

为电池绘制“基因组”图谱

有很多方法可以绘制世界地图，从地理插图到我们周围生物的基因组。作为一名狂热的户外运动爱好者、徒步旅行者和山地自行车爱好者，美国国家可再生能源实验室(NREL)的科学家坎德勒·史密斯(Kandler Smith)自然也会将这些概念应用到他的研究中。史密斯领导了NREL的电池电化学储能计算模型，他设计了地图和模型，以提高我们对电池的理解。

史密斯说：“研究可持续能源是我帮助保护自然世界的一种方法。我喜欢设计和解决安全、可靠、高效的电网和交通脱碳电池的难题。”



史密斯在NREL领导了一个研究团队，专注于电池诊断实验，如X射线/CT，使用模型来帮助推进电池材料和设计。图片来源：Werner Slocum，NREL

为更好的电池建模

史密斯在NREL工作了15年，他是预测和延长锂离子电池寿命的专家，但电化学储能并非他一直以来的兴趣所在。史密斯的职业生涯始于机械工程，曾为军事项目研究喷气发动机，后来转向可再生能源。在宾夕法尼亚州立大学获得机械工程博士学位后，他加入了NREL。

“我最初对制造机器感兴趣，比如直升机，”史密斯说。但热力学和热传导学科激发了我对能源的兴趣，后来又对电化学产生了兴趣。我没有制造引擎，而是开始制造电脑模型，为可持续发展的未来设计更好的电池。”

坐落在阳光明媚的科罗拉多山麓，NREL提供了一个适合史密斯做研究的良好环境。在NREL，史密斯协助开发了許多电池模型，包括雄心勃勃的电池计算机辅助工程(CAEBAT)项目。

CAEBAT：电动汽车电池的计算机辅助工程

NREL 在美国能源部电动汽车电池计算机辅助工程 (CAEBAT) 项目中的工作正在加速开发并降低用于下一代电动汽车的高性能锂离子 (Li-ion) 电池的成本车辆 (EDV)。

CAEBAT 工程工具正在帮助电池设计人员、开发人员和制造商创建提高 EDV 性能和消费者吸引力并最终减少石油消耗和排放所需的先进电池技术。NREL 与工业界、大学和实验室合作伙伴合作，在 CAEBAT 项目的三个阶段开发计算机辅助工程方面的这些突破。



NREL 的 CAEBAT 工作分为三个阶段：CAEBAT-1、CAEBAT-2 和 CAEBAT-3。对于 CAEBAT-1，三个团队创建了用于电池组设计的软件工具，其中一些基于 NREL 的多尺度多域 (MSMD) 模型。在 CAEBAT-2 下，团队致力于优化 MSMD 速度并探索使用 CAEBAT 来提高电池安全性。目前正在进行的 CAEBAT-3 活动侧重于软件集成和微结构应用。

CAEBAT 项目支持了实验室和行业主导的软件程序的开发，目前全球数千名工程师使用该程序来了解电池电化学材料与大型系统的之间的复杂相互作用。为了表彰史密斯在电池寿命建模、预测、优化和设计方面的世界级贡献，NREL 最近授予了史密斯杰出研究人员称号。

储能是电气化交通运输和电网快速发展的关键，是未来脱碳的基石。公开交换电池数据对于实现能源目标是不可或缺的。

为了支持这一努力，史密斯正在帮助领导 NREL 和行业伙伴之间的新兴合作，以创建一个强有力的电池基因组图谱，以标准化数据格式，并促进整个电池社区的数据和软件的开放交换。该计划将支持未来利用机器学习和人工智能来简化电池研发的过程。

“计算建模使研究人员能够自动化和加速创新，”史密斯说。“与物理相关的人工智能有助于解决电池材料不完全了解的问题；或者因为数据集的规模太大，人类无法解决的问题。通过共同努力，我们可以加快前沿实验的步伐，增加对新的可持续技术的采用。”



对电池基因组的更全面的了解将加速储能项目的研究。虽然史密斯并没有直接从事新电池材料的发现，但他的建模工作通过提供电池在新材料下的性能的粗略预测，支持了下一代新发现的快速达成。此外，电池基因组项目将把电池

视为一个整体系统，从制造到健康预测，能够改进整个能源存储系统。

文章由美国能源部国家可再生能源实验室(NREL)提供。

(素材来自：NREL 全球储能网、全球锂电池网、新能源网综合)

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/184725.html>