxd2()` 运算符用于指定电池几何中的 x 和 y 坐标以及绘制的变量。在“y 轴数据”栏的“表达式”文本框中，键入 `comp1.atxd2(5e-4,1e-4,liion.cs_pce1)`。

9 接下来，在绘图中创建“图例”。

10 单击以展开“图例”栏。选中“显示图例”复选框。

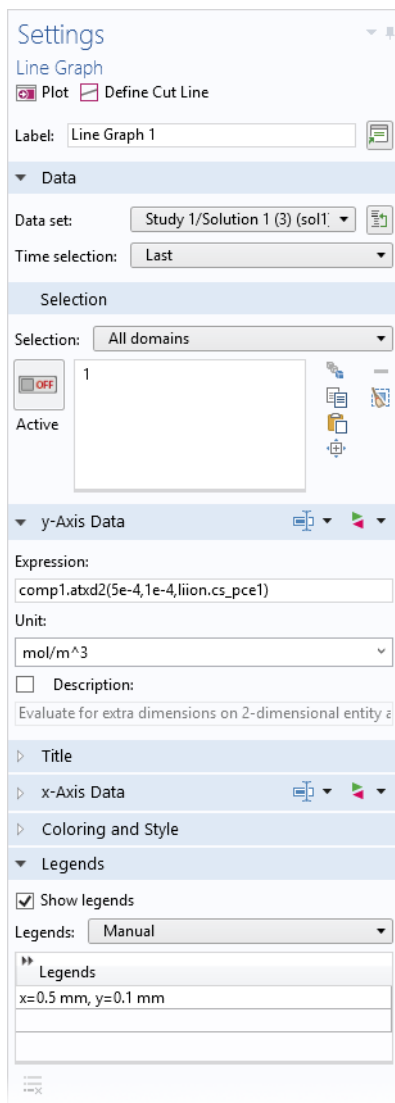
11 从“图例”列表中选择“手动”，然后在表格中输入 $x=0.5\text{ mm}$ ， $y=0.1\text{ mm}$ 。


12 右键单击“线图 1”并选择“复制粘贴”，以绘制正极中其他位置的浓度。

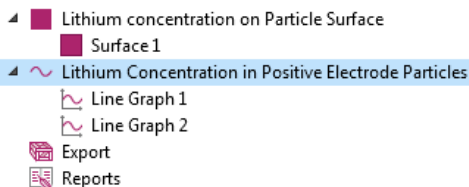
13 在“线图”的“设置”窗口中，定位到“y 轴数据”栏。

14 在“y 轴数据”栏的“表达式”文本框中，键入 `comp1.atxd2(5e-4,5.5e-4,liion.cs_pce1)`。

15 单击以展开“图例”栏，并将表格中的文本替换为 $x=0.5\text{ mm}$ ， $y=0.55\text{ mm}$ 。



16 要完成该绘图组，通过在“模型开发器”中单击“颗粒的锂离子浓度”工具栏  返回该节点。




17 在“一维绘图组”的“设置”窗口中，单击以展开“标题”栏，然后从“标题类型”列表中选择“手动”。

18 在“标题”文本区中输入正极颗粒中的锂离子浓度， $t=2700\text{ s}$ 。

19 定位到“绘图设置”栏：

- 选中“x 轴标签”复选框，然后在关联文本框中键入归一化颗粒维度。
- 选中“y 轴标签”复选框，然后键入锂离子浓度 (mol/m^3)。

20 单击以展开“图例”栏，然后从“位置”列表中选择“左上角”。

21 单击“图形”工具栏中的“缩放到窗口大小” 按钮，然后在“颗粒的锂离子浓度”工具栏中单击“绘制”。

