



IDAJ中国
GT小组

IDAJ公司

V2020 GT-autolion 基础

目录

1. GT-Autolion 简介

2. 材料库

3. 控制方程及求解

- 基本控制方程及求解
- 膨胀模型
- 电池平衡
- 寿命模型
- 双电层模型
- 方程求解
- GT-Autolion-3D 求解方法

4. 试验验证

5. 标定方法 (自动)

6. 案例介绍

目录

1. GT-Autolion 简介

2. 材料库

3. 控制方程及求解

- 基本控制方程及求解
- 膨胀模型
- 电池平衡
- 寿命模型
- 双电层模型
- 方程求解
- GT-Autolion-3D 求解方法

4. 试验验证

5. 标定方法 (自动)

6. 案例介绍

GT-SUITE 软件架构

GT-SUITE

前处理

GEM3D

COOL3D

GT-SPACECLAIM

发动机性能

排气后处理

噪声

求解器

GT-POWER

GT-SUITEmp

GT-SUITE-RT/xRT

GT-DRIVE+

GT-AutoLion

xLINK

整车性能

热管理

多体动力学仿真

流体系统仿真

电磁仿真

航空

燃料电池系统

实时仿真

各类整车模板

GT-AutoLion 1D

GT-AutoLion 3D

锂电池仿真

后处理

GT-POST/
DOE-POST

传统联合仿真方法

DOE & 优化

配气机构设计

GT-TAItherm

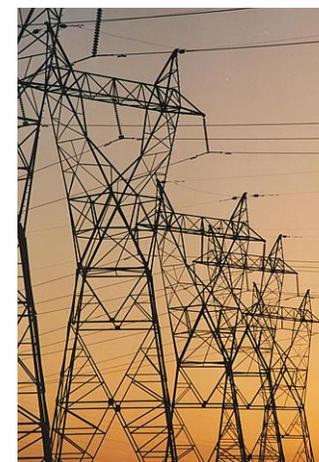
外部 excel 程序

特别专题

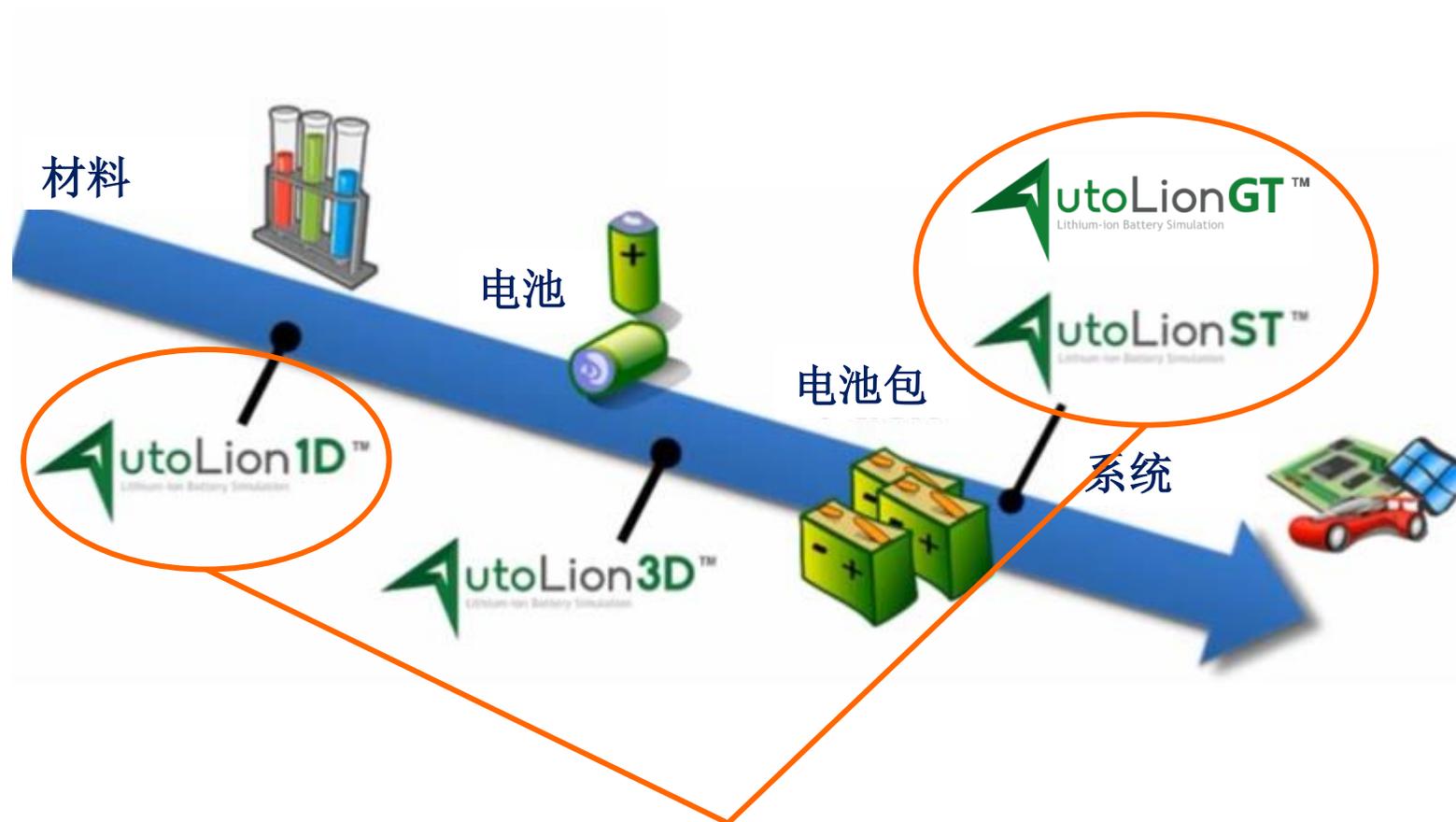
GT-Autolion

■ 背景

- 受美国能源部 (DOE) 资助的 CAEBAT 计划 (2011) 发展锂电池软件
- 美国能源部 (DOE) 和陆军坦克与自动车辆研究中心 (TARDEC) 共同资助的2013年奖项的唯一受奖公司 (锂电池的安全和寿命模拟)
- 2018年, AutoLion 被美国 Gamma 公司 (GT Suite原厂商) 收购



GT-Autolion



全部整合进GT软件 → GT AutoLion

GT-Autolion

■ 用户 (1D&3D)

- 来自美国、欧洲和日本的主要汽车制造商
- 5 家世界上最大的锂电池供应商
- 来自北美、欧洲和亚洲的主要大学



GT-Autolion

■ GT-Autolion-1D 功能

适合电池快速设计优化、电池系统仿真、控制策略开发及整车能量管理等：

- 宽工况范围内的电池快速设计和优化
- 影响电池性能和安全性的内部机理研究
- 宽工况范围内锂电池老化的可靠预测
- 电池系统的实时动态仿真
- 新能源车整车能量管理和续航里程预测

■ GT-Autolion-3D 功能

刻画温度、电流、放热量、老化、化学计量比、SOC的三维分布信息

- 电化学反应来自 GT-Autolion-1D
- 通过GT自身的网格生成器和有限元求解器刻画三维分布

目录

1. GT-Autolion 简介

2. 材料库

3. 控制方程及求解

- 基本控制方程及求解
- 膨胀模型
- 电池平衡
- 寿命模型
- 双电层模型
- 方程求解
- GT-Autolion-3D 求解方法

4. 试验验证

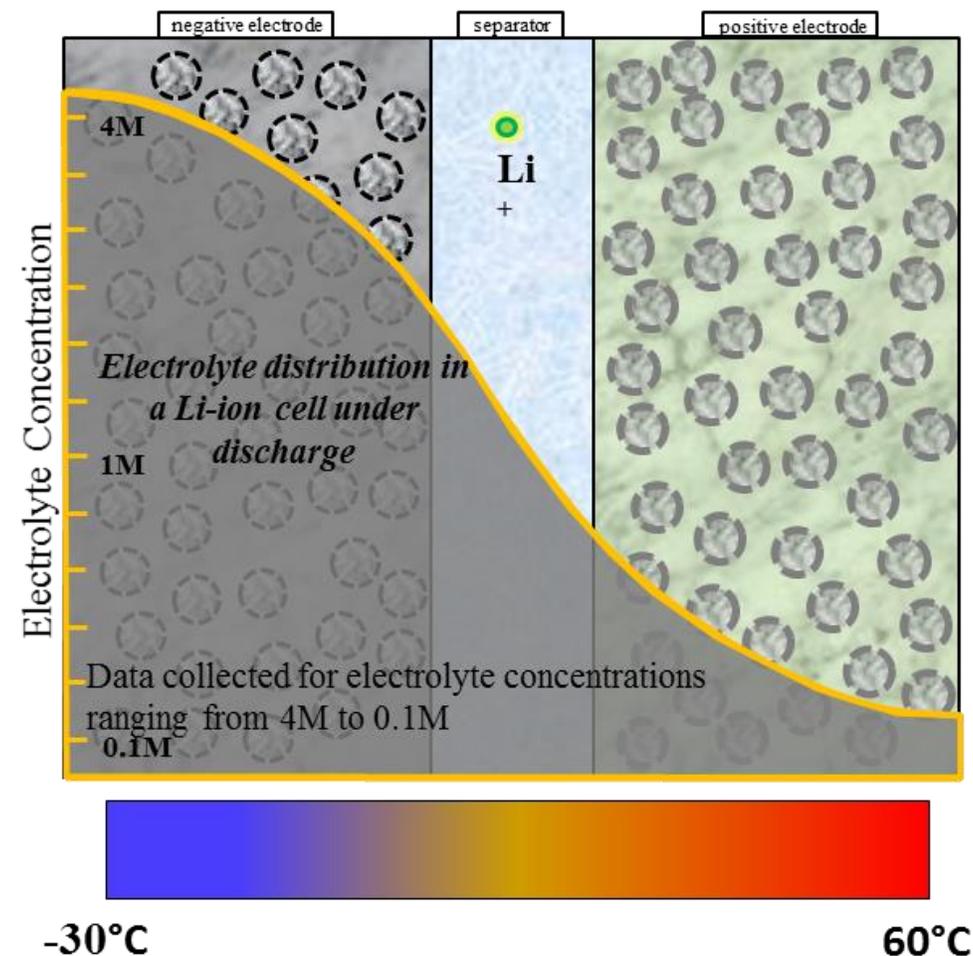
5. 标定方法 (自动)

6. 案例介绍

材料库

■ 材料数据库

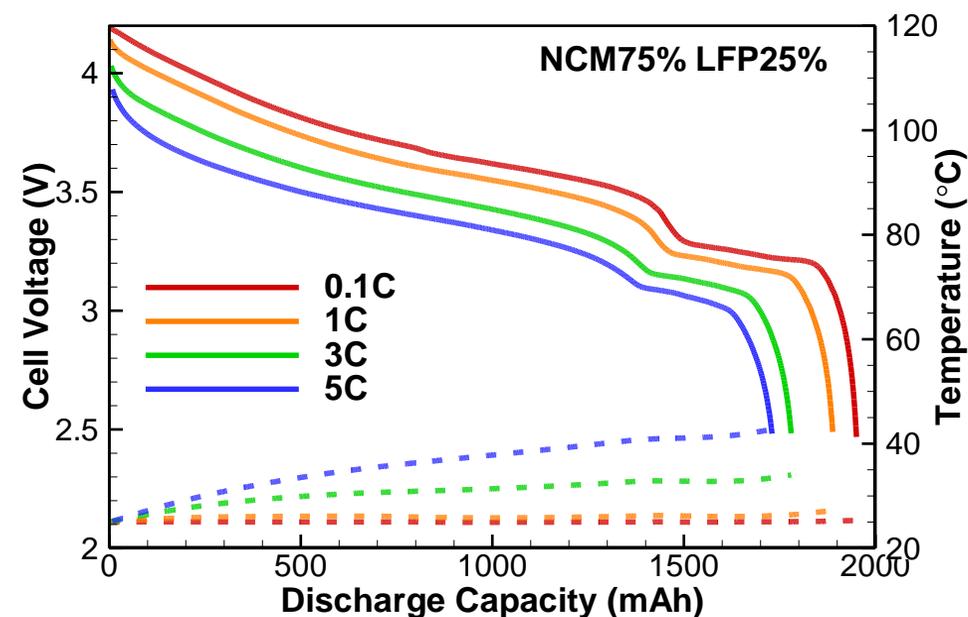
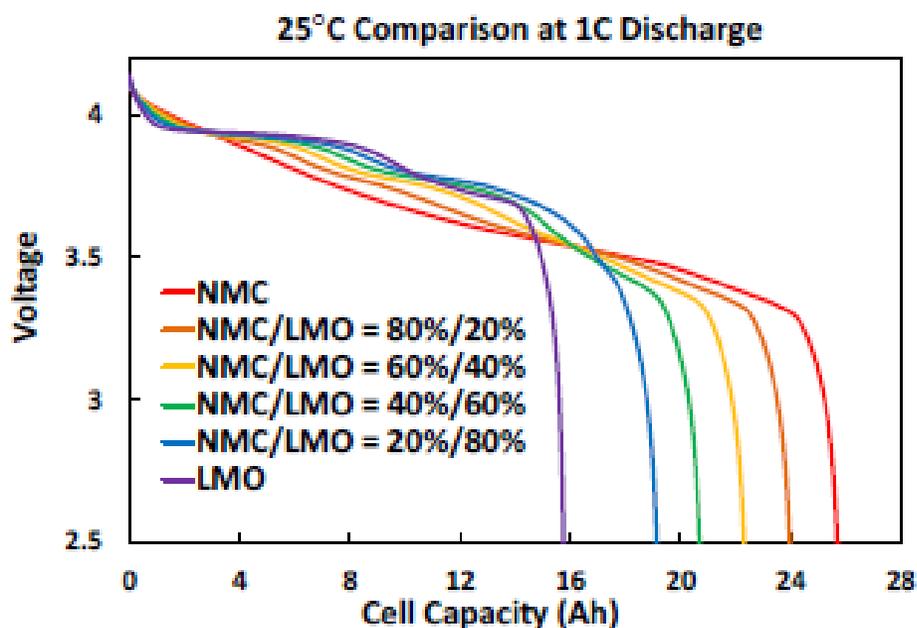
- 阳极材料：石墨、硬碳、钛酸锂(LTO)
- 阴极材料：NCM(111/ 622/811/523)、NCA、钴酸锂(LCO)、锰酸锂(LMO)、磷酸铁锂(LFPO)
- 电解液：LiPF₆_in_EC-EMC, LiPF₆_in_EC-EMC-DMC
- 适用温度范围：-30~60 °C
- 适用电解液浓度范围：0~4 M(mol/L)



材料库

■ 混合材料

在 GT-AutoLion 中，用户可方便设定不同活性物质的质量百分比，从而对活性物质混合物进行评价和优化



目录

1. GT-Autolion 简介

2. 材料库

3. 控制方程及求解

- 基本控制方程及求解
- 膨胀模型
- 电池平衡
- 寿命模型
- 双电层模型
- 方程求解
- GT-Autolion-3D 求解方法

4. 试验验证

5. 标定方法 (自动)

6. 案例介绍

■ 基本控制方程及求解

- 固相电荷守恒方程
- 液相电荷守恒方程
- 液相 Li⁺组分守恒方程
- 固相 Li⁺组分守恒方程
- 能量守恒方程（零维模型）
 - 4 种热源：反应热（过电势所致）、焦耳热（欧姆热）、接触电阻热、熵热（温度变化导致的电势变化）
- 电极反应电荷源项（BV 方程）
- Li⁺ 源项（BV 方程）

※ 注：熵热 $\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_p = -\frac{1}{nF}\left(\frac{\partial \Delta_r G}{\partial T}\right)_p = \frac{\Delta_r S}{nF}$

Description	Equation
Solid-phase charge conservation	$0 = \frac{\partial}{\partial x} \left(\sigma_s^{eff} \frac{\partial \phi_s}{\partial x} \right) - j^{Li} - a_{dl} C \frac{\partial (\phi_s - \phi_e)}{\partial t}$ (5)
Electrolyte-phase charge conservation	$0 = \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa^{eff} \frac{\partial \phi_e}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa_D^{eff} \frac{\partial \ln c_e}{\partial x} \right) + j^{Li} + a_{dl} C \frac{\partial (\phi_s - \phi_e)}{\partial t}$ (6)
Electrolyte-phase Li ⁺ species conservation	$\frac{\partial}{\partial t} [\varepsilon c_e] = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_e^{eff} \frac{\partial c_e}{\partial x} \right) + \frac{1 - t_+^o}{F} j^{Li}$ (7)
Active material Li species conservation	$\frac{\partial c_s}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(D_s r^2 \frac{\partial c_s}{\partial r} \right)$ (8)
Energy equation	$\frac{\partial}{\partial t} [\rho C T] = (q_r + q_j + q_c + q_e) A_{cell} - h_{conv} A_s (T - T_{amb})$ (9)

Source equation

$$j^{iC} = a_s i_o^{iC} \left\{ \exp \left[\frac{\alpha_a F}{R_u T} \left(\eta - \frac{R_f}{a_s} j^{Li} \right) \right] - \exp \left[-\frac{\alpha_c F}{R_u T} \left(\eta - \frac{R_f}{a_s} j^{Li} \right) \right] \right\}$$

$$j^{Li} = j^{iC} + i_s a_s$$

■ 膨胀模型

使用Si基负电极会发生显著的膨胀，GT-Autolion 考虑两种膨胀，影响孔隙率和颗粒物尺寸。

- 活性材料膨胀

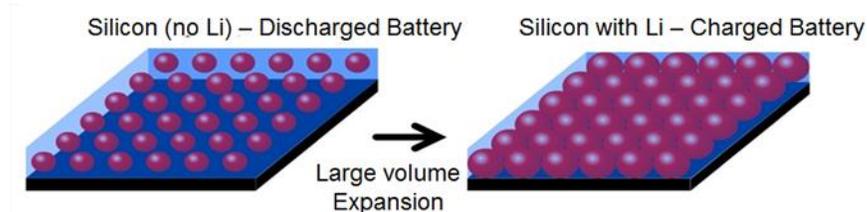
$$\gamma = \frac{V_{100\%}^{AM}}{V_{0\%}^{AM}}$$

- 电极厚度膨胀 (粘合剂/添加剂所致)

$$\beta = \frac{\delta_{100\%}^{electrode}}{\delta_{0\%}^{electrode}}$$

锂化过程带来的活性物质颗粒的膨胀

活性物质的固有特性



← 3 类Si基活性材料 →

	Si合金	Si-C 复合材料	Si 纳米线
材料密度(g/cc)	4.2	2.3	1.12
可逆容量(mAh/gm)	840-900	1500*	1500-1800
膨胀系数 ($V_{100\%}^{lithiation} / V_{0\%}^{lithiation}$)	2.1-2.2	2.1*	1-1.1

* 适用于活性材料中有~35%的Si质量含量。Si质量含量的变化会改变此值

■ 电池平衡

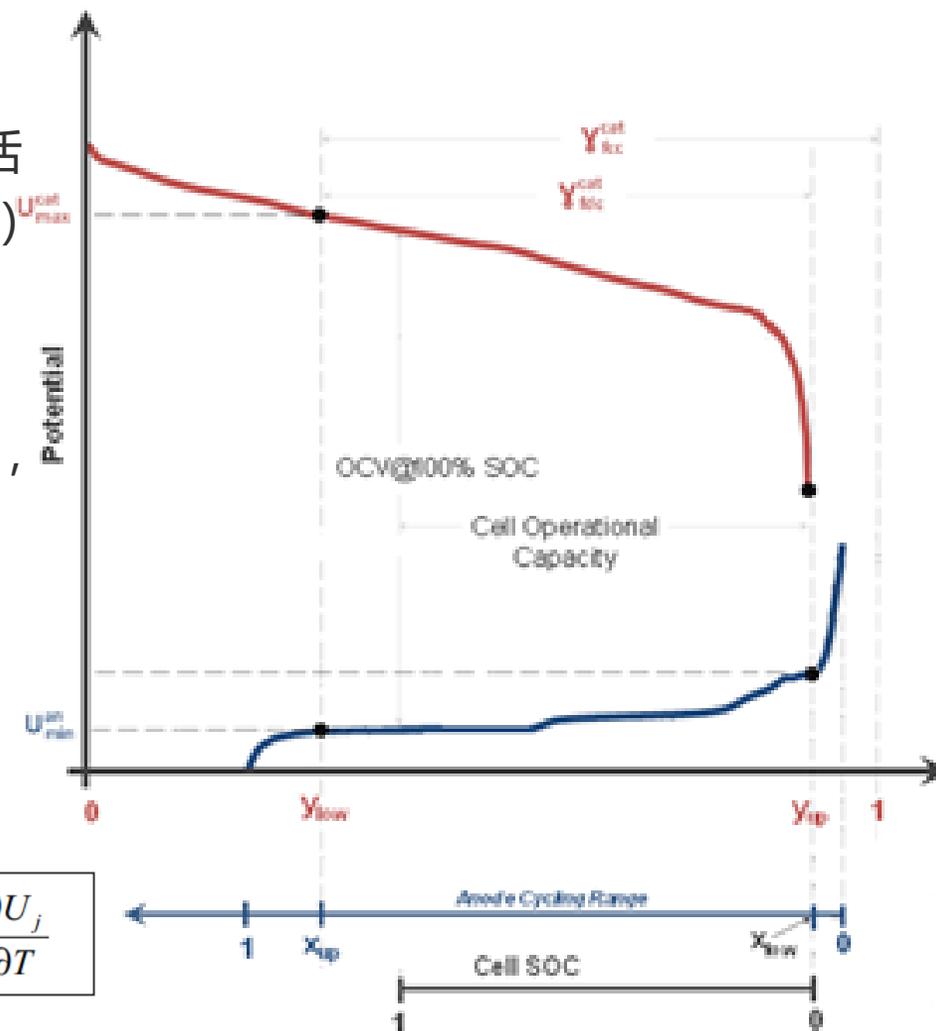
- 最大容量（理论容量）：最大锂离子量
- 可逆容量：在电池化成后，基于可循环（cyclable）锂离子的活性材料的容量。根据阴阳极中不可逆损失（由半电池试验得到）的大小，分为 Anode limited 和 Cathode limited 两种模式
- 首充、首放容量：半电池试验测得
- 工作容量：根据用户指定的最大电动势（OCV@100% SOC），在极低放电倍率下的容量。
- 实际容量：依倍率不同
- 开路电势（OCP）计算

$$U_{1,ref} = 4.19829 + 0.565661 \tanh[-14.5546\theta + 8.60942] - 0.0275479[1/(0.998432 - \theta)^{0.492465} - 1.90111] - 0.157123 \exp(-0.04738\theta^8) + 0.810239 \exp[-40(\theta - 0.133875)]$$

$$U_{2,ref} = -0.16 + 1.32 \exp(-3.0\theta) + 10.0 \exp(-2000.0\theta)$$

$$U_j = U_{j,ref} + (T - T_{ref}) \frac{\partial U_j}{\partial T}$$

$$\text{Stoichiometry} = \frac{C_s}{C_{s,max}}$$



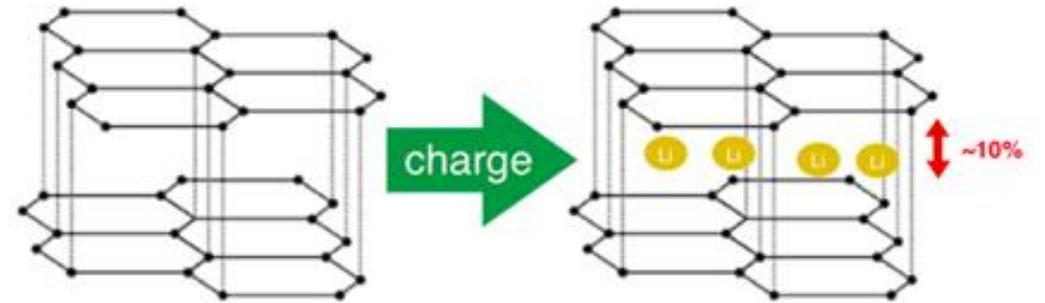
■ 寿命模型—活性材料隔离模型

Li+脱嵌过程可对活性材料的晶体结构产生结构应力，导致循环过程中活性材料的隔离或脱落，这会减低电池容量

- 隔离模型：活性材料浓度与Li+生成量负相关

$$\frac{d\varepsilon_{AM}}{dt} = -k(T) |j^{Li}|$$

$$\Phi = \Phi_{ref} \exp \left[\frac{E_{act,\Phi}}{R} \left(\frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T} \right) \right]$$



■ 寿命模型—阳极SEI膜增长模型

碳酸亚乙酯 (EC) 扩散到活性颗粒物表面跟表面上的Li⁺ 和电子反应生成烷基碳酸锂，即 SEI 膜。因此模型主要包括副反应的动力学方程和 EC 的扩散方程

- 副反应电化学动力学方程

$$j_{SEI} = -a_s i_{0,SEI} \exp\left(-\frac{\alpha_{c,SEI} F}{RT} \left(\phi_s - \phi_e - U_{SEI} - \frac{j^{Li}}{a_s} R_{SEI}\right)\right)$$

- EC 扩散方程

$$\frac{\partial c_{EC}}{\partial t} = D_{EC}^{eff} \frac{\partial^2 c_{EC}}{\partial r^2}$$

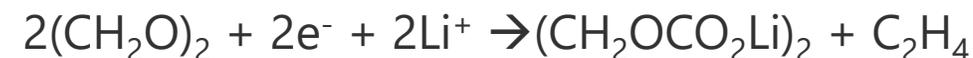
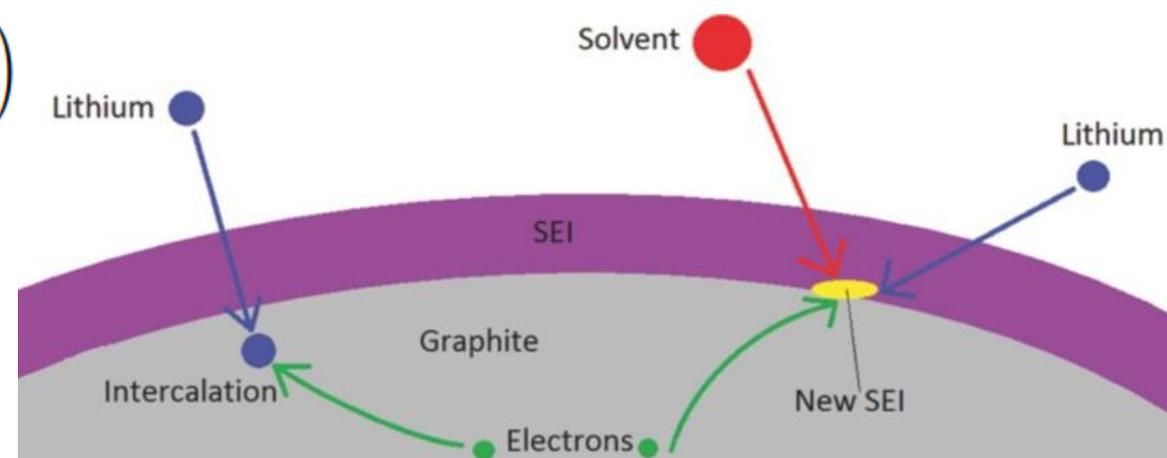
- 两者桥梁在于交换电流密度

$$i_{0,SEI} = F k_{0,SEI} c_{EC}^s$$

- SEI 膜电阻

$$R_{SEI} = \delta_{SEI} / \kappa_{SEI}^{eff}$$

$$\frac{\delta_{SEI}}{dt} = -\frac{i_{SEI} M_{SEI}}{2F \rho_{SEI}}$$



■ 寿命模型—阴极氧化膜增长模型

与 SEI 膜相似，模型也主要包括副反应的动力学方程和 EC 的扩散方程

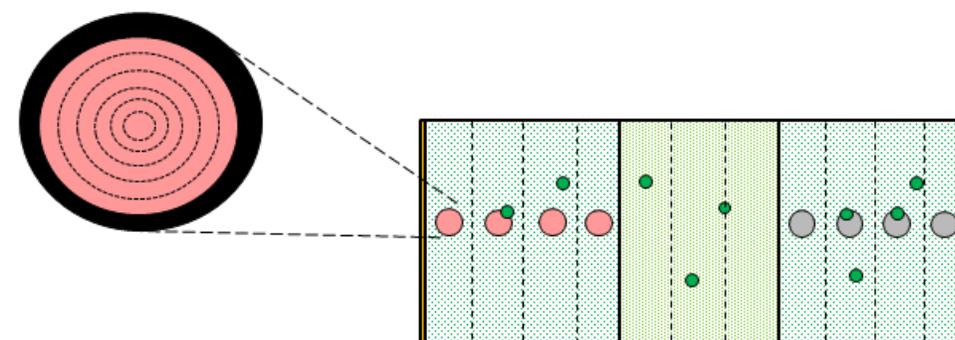
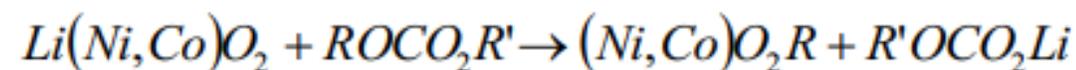
- 副反应动力学方程 $J_{s,C} = k_{s,C} c_{EC,s} c_{Li(x)(Ni,Co)O_2}$

- EC 扩散方程 $\frac{\partial c_{EC}}{\partial t} = D_{EC}^{eff} \frac{\partial^2 c_{EC}}{\partial r^2}$

- 活性材料守恒方程 $\frac{d\varepsilon_{Li(Ni,Co)O_2}}{dt} = -\frac{aJ_{s,C}}{c_{Li(Ni,Co)O_2}}$

- 氧化膜电阻 $R_f = \delta_{film} / \kappa^{eff}$

$$\frac{d\delta_{film}}{dt} = J_{s,C} \frac{MW_{film}}{\rho_{film}}$$



■ 寿命模型—析锂模型

如果局部阳极电势相对 Li/Li+ 变为负值，则出现析锂现象。GT-Autolion 认为析锂反应不可逆，故析锂对电阻没有影响，但会影响阳极的孔隙率。另外，析锂模型会影响后期非线性老化

- 副反应动力学方程

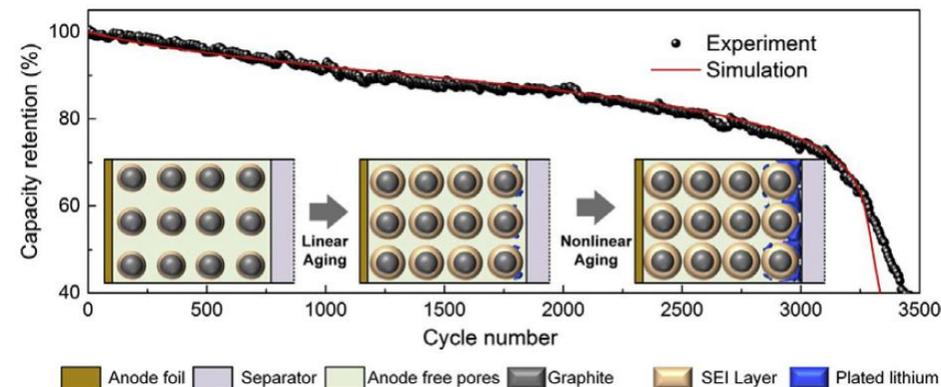
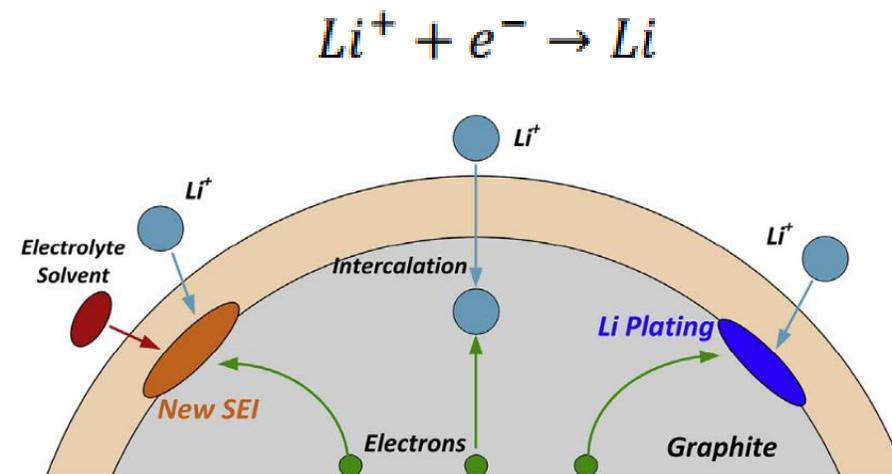
$$j_{lpl} = -a_s i_{0,lpl} \exp\left(-\frac{\alpha_{c,lpl} F}{RT} (\phi_s - \phi_e)\right)$$

- 析锂膜厚度

$$\frac{\delta_{lpl}}{dt} = -\frac{i_{lpl} M_{Li}}{F \rho_{Li}}$$

- 孔隙率

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = -a_s \frac{d(\delta_{SEI} + \delta_{lpl})}{dt}$$



■ 双电层模型

电极附近的双电层结构会由于电势差的变化产生充放电过程，进而影响电荷守恒方程。在锂电池中其特征时间小于**1ms**，电容的典型值为 0.2F/m²

- 双电层充放电

$$i_{dl} = a_{dl} C \frac{\partial t(\phi_s - \phi_e)}{\partial t}$$

- 双电层特征时间

$$\tau = L^2 a_{dl} C \left(\frac{1}{\kappa} + \frac{1}{\sigma} \right)$$

注：仅在毫秒量级上影响显著

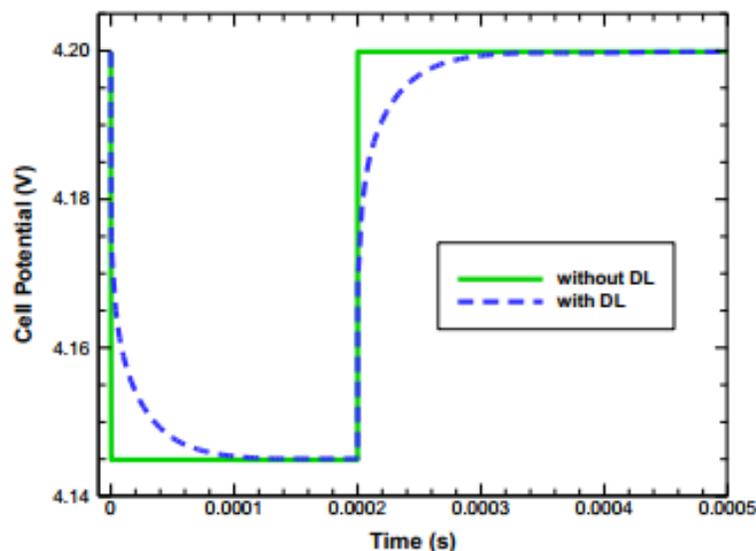


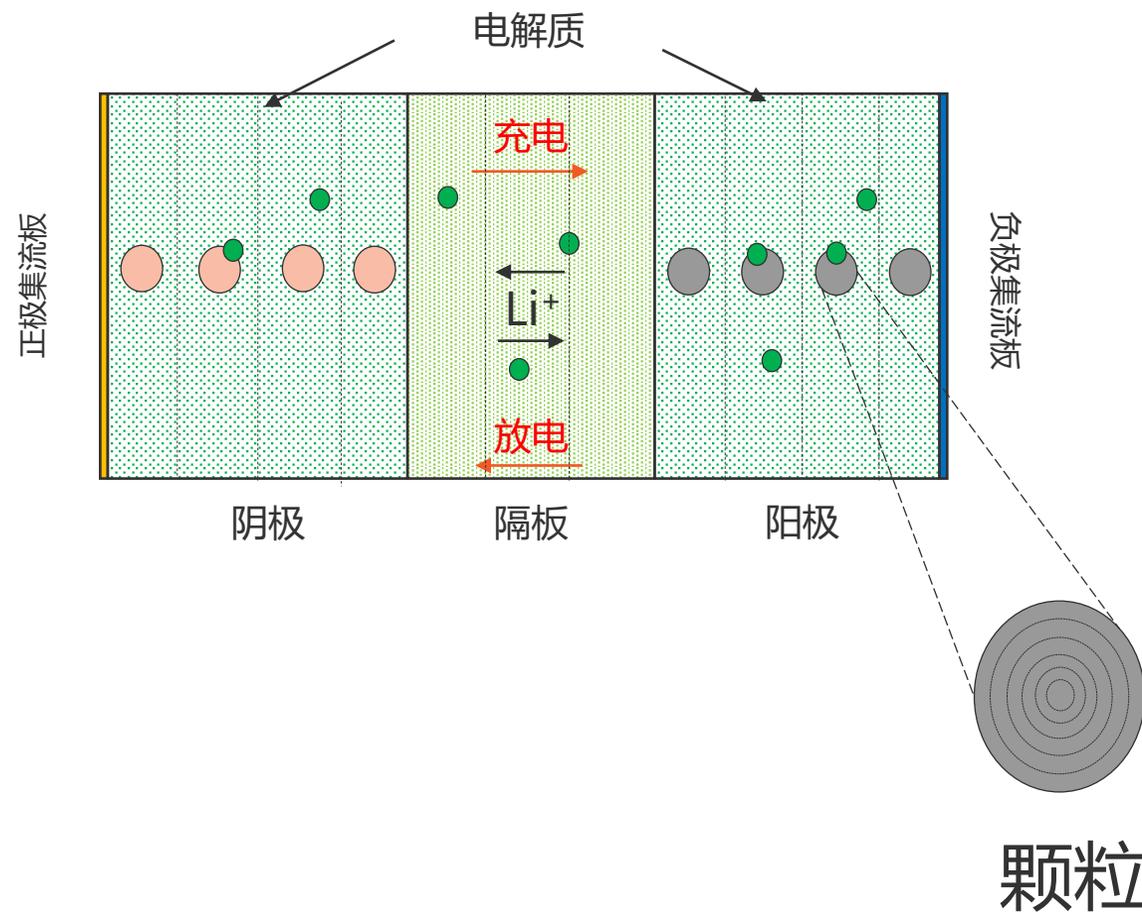
Figure 11: Voltage responses for 1C current discharge for 0.2ms.

■ 方程求解

● 方程离散

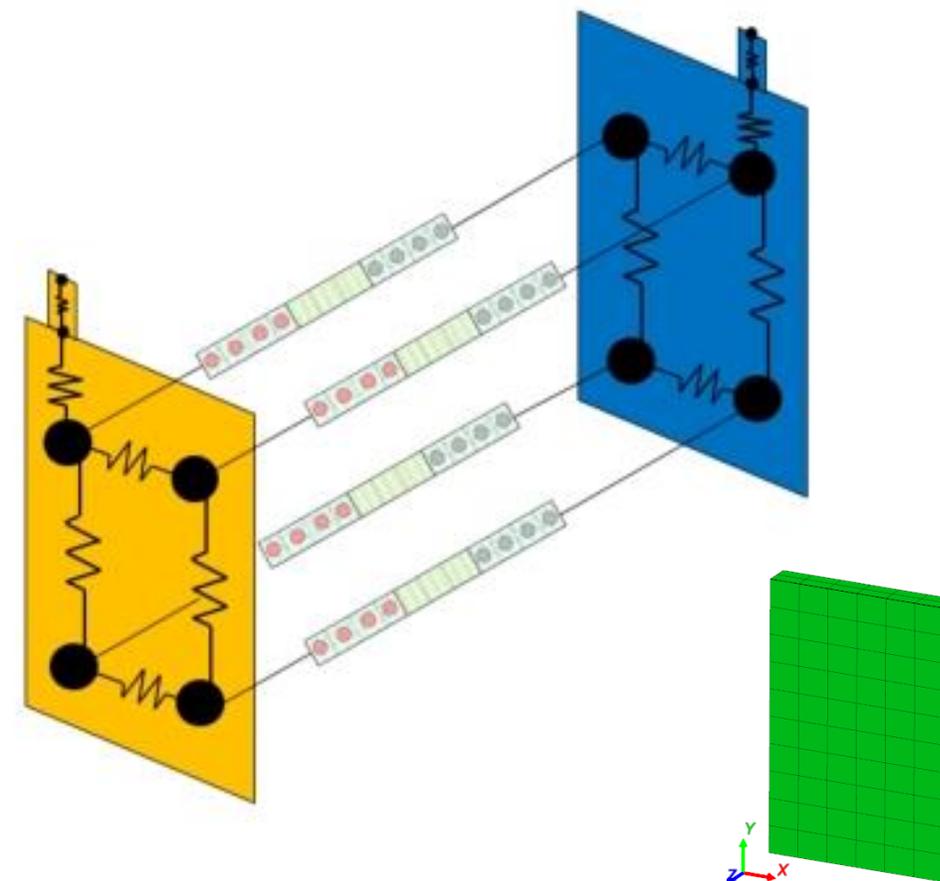
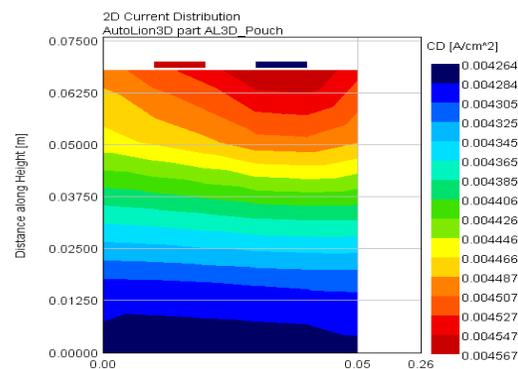
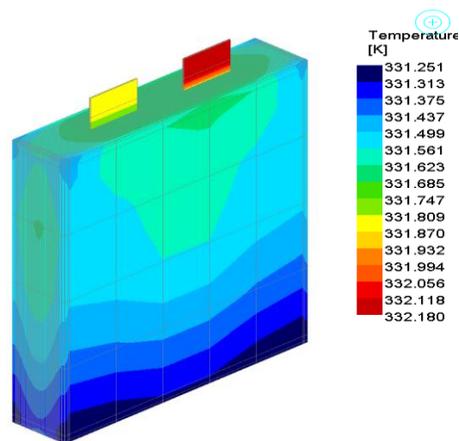
方程离散采用有限体积法

- 阴极、隔板和阳极在厚度方向进行一维离散
- 活性颗粒物质在球坐标内进行径向一维离散



■ GT-Autolion-3D 求解方法

- 电化学部分按照 GT-AUTOLION-1D求解
- 集电器/极耳是电阻性质的，由电阻网络模拟
- 传热采用有限元求解



AutoLion 3-D Electro-Chemical-Thermal Modeling

目录

1. GT-Autolion 简介

2. 材料库

3. 控制方程及求解

- 基本控制方程及求解
- 膨胀模型
- 电池平衡
- 寿命模型
- 双电层模型
- 方程求解
- GT-Autolion-3D 求解方法

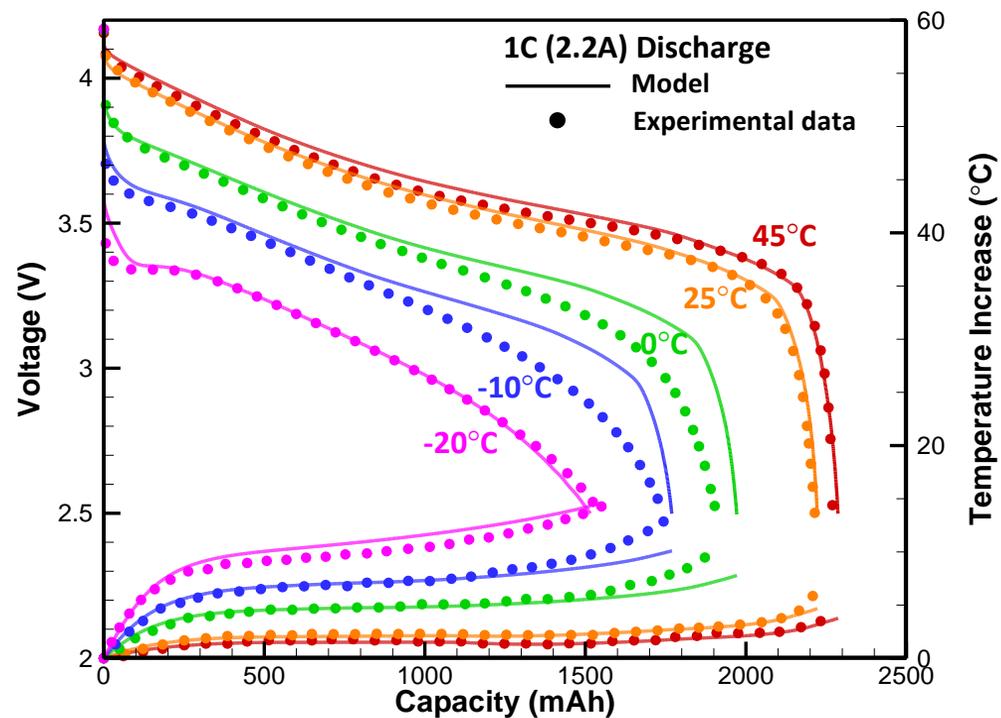
4. 试验验证

5. 标定方法 (自动)

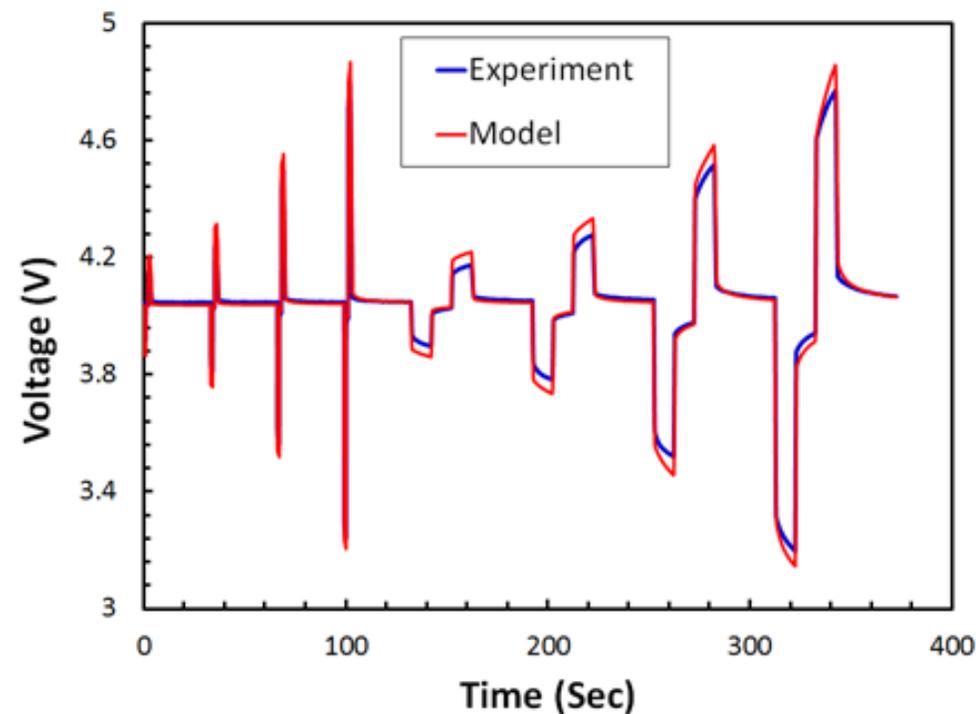
6. 案例介绍

试验验证

■ 恒流放电和动态脉冲模拟



2.2 Ah NMC/石墨 18650 电池

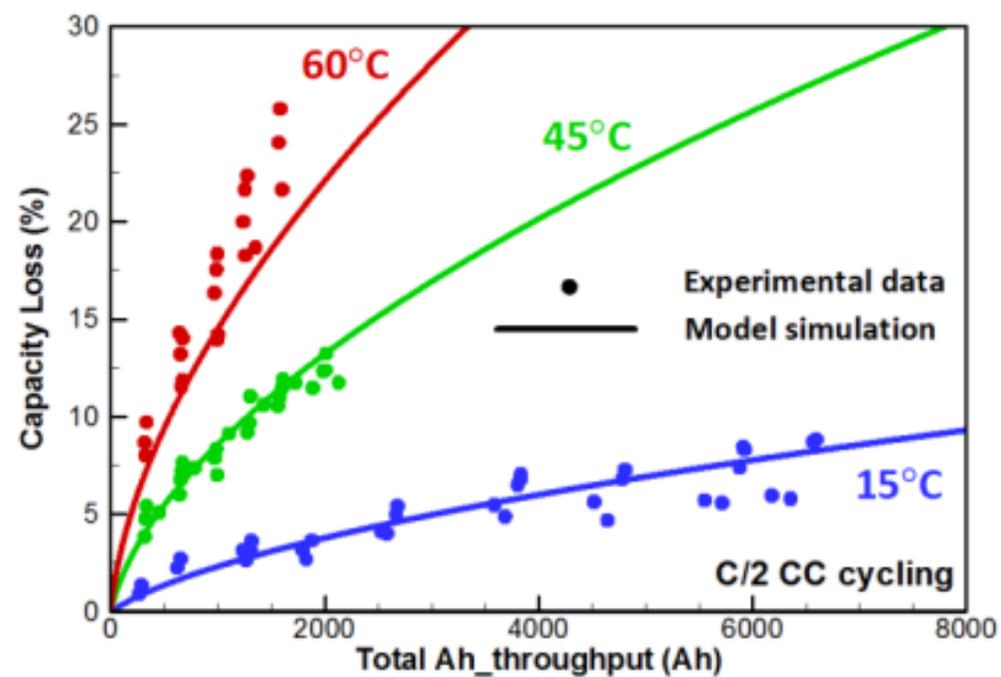


0°C下的动态脉冲模拟, 1.2Ah NMC/C电池

试验验证

■ 寿命模拟——LFP 电池

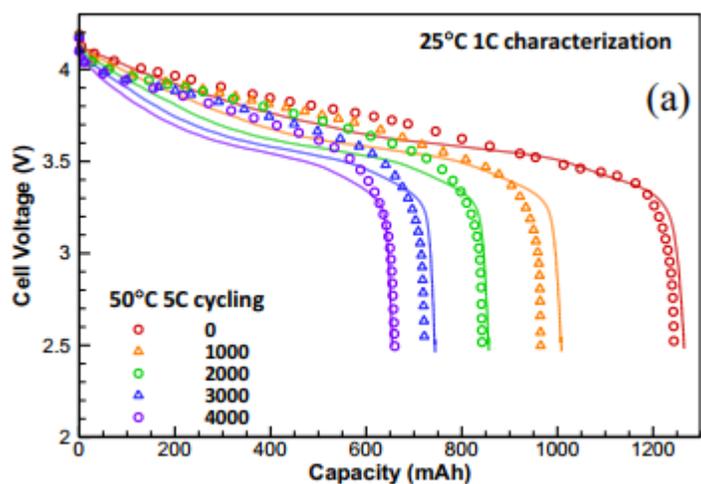
26650 LFP 电池循环寿命验证 (2C, 电压在2-3.6V之间)



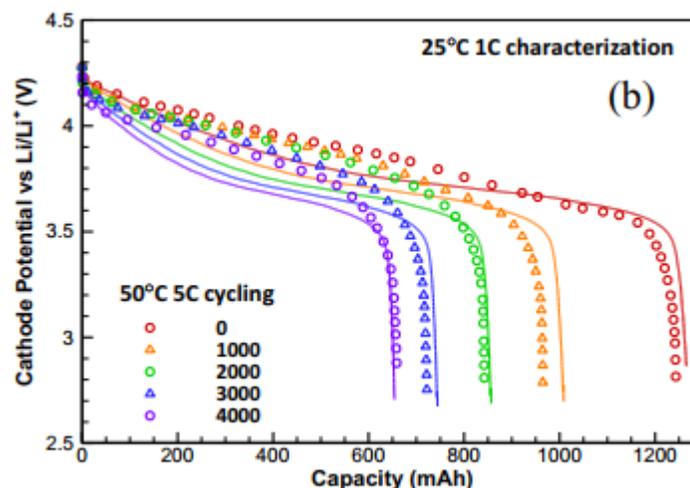
试验验证

■ 寿命模拟——NCM 电池

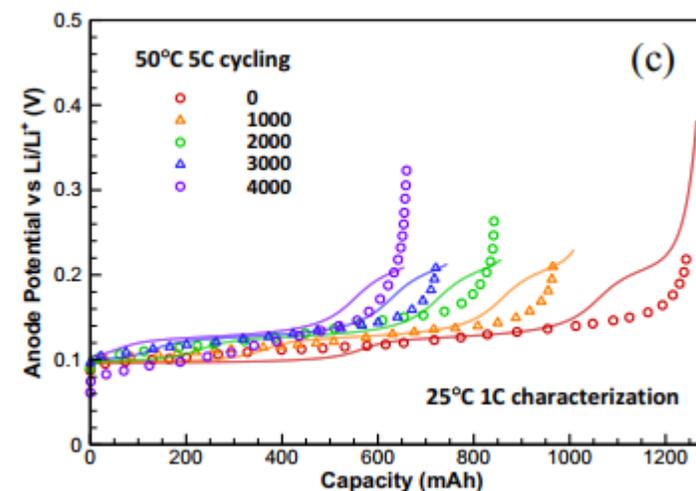
50°C下的 NMC/C 电池进行循环寿命 (5C) , 然后分别在不同循环下进行25°C下的恒流放电试验 (1C)



电池电压



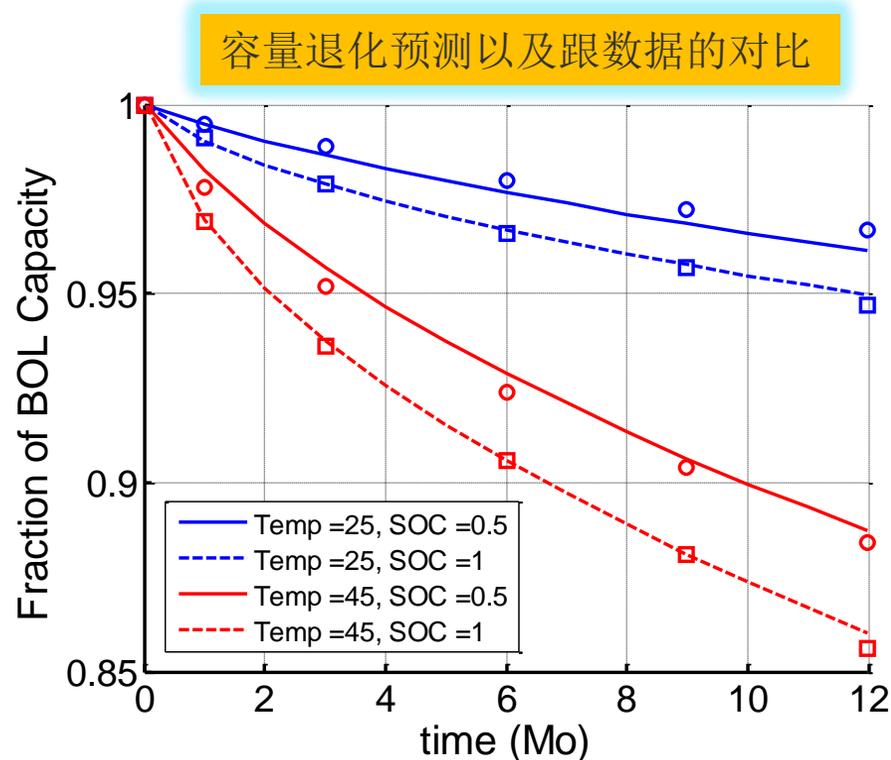
阴极电压
(三电极测量)



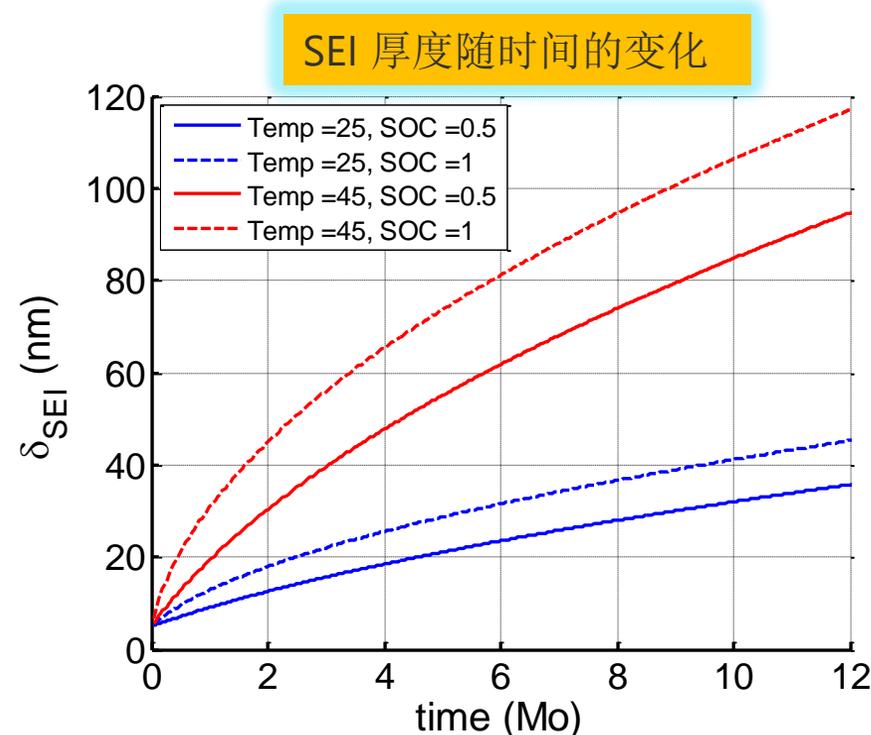
阳极电压
(三电极测量)

试验验证

■ 寿命模拟——容量退化



Data from M. Safari and Delacourt, *J. Electrochem. Soc.*, 159 (8) A1283-1291 (2012)

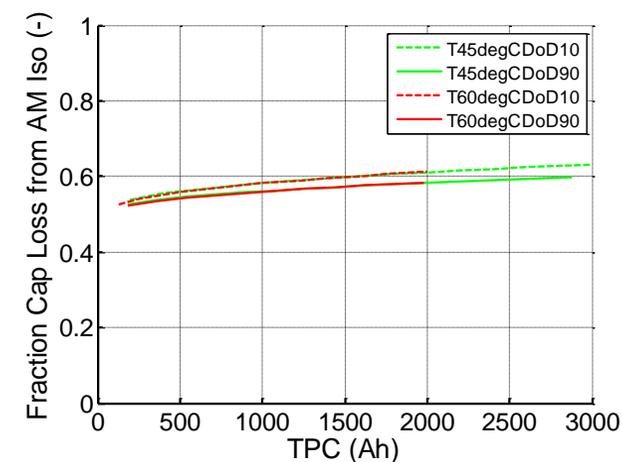
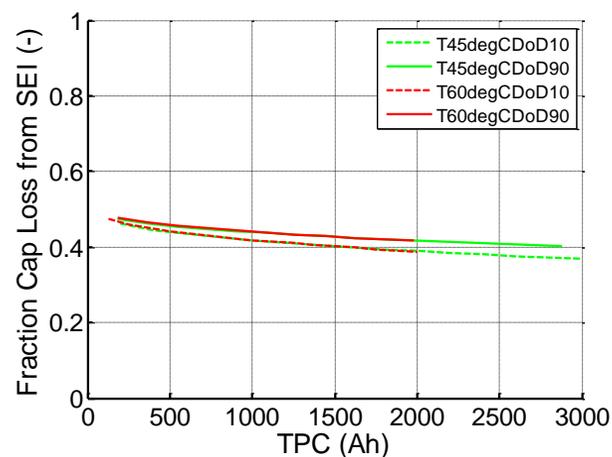
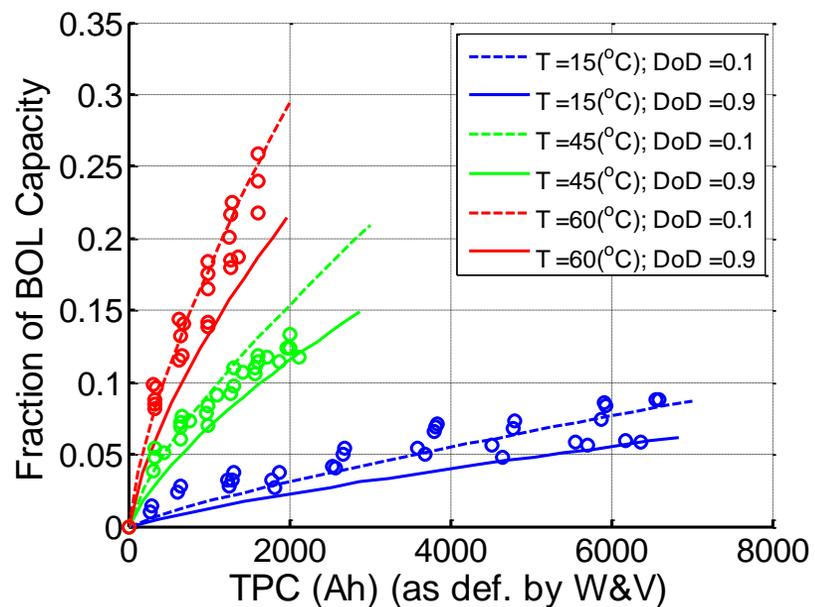


- AutoLion可以很好地预测不同存储温度下的容量退化
- 通过预测不同温度下 SEI 厚度随时间的增长, 可以对决定使用寿命的潜在机理进行研究

试验验证

■ 寿命模拟——容量退化

➤ Data from J.Wang, P. Liu, J. Hicks-Garner, E. Sherman, S. Soukiazian, M. Verbrugge, H. Tataria, J. Musser, P. Finamore, *J. Power Sources*, 196 3942-3948 (2011)



- 循环周期中容量的退化不仅仅由SEI的增长引起，还跟活性材料跟导电网路的绝缘有关（活性材料从粘合剂/填充剂脱离）
- 对于LFP/C 材料，退化容量的~50%是由活性材料的绝缘引起的（特别是在较高温度下），这说明粘合剂/填充剂的选择对于提高寿命非常重要。

目录

1. GT-Autolion 简介

2. 材料库

3. 控制方程及求解

- 基本控制方程及求解
- 膨胀模型
- 电池平衡
- 寿命模型
- 双电层模型
- 方程求解
- GT-Autolion-3D 求解方法

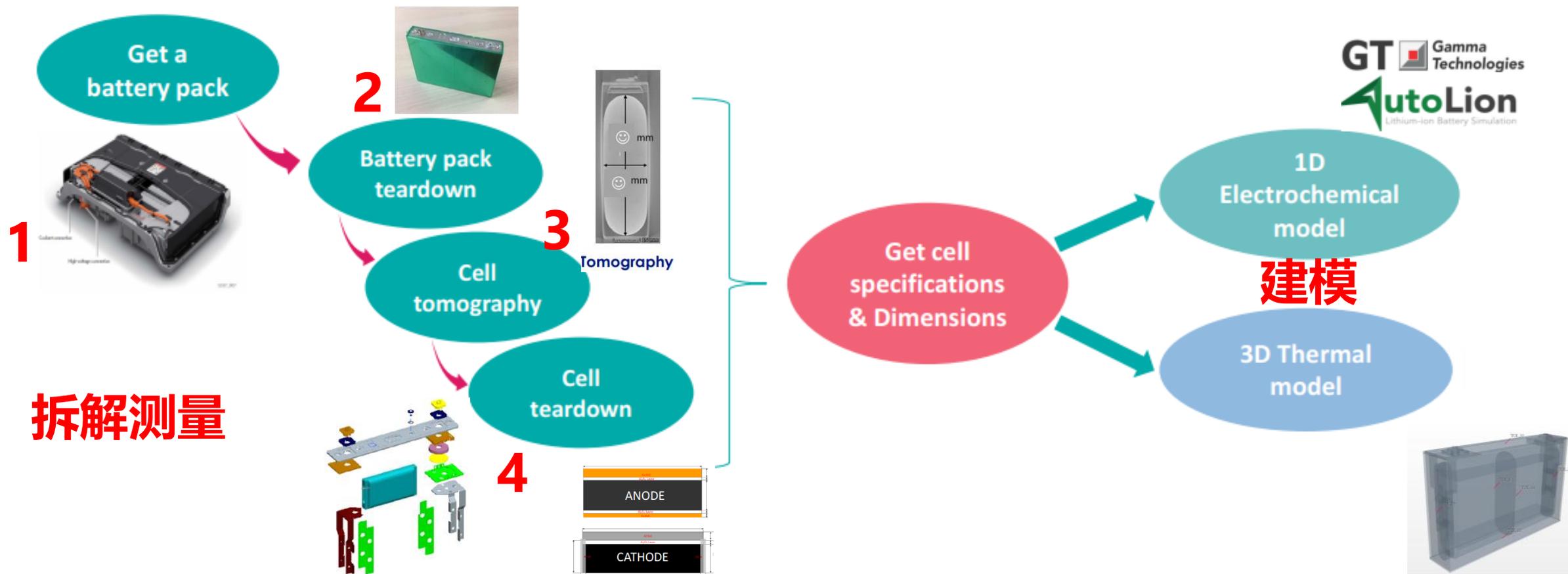
4. 试验验证

5. 标定方法 (自动)

6. 案例介绍

标定方法 (自动)

■ 如何建模

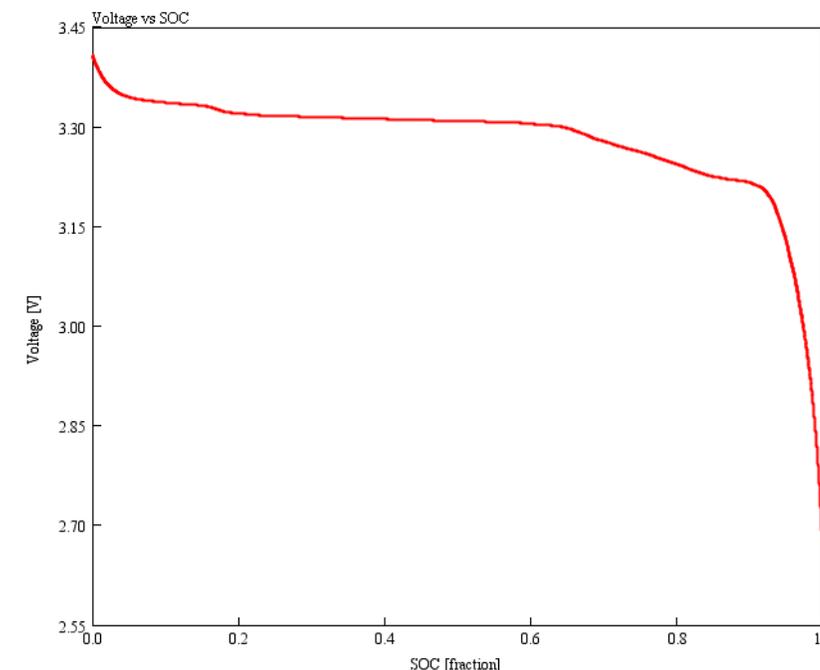


标定方法（自动）

■ OCV 标定

OCV曲线跟电池平衡非常相关。为了有效模拟电池，模型校准的第一步就是匹配电池的OCV曲线。这可以通过校准小电流放电的电压(i.e C/50)来进行。

- 重要因素:
 - 阴极载量
 - 阳极载量(N/P Ratio)
 - OCV @ 100% SOC
 - 材料的FCC & FDC

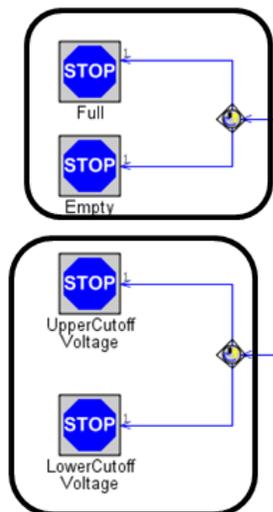


标定方法 (自动)

OCV 标定

满足以下条件停止模拟:

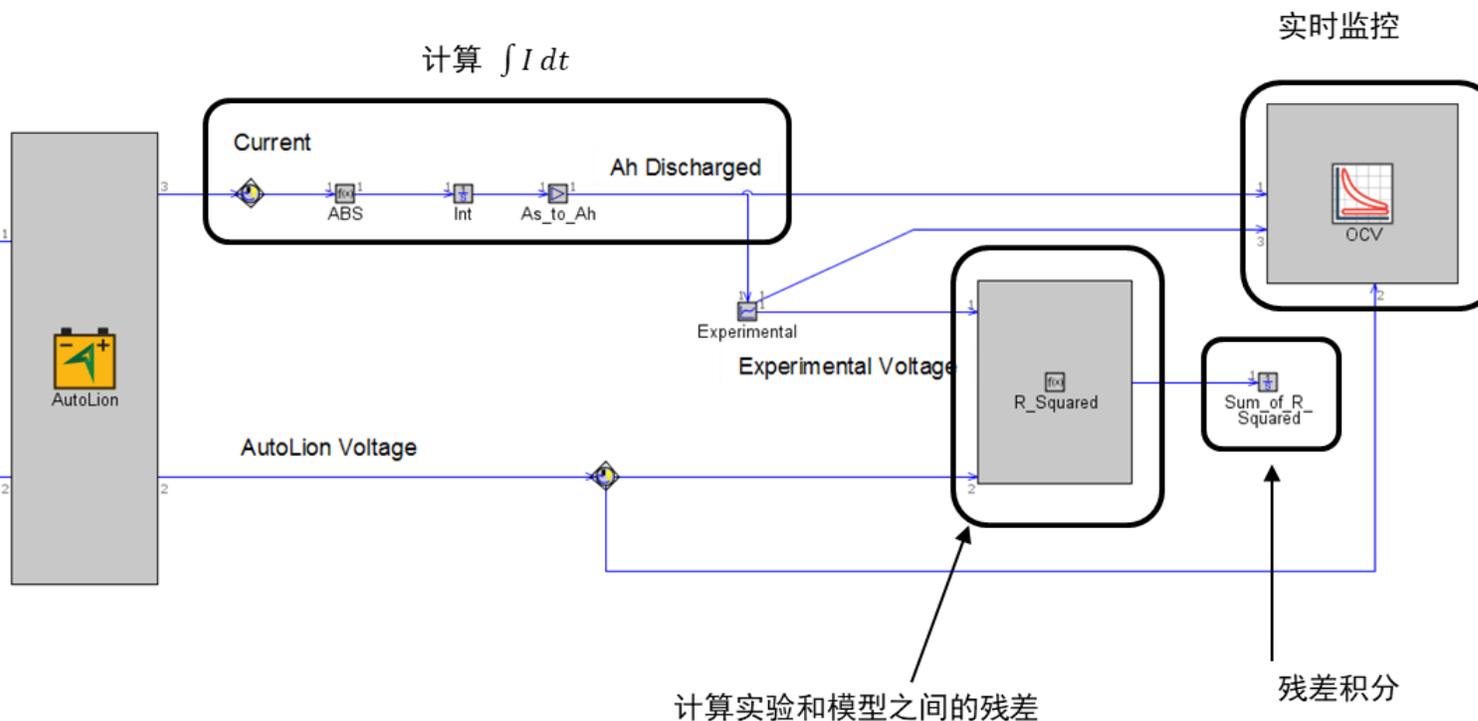
$$0 < SOC < 1??$$



满足以下条件停止模拟:

$$V > V_{Upper\ Cutoff}$$

$$V < V_{Lower\ Cutoff}$$

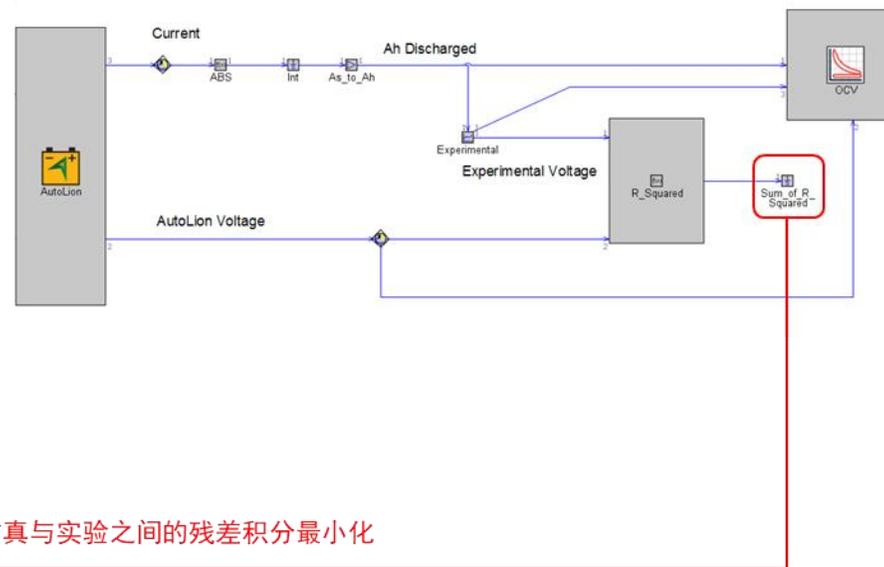
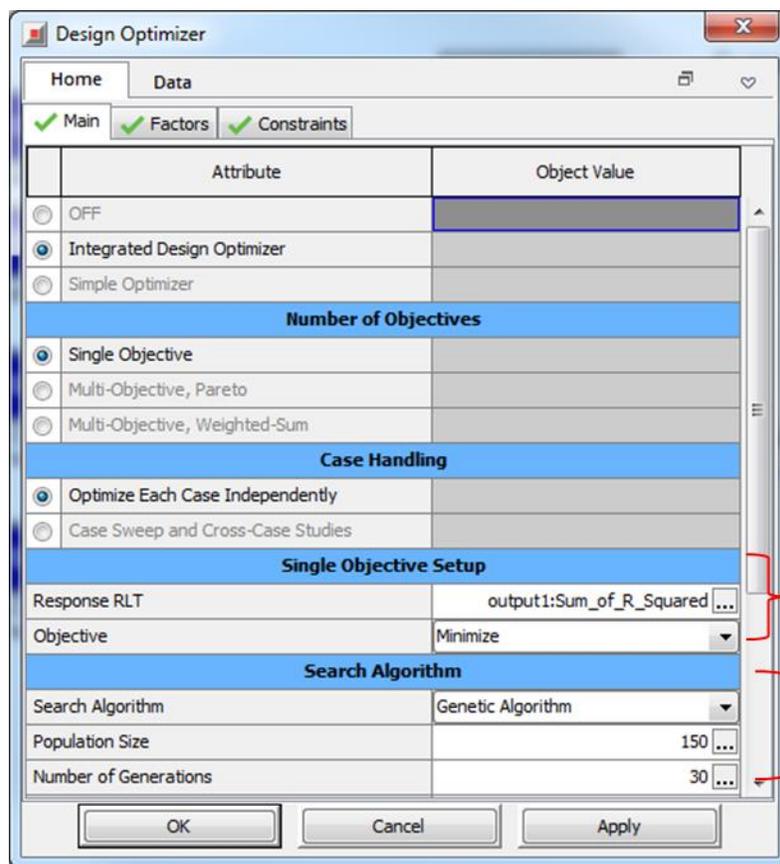


计算实验和模型之间的残差

残差积分

标定方法（自动）

OCV 标定

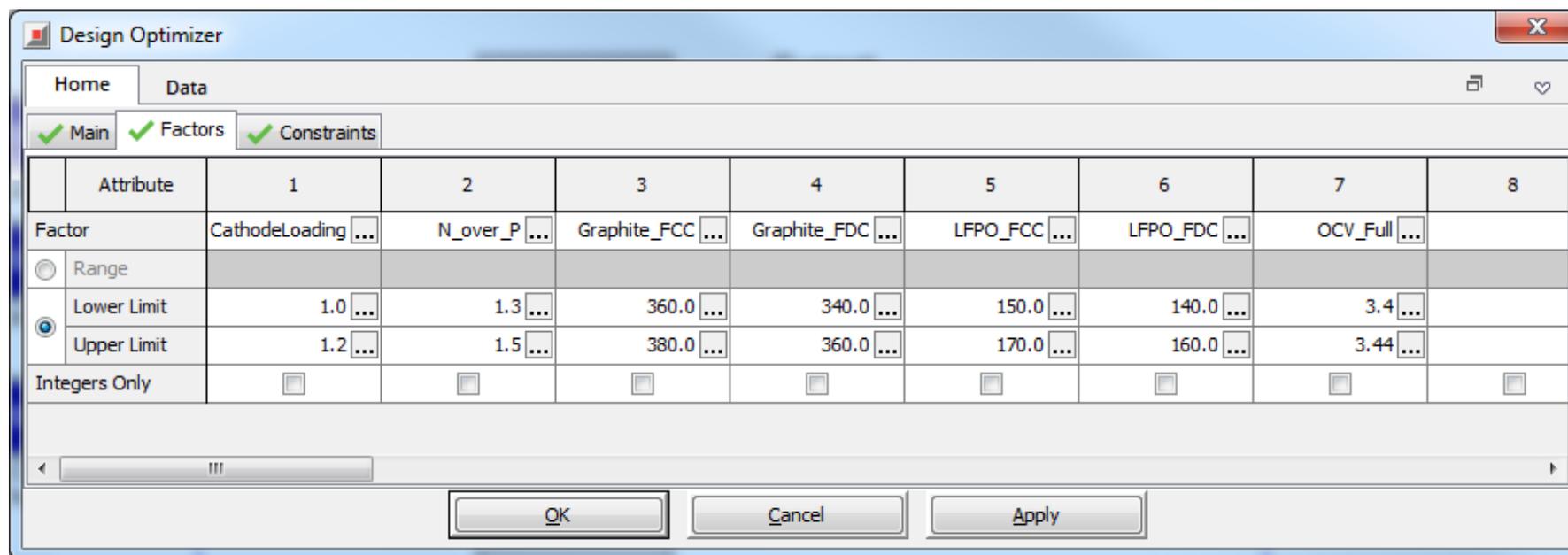


使仿真与实验之间的残差积分最小化

使用遗传算法

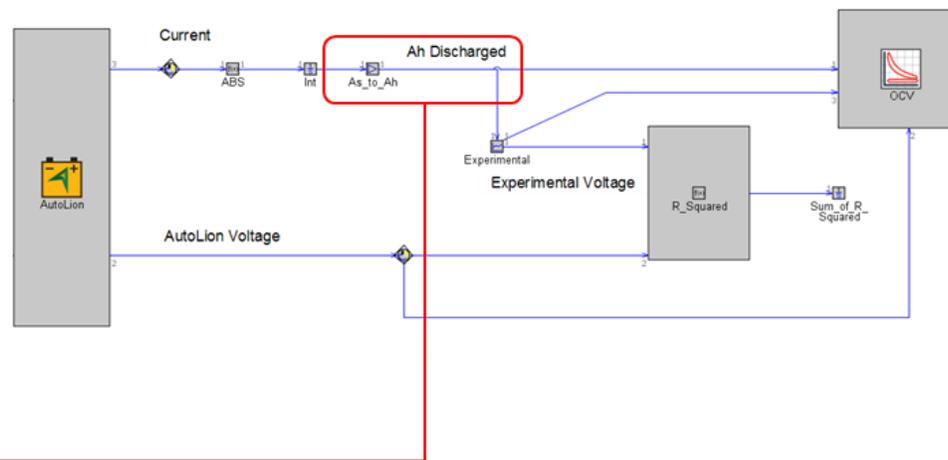
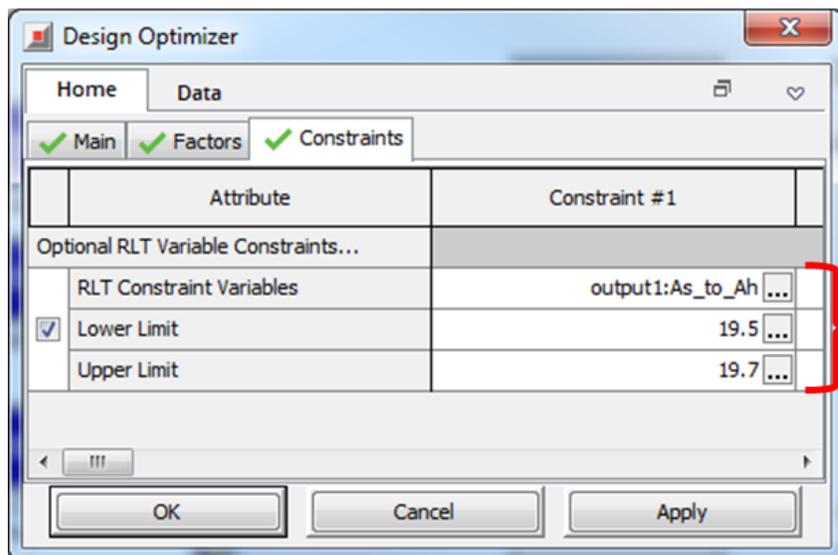
标定方法（自动）

■ OCV 标定



标定方法（自动）

■ OCV 标定



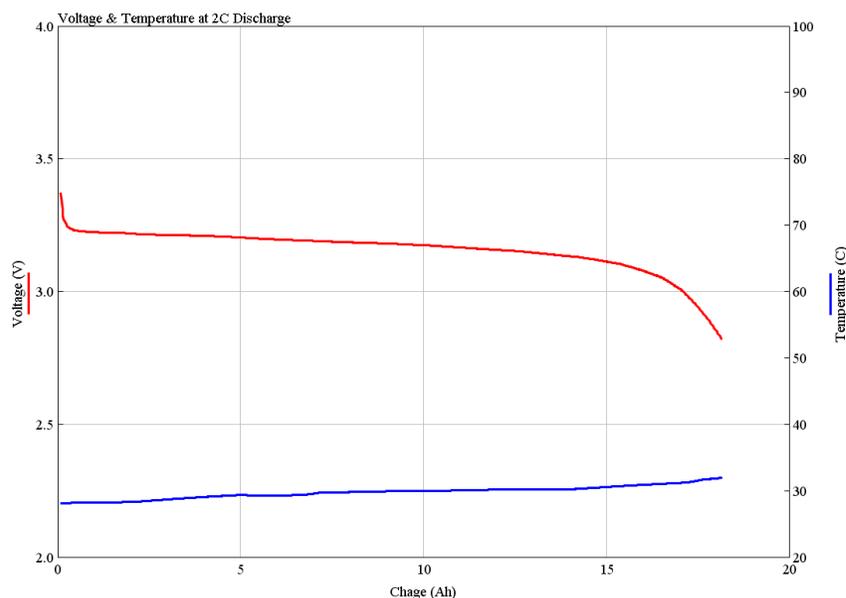
同时保证总容量在容许范围内

标定方法（自动）

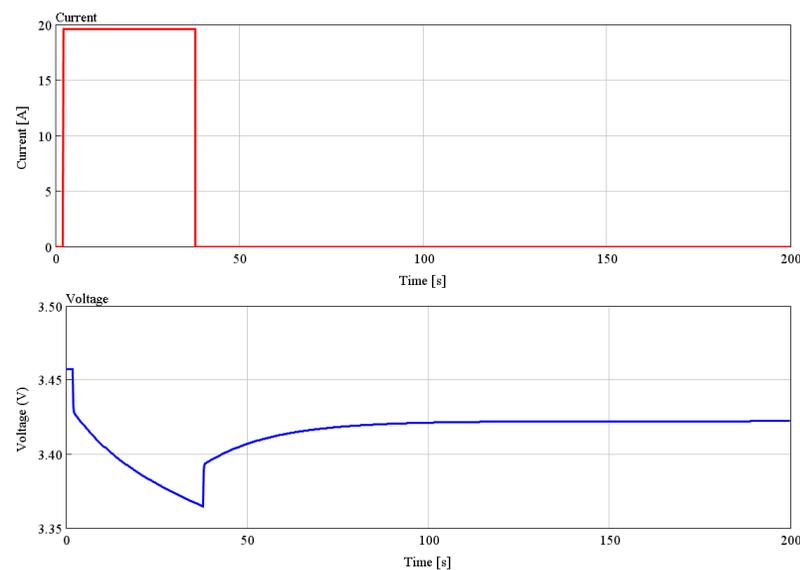
■ 动态模型标定

有了校准良好的OCV曲线，我们进行更多动态工况的校准。

恒流下的电压降和温升



电流脉冲下的电压响应



标定方法（自动）

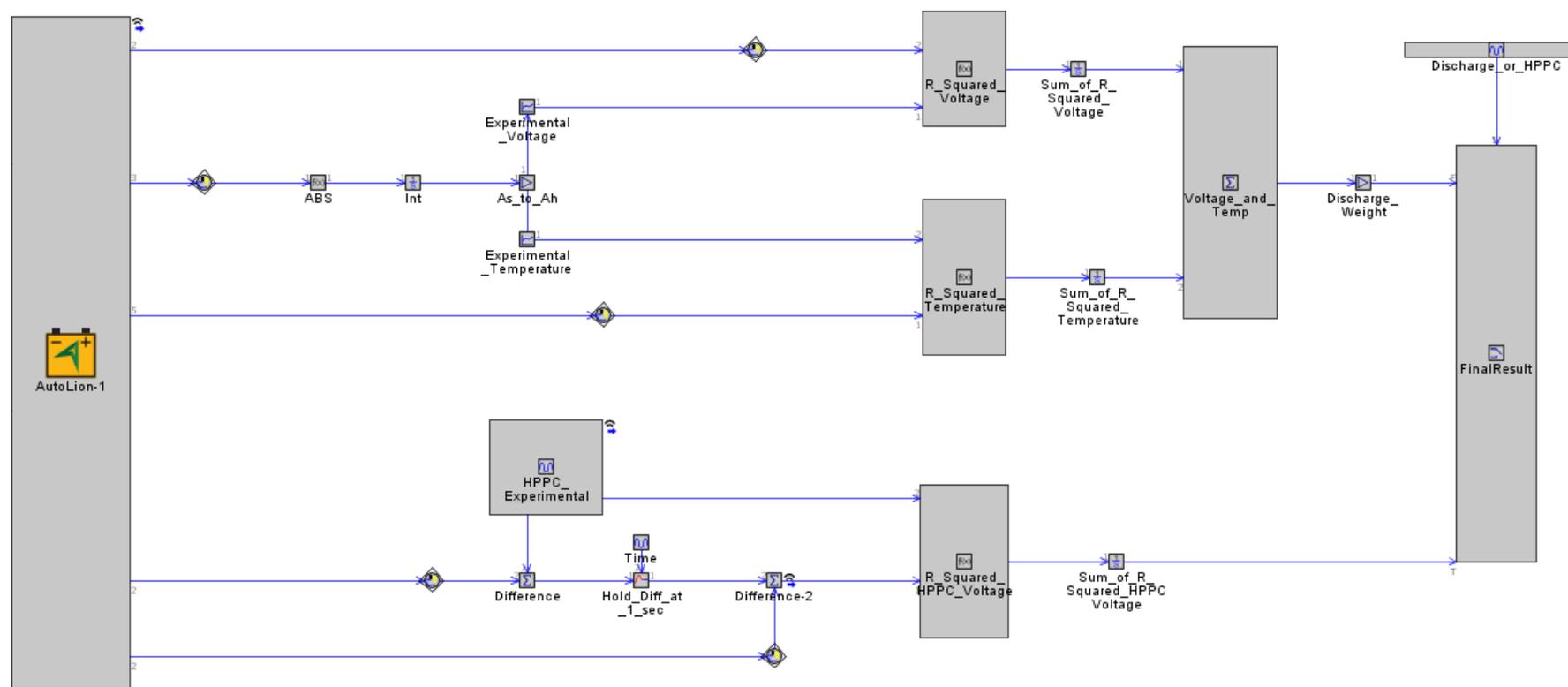
■ 动态模型标定

可标定的参数：

- 电池内的接触电阻
- 材料扩散系数(基于AutoLion的数据库调整)
- 材料尺寸
- 针对环境温度的换热系数
- 数值参数(Bruggeman 指数)
- 电解质属性(基于AutoLion的数据库调整)
 - 离子扩散系数
 - 离子电导率
 - 扩散电导率
- 隔板空隙率

标定方法（自动）

■ 动态模型标定



标定方法 (自动)

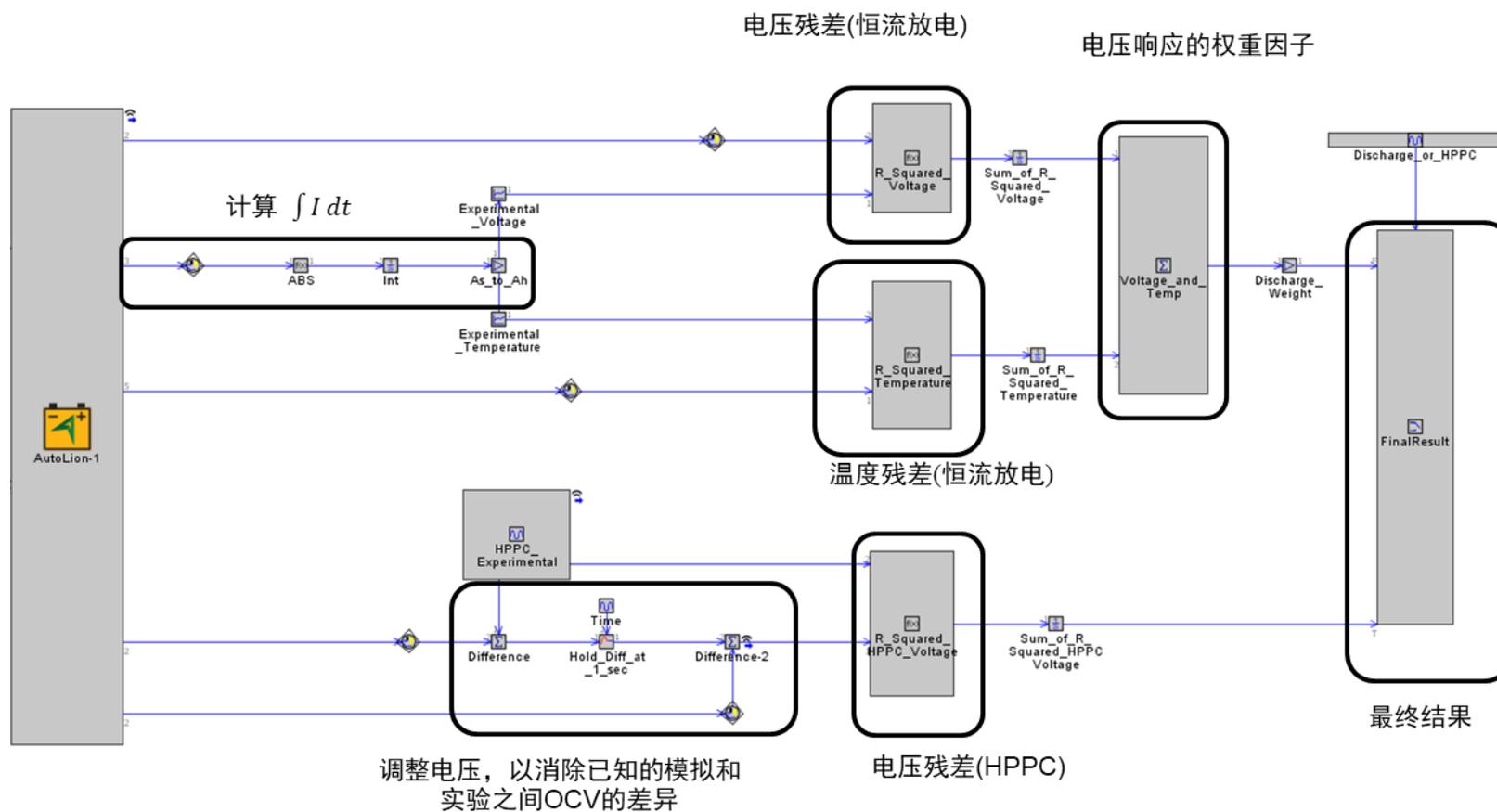
■ 动态模型标定

The screenshot shows the 'Case Setup' window for an 'AutoLion Cell' model. The 'Cases' section of the toolbar is active, and the 'Case Label' column in the table is highlighted. The table below details the configuration for 11 cases, including discharge and HPPC (High Power Pulse Charge) tests.

Parameter	Unit	Description	Case 1	Case 2	Case 3	Case 4	Case 5	Case 6	Case 7	Case 8	Case 9	Case 10	Case 11
Case On/Off		Check Box to Turn Case On	<input checked="" type="checkbox"/>										
Case Label		Unique Text for Plot Legends	2C_Discharge	HPPC 100%	HPPC 90%	HPPC 80%	HPPC 70%	HPPC 60%	HPPC 50%	HPPC 40%	HPPC 30%	HPPC 20%	HPPC 10%
D_or_HPPC		Discharge or HPPC (0=Discharge, 1=HPPC)	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
C_Rate		C-Rate	2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Initial_Temperature	C	Initial Temperature	28	28	28	28	28	28	28	28	28	28	28
HPPC_Experimental		Constant or Dependency Reference Object	0	HPPC_100	HPPC_90	HPPC_80	HPPC_70	HPPC_60	HPPC_50	HPPC_40	HPPC_30	HPPC_20	HPPC_10
Init_SOC	%	Initial State of Charge	100	100	90	80	70	60	50	40	30	20	10
TimeStep	s	Time Step Size	1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
SimDuration	s	Maximum Simulation Duration (Time)	3731	200	200	200	200	200	200	200	200	200	200
CaseWeight		Case Weight	0.003	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1

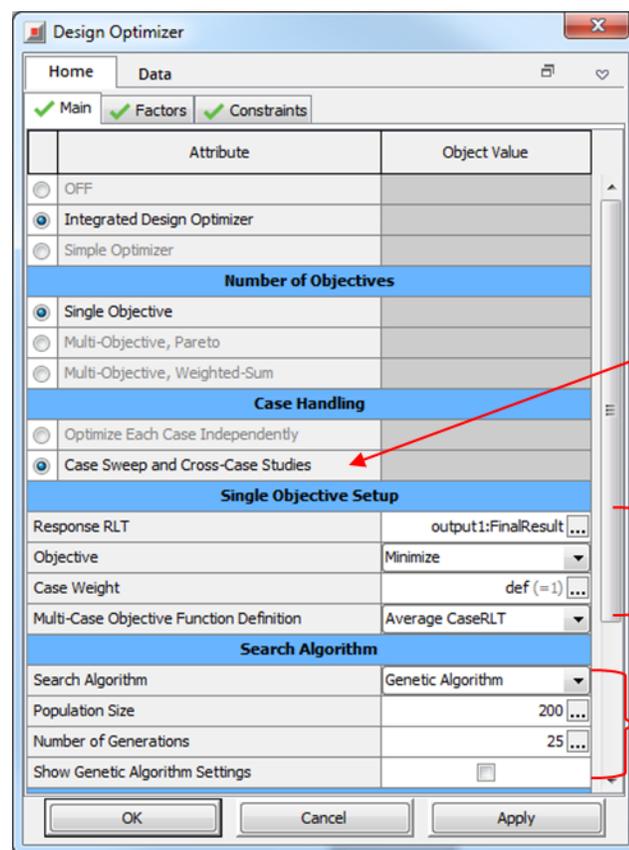
标定方法 (自动)

■ 动态模型标定



标定方法（自动）

■ 动态模型标定



使用 Case Sweep 选项，使得每个 design 运行每一个 case

最小化“Final Result”

使用遗传算法

目录

1. GT-Autolion 简介

2. 材料库

3. 控制方程及求解

- 基本控制方程及求解
- 膨胀模型
- 电池平衡
- 寿命模型
- 双电层模型
- 方程求解
- GT-Autolion-3D 求解方法

4. 试验验证

5. 标定方法 (自动)

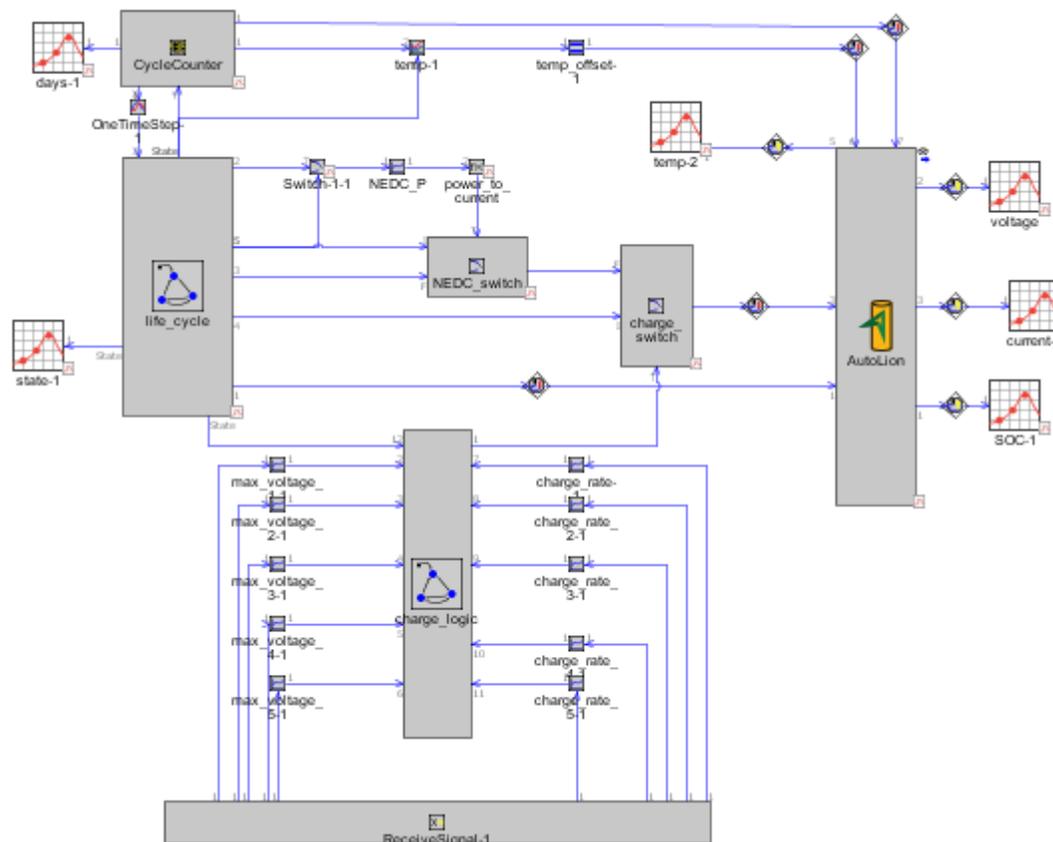
6. 案例介绍

案例介绍

■ 复杂工况下的电池寿命仿真

- 依温度变化的五阶段快充
- 一年中不断变化的环境温度

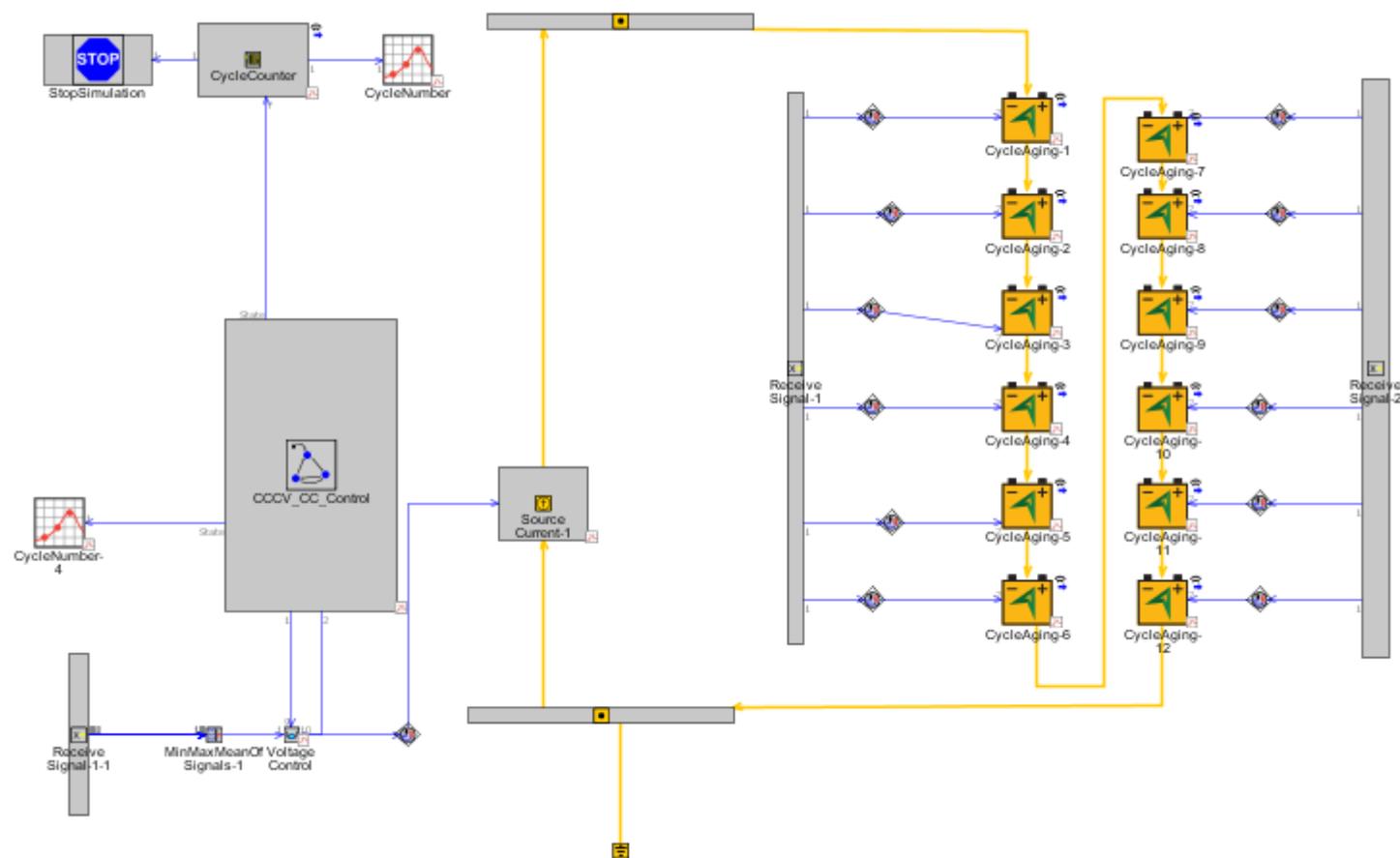
时间	使用场景	工况
周一到周日	行车1	等速18kW
	行车2	NEDC
	充电	快充
	停车	搁置
	行车3	等速15kW
	行车4	NEDC
	停车	搁置
	行车5	NEDC
	充电	快充
	停车	搁置



案例介绍

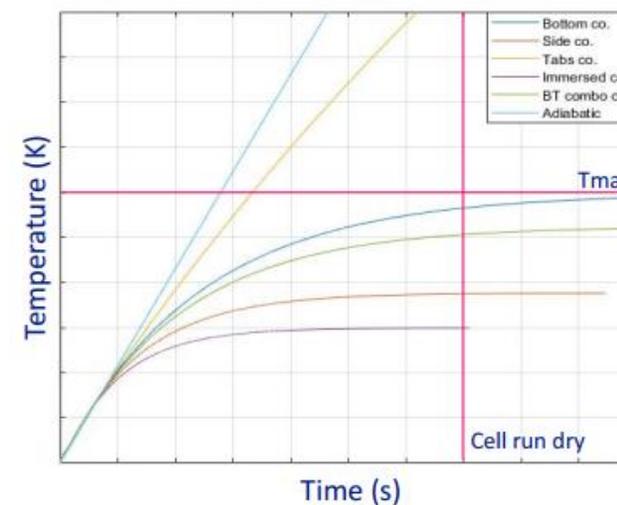
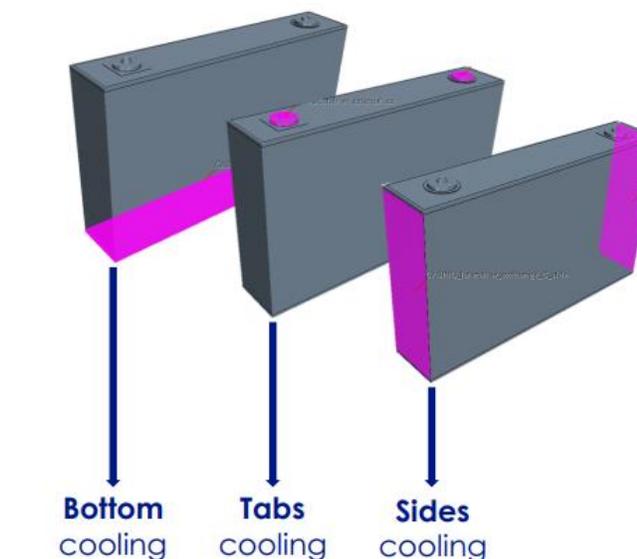
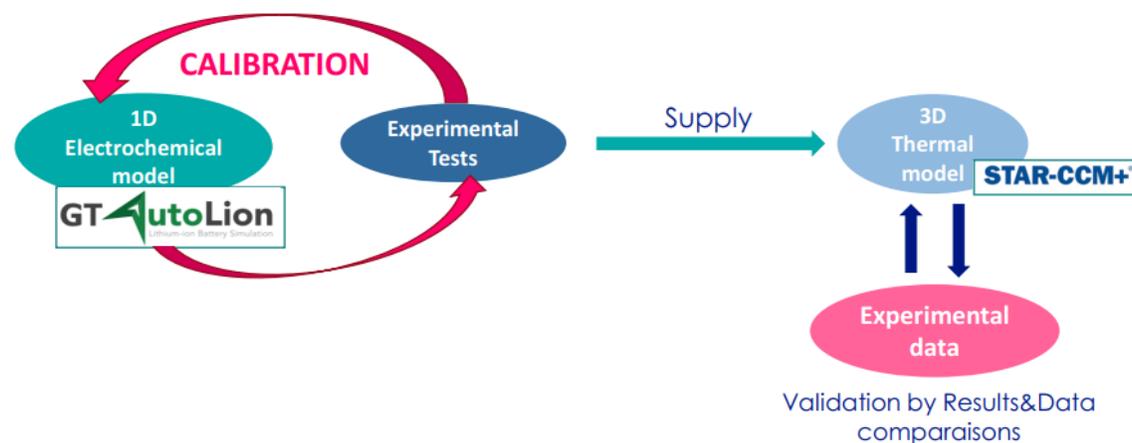
■ 模组/电堆仿真

- 电芯直接通过电路连接
(需要MP的license)



案例介绍——Faurecia

- 使用 GT-Autolion 和 STAR-CCM+分析电芯不同热管理策略的效果
 - GT-Autolion 进行不同倍率下恒流放电和HPPC下的电压和温度验证
 - GT-Autolion提供热源给 STAR-CCM+
 - STAR-CCM+ 测点温度验证
 - 分析 3 种热管理策略的效果

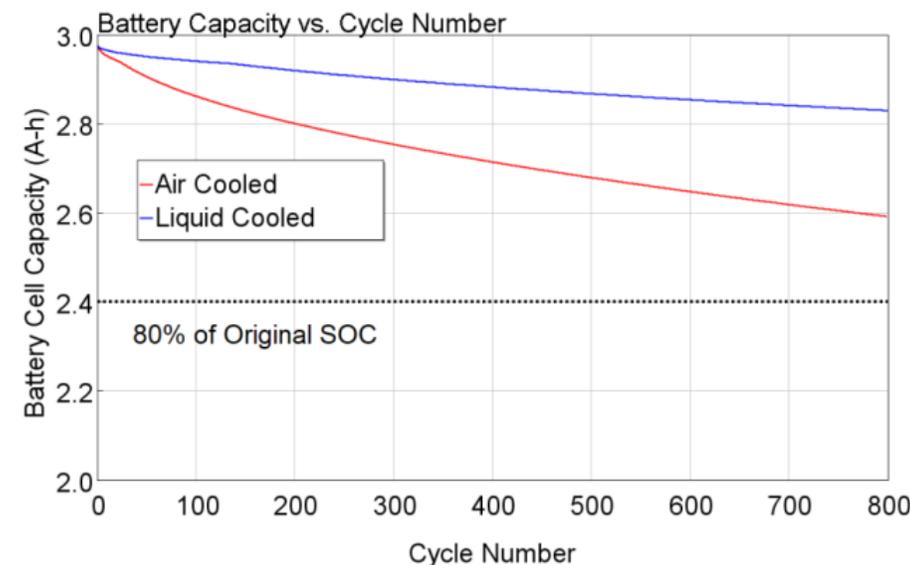
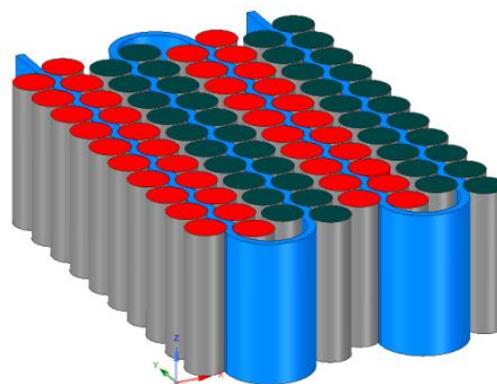
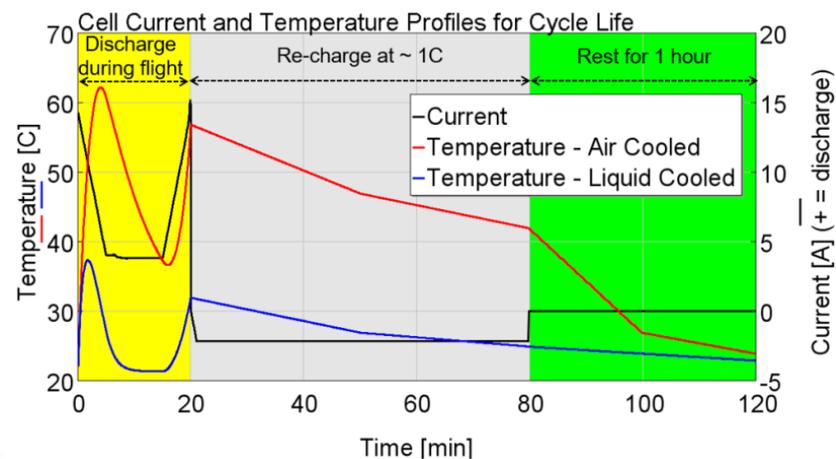
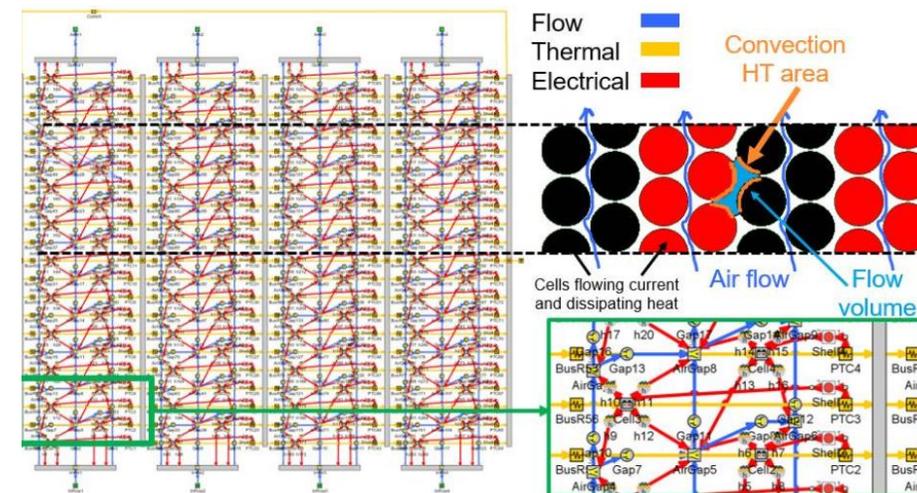


Cooling location ranking at the cell level

案例介绍—GAMMA

■ 使用 GT-Autolion 分析风冷和水冷两种热管理策略对电池循环寿命的影响

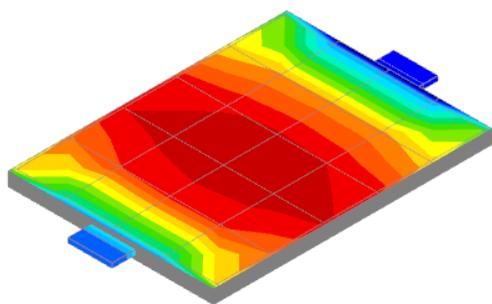
- GT-Autolion 电池校核
- 采用等效电路电池模型结合GT热管理计算得到风冷和水冷下的电池温度
- 将电池温度曲线作为GT-Autolion电池的温度边界
- 计算风冷和水冷下的电池循环寿命



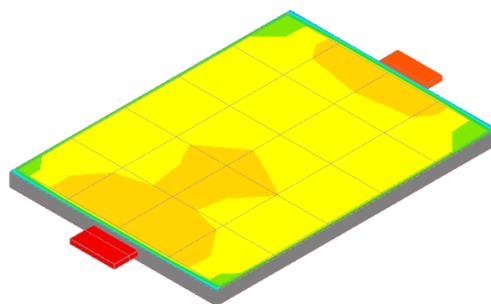
案例介绍

■ GT-Autolion-3D

- 电池冷却策略研究



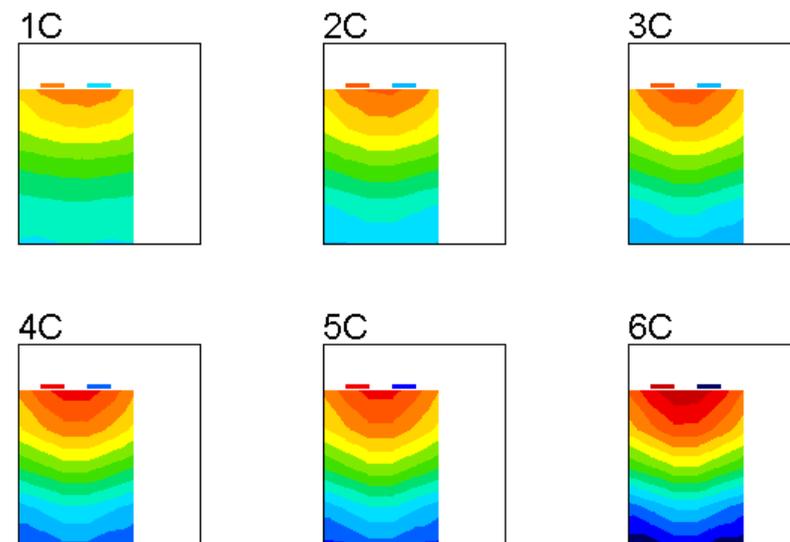
Tab Cooling



Surface Cooling

- 更极端工况下的预测

Current Distribution

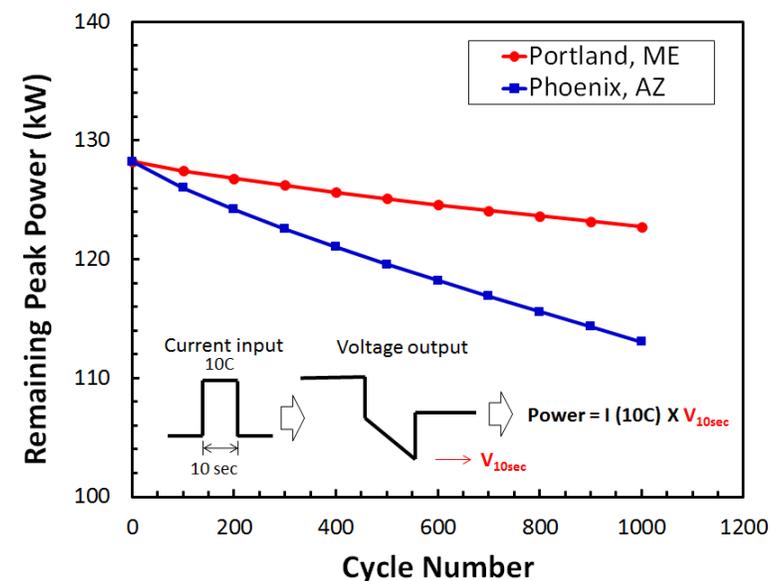
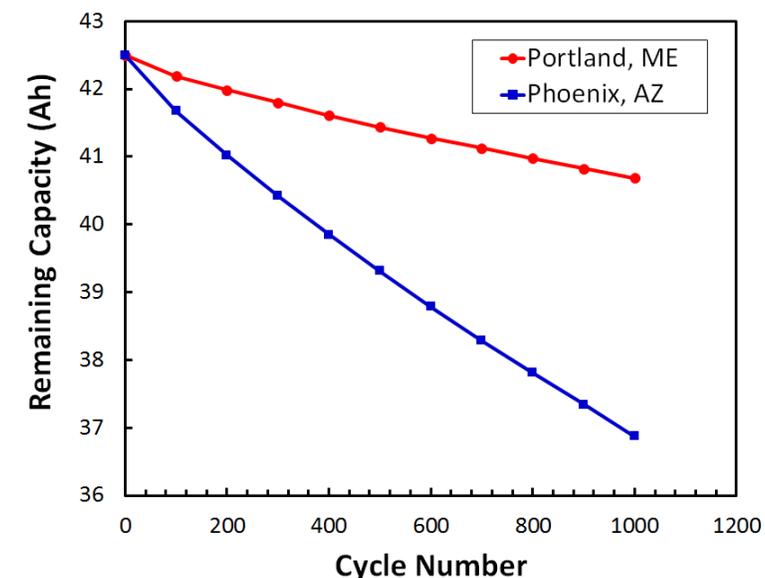
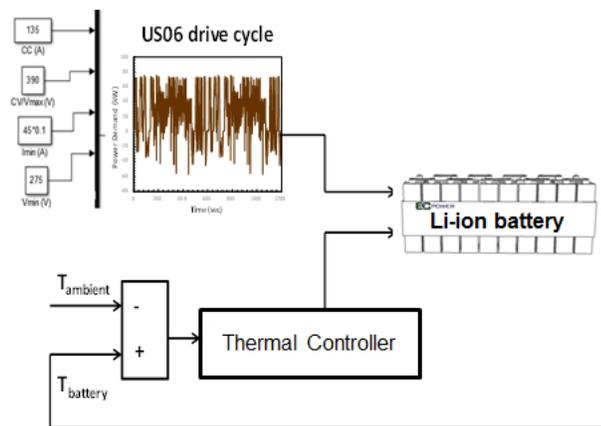


低温大倍率下的不均匀性 (如析锂)

案例介绍

■ 热管理对电池包寿命的影响

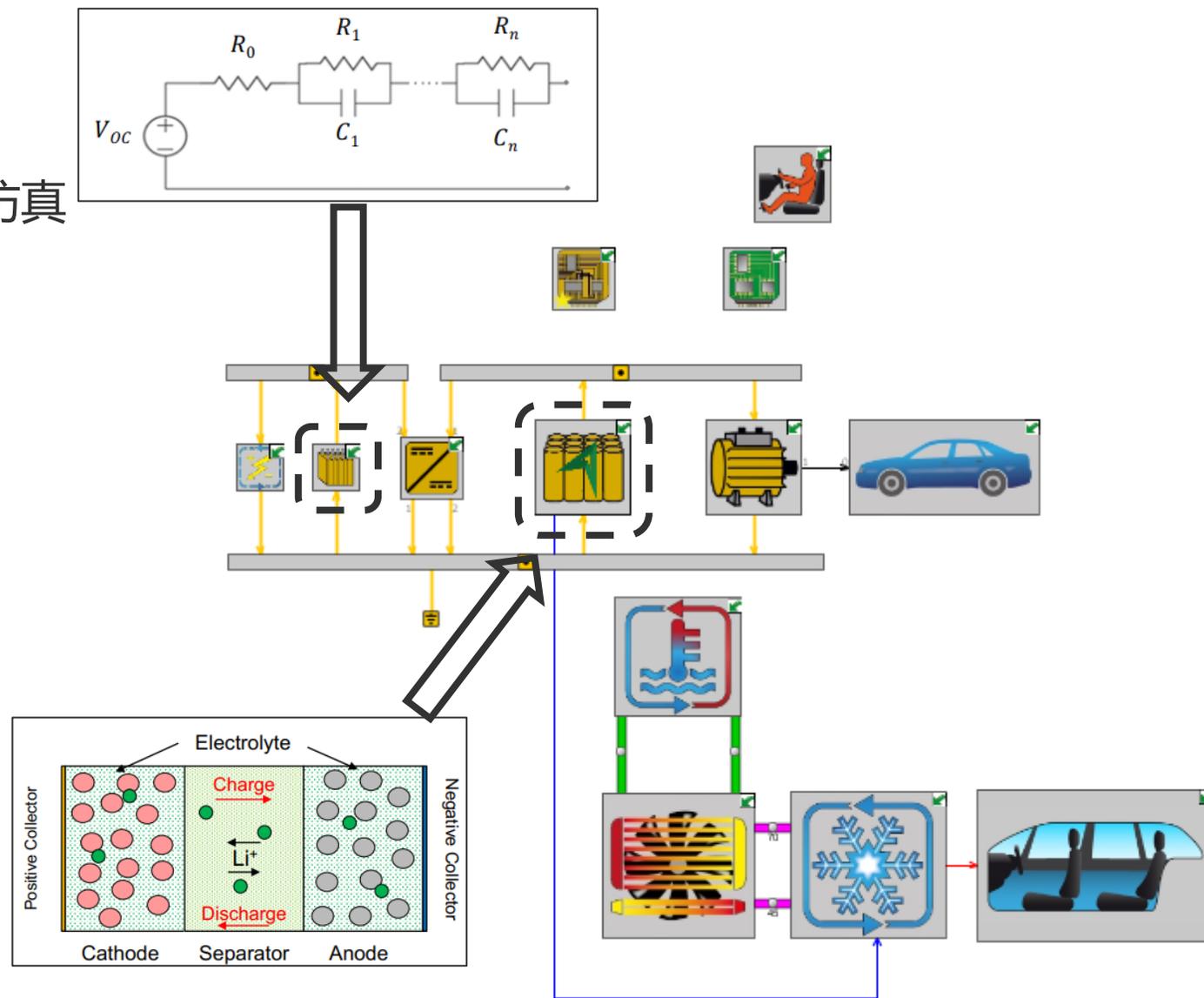
- 温度较高工况下的容量和峰值功率突降
- 1000循环之后
 - Phoenix (35°C): ~ 15%的容量突降, ~ 12%的峰值功率突降
 - Portland (10°C): ~ 5%的容量突降, ~ 3%的峰值功率突降
- 单电池和电池包设计 (电化学和热) 可进行即时修改并在几分钟内重新模拟完成



案例介绍

■ GT-AutoLion 耦合 GT-SUITE 进行整车仿真

- 实际车辆运行寿命分析
- BMS 系统设计验证 (如热管理、控制算法等)
- 主机厂可做电池参数辨识



感谢倾听
期待与您的进一步合作 😊



扫一扫关注官方微信
获得第一手下载资讯

联系我们

- web: <https://www.idaj.cn/>
- e-mail: support@idaj.cn
- Tel: 021-50588290; 010-65881497