



GSユアサによる蓄電池シミュレーション技術の開発の歩み

リチウムイオン電池の安全性シミュレーション技術

リチウムイオン電池は高エネルギー密度を有する特長があるが、設計や使用法が不適切な場合には不安全事故に至ることがある。そこで、電池および電池システムの安全性の確認のために、強制内部短絡試験や加熱試験などの安全性試験によって設計の妥当性が検証される。しかし、試験や実験では、条件を異ならせた膨大な数の事例を網羅的に検証することが困難であるため、シミュレーションを活用して製品開発を加速することが期待されている。

GS ユアサでは、電池および電池システムの開発と並行して、シミュレーション技術の開発に取り組んでいる。本稿では、リチウムイオン電池に内部短絡が生じた際の電池の挙動を模擬するためのモデル、ならびに電池のガス発生と周囲への影響を模擬するための技術コンセプトを紹介する。

1. 内部短絡シミュレーション

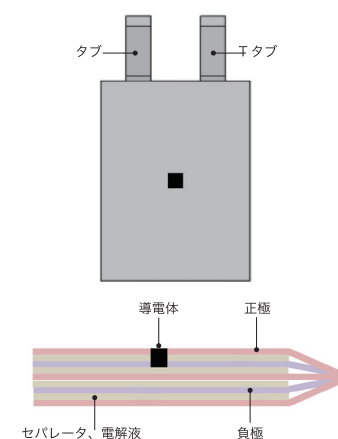
内部短絡とは、電池セルのケース内において正極と負極の間に短絡回路が形成される事象である。例えば、複数の正極板および負極板がセパレータを介して積層された電池（積層電池）において、金属片などの導電性の異物により一部の正極板と負極板の間で短絡が生じる場合がある（●図 1）。内部短絡が生じると、短絡部へ向かって短絡電流が集中する。短絡電流による発熱によって電池が局所的に高温になると、電極材料が分解反応や酸化反応などの発熱反応を起こす。内部短絡発生時のこうした電流挙動や発熱挙動を直感的に理解するために、シミュレーションを用いた可視化が有効である。

積層電池では、複数の正極板と複数の負極板とがそれぞれのタブを介して並列接続されており、内部短絡が生じるとそれらタブに電流が集中的に流れる。そのため、タブを介して短絡部に流れ込む短絡電流を計算することで、内部短絡発生時の挙動を模擬できる^{*1}。

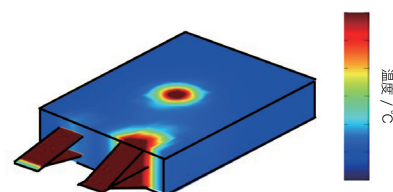
電気化学モデルと発熱反応モデルを、3次元形状で連成することにより、電流や SOC (State Of Charge)、発熱などを精緻に計算することができる。内部短絡発生から一定時間経過後の温度分布を●図 2 に示す。積層電池における短絡部とタブに電流が集中して発熱量が大きくなり、これらの箇所を起点にして発熱反応が生じる可能性が示唆される。シミュレーションにより、短絡部の位置を変えたり、短絡部の抵抗値を変えたりした場合の電池の挙動を、網羅的にかつ短時間で確認できる。

一枚の正極板と負極板とをセパレータを介して重ねた状態で巻回した電池（巻回電池）の場合は、巻回した電極板を仮想的に展開した状態において、短絡電流を計算する^{*1}。巻回電池においては電極板の巻回の周方向に電流が流れ、積層電池ほどにはタブに電流が集中しないことを、シミュレーションにより可視化することができる^{*2}。

●図 1 積層電池の内部短絡



●図 2 内部短絡発生時の温度分布



2. ガス発生シミュレーション

リチウムイオン電池において、内部短絡などにより局所的な過熱が生じると、材料の分解や燃焼を伴う複数の反応が進行する。これらの反応は多くの場合、発熱やガス発生を伴う。昇温による熱膨張とガス発生によって内圧が上がると、電池セルのケースに設けられたガス排出弁（●図 3）が開放し、ガスが周囲へ排出される。このガスは高温かつ高速であり、電池セル周囲（電池システム）への影響を把握することは重要である。

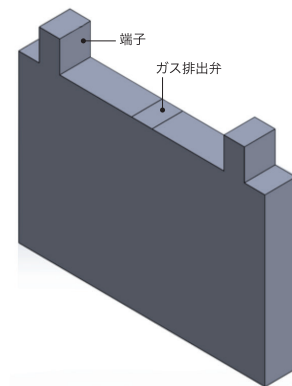
GS ユアサは、リチウムイオン電池の材料分解反応に伴うガス発生を、シミュレーションにより可視化することに成功した。材料分解反応の反応速度に基づいて、ガスの発生速度や熱量の発生速度がコンピュータにより計算される。ガスの発生速度は、材料分解反応の反応速度に比例するように計算される。^{※1}

●図 4 は、ある電池セルのガス排出弁の上方に他の電池セルを配置した組電池についての、シミュレーションによる可視化の一例である。はじめ発生ガスはケース内部にとどまるが、内圧がガス排出弁の開弁圧を超えると高温のガスがケース外に排出され、上方に位置する他の電池セルを加熱する。所定時間経過後には、上方の電池セルもガスを排出する。

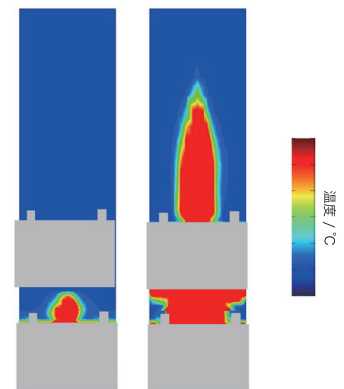
このようにシミュレーションによって、ある条件においてガスが発生するか否か、発生する場合のガスの温度および周囲の電池セルにおよぼす影響などを、実際にリチウムイオン電池を熱暴走させる試験をおこなうことなく、予測できる。これにより、安全性の確認に要する工数を大幅に軽減することができる。

本稿では、内部短絡やガス発生などの事象がリチウムイオン電池に生じた際の電池の挙動および周囲への影響をシミュレーションする手法を紹介した。GS ユアサは、幅広い電池シミュレーション技術を構築することで、より高安全、高性能な電池および電池システムの開発を推進していく。

●図 3 簡素化した電池セル



●図 4 ガス発生が伝播する様子



※1 日本特許第 6699795 号 (2019 年出願)

※2 GS Yuasa Technical Report 第 16 巻 第 2 号 2019 年