



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2023년06월05일

(11) 등록번호 10-2540721

(24) 등록일자 2023년06월01일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

G01R 31/367 (2019.01) G01R 31/36 (2019.01)

G16C 20/30 (2019.01) G16C 20/60 (2019.01)

H01M 10/052 (2010.01) H01M 10/42 (2014.01)

(52) CPC특허분류

G01R 31/367 (2019.01)

G01R 31/3648 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2020-0183441

(22) 출원일자 2020년12월24일

심사청구일자 2020년12월24일

(65) 공개번호 10-2022-0092058

(43) 공개일자 2022년07월01일

(56) 선행기술조사문헌

US20190162791 A1\*

JP2014041816 A\*

KR1020200117794 A\*

Journal of The Electrochemical Society, 163

(7) A1429-A1441 (2016)\*

\*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자

연세대학교 산학협력단

서울특별시 서대문구 연세로 50 (신촌동, 연세대학교)

(72) 발명자

최정일

경기도 고양시 일산서구 대산로 142, 307동 1302호(주엽동, 문촌마을3단지아파트)

최윤영

경기도 고양시

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

민영준

전체 청구항 수 : 총 10 항

심사관 : 김기환

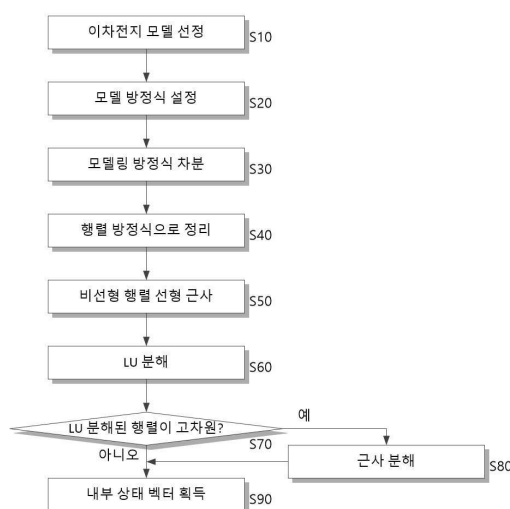
(54) 발명의 명칭 이차전지 시뮬레이션 방법 및 장치

## (57) 요약

본 발명은 시뮬레이션하고자 하는 이차전지에 대응하는 다수의 방정식을 포함하는 이차전지 방정식을 설정하는 단계, 설정된 이차전지 모델 방정식의 다수의 방정식 각각을 타임 스텝에 대한 차분 방정식으로 변환하는 단계, 변환된 다수의 차분 방정식을 획득해야하는 다음 타임 스텝에서의 리튬 이온 농도와 전위, 단위부피당 리튬이온

(뒷면에 계속)

대표도 - 도1



의 양을 원소로 포함하는 내부 상태 벡터와 비선형항 벡터를 포함하는 단일 행렬 방정식 형태로 정리하는 단계, 비선형항 벡터를 테일러 근사 기법에 따라 선형 근사하여, 단일 행렬 방정식에 선형 근사된 비선형항 벡터를 대입하는 단계, 내부 상태 벡터의 원소들 중 리튬 이온 농도와 전위, 단위부피당 리튬이온의 양을 구분하고, 구분된 리튬 이온 농도와 전위, 단위부피당 리튬이온의 양에 따라 근사된 비선형항 벡터를 대입된 단일 행렬 방정식을 LU 분해하는 단계 및 LU 분해된 단일 행렬 방정식을 계산하여, 내부 상태 벡터를 계산하는 단계를 포함하여, 저복잡도의 효율적인 연산 기법을 적용하여 저비용의 처리 성능이 낮은 하드웨어로도 이차전지의 내부 상태까지 시뮬레이션할 수 있는 이차전지 시뮬레이션 방법 및 장치를 제공할 수 있다.

(52) CPC특허분류

**G16C 20/30** (2019.02)

**G16C 20/60** (2019.02)

**H01M 10/052** (2013.01)

**H01M 2010/4271** (2013.01)

**김경현**

서울특별시 중구 동호로10길 30, 112동 1101호(신당동, 약수하이츠)

(72) 발명자

**김상현**

서울특별시 서대문구 가재울로4길 57-6, 204호(남가좌동)

**김성윤**

인천광역시 부평구 길주남로10번길 21, 102동 401호(부평동, 래미안부평)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호	1711111553
과제번호	2015R1A5A1009350
부처명	과학기술정보통신부
과제관리(전문)기관명	한국연구재단
연구사업명	선도연구센터지원사업
연구과제명	응용해석 및 계산 센터
기 여 율	1/2
과제수행기관명	연세대학교 산학협력단
연구기간	2020.03.01 ~ 2021.02.28

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호	1711115080
과제번호	2017R1E1A1A03070161
부처명	과학기술정보통신부
과제관리(전문)기관명	한국연구재단
연구사업명	기초연구사업-전략과제(산업수학)
연구과제명	유체-고체 해석기반 인공지능을 이용한 영상분석기법
기 여 율	1/2
과제수행기관명	이화여자대학교
연구기간	2020.03.01 ~ 2021.02.28

## 명세서

### 청구범위

#### 청구항 1

시뮬레이션하고자 하는 이차전지에 대응하는 다수의 방정식을 포함하는 이차전지 방정식을 설정하는 단계;

설정된 이차전지 모델 방정식의 다수의 방정식 각각을 타임 스텝에 대한 차분 방정식으로 변환하는 단계;

변환된 다수의 차분 방정식을 획득해야하는 다음 타임 스텝에서의 리튬 이온 농도와 전위, 단위부피당 리튬이온의 양을 원소로 포함하는 내부 상태 벡터와 비선형항 벡터를 포함하는 단일 행렬 방정식 형태로 정리하는 단계;

상기 비선형항 벡터를 테일러 근사 기법에 따라 선형 근사하여, 단일 행렬 방정식에 선형 근사된 비선형항 벡터를 대입하는 단계;

상기 내부 상태 벡터의 원소들 중 리튬 이온 농도와 전위, 단위부피당 리튬이온의 양을 구분하고, 구분된 리튬이온 농도와 전위, 단위부피당 리튬이온의 양에 따라 근사된 비선형항 벡터를 대입된 단일 행렬 방정식을 LU 분해하는 단계; 및

LU 분해된 단일 행렬 방정식을 계산하여, 상기 내부 상태 벡터를 계산하는 단계를 포함하는 이차전지 시뮬레이션 방법.

#### 청구항 2

제1항에 있어서, 상기 이차전지 방정식을 설정하는 단계는

시뮬레이션하고자 하는 이차전지에 대응하는 이차전지 방정식으로 상기 이차전지의 전극 내 고체 입자 내부의 농도 분포를 해석하기 위한 수송 방정식을 수학식

$$\frac{\partial c_{1,k}}{\partial t} = D_{1,k}^{\text{eff}} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial c_{1,k}}{\partial r} \right)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial c_{1,k}^{\text{avg}}}{\partial t} = -3 \frac{j_k}{R_p}, c_{1,k}^* - c_{1,k}^{\text{avg}} = -\frac{R_p}{D_{1,k}^{\text{eff}}} \frac{j_k}{5}$$

(여기서  $c_{1,k}$ 는 고체 입자 내부에서 도메인 영역(k)에 따른 리튬이온 농도,  $c_{1,k}^*$ 는 고체 입자 표면에서 도메인 영역(k)에 따른 리튬이온 농도,  $c_{1,k}^{\text{avg}}$ 는 고체 입자 내부에서 도메인 영역(k)에 따른 평균 리튬이온 농도, t는 타임 스텝에 따른 현재 시간,  $D_{1,k}^{\text{eff}}$ 는 고체 입자에서 도메인 영역(k)에 따른 확산 계수, r은 구형 좌표계,  $j_k$ 는 도메인 영역(k)에 따른 고체 입자 표면에서 전기화학 반응으로 인한 단위부피당 리튬이온의 양,  $R_p$ 는 고체 입자의 반지름을 나타낸다.)

으로 설정하는 단계;

전극 내 전해질 내부 농도 분포를 해석하기 위한 수송 방정식을 수학식

$$\varepsilon_k \frac{\partial c_{2,k}}{\partial t} = \nabla \cdot (D_{2,k}^{\text{eff}} \nabla c_{2,k}) + a_k(1 - t_+)j_k$$

(여기서  $\varepsilon_k$ 는 도메인 영역(k)에 따른 공극률을 나타내고,  $c_{2,k}$ 는 액체 상태에서 도메인 영역(k)에 따른 리튬이온 농도,  $D_{2,k}^{\text{eff}}$ 는 액체 상태에서 도메인 영역(k)에 따른 확산 계수,  $a_k$ 는 도메인 영역(k)에 따른 다공성 전극의 활성화 면적 비율,  $t_+$ 는 수율을 나타낸다.)

에 따라 설정하는 단계;

전극 내부 고체 입자 간의 전위 분포를 해석하기 위한 전하 보존 방정식을 수학식

$$\nabla \cdot (\sigma_k^{eff} \nabla \phi_{1,k}) = a_k F j_k$$

(여기서  $\sigma_k^{eff}$  는 도메인 영역(k)에 따른 고체상의 유효전도도,  $\phi_{1,k}$ 는 고체 입자 내부에서 도메인 영역(k)에 따른 전위를 나타내며, F는 패러데이 상수를 나타낸다.)

에 따라 설정하는 단계;

전극 내부 전해질 내부의 전위 분포를 해석하기 위한 전하 보존 방정식을 수학식

$$\nabla \cdot (\kappa_k^{eff} \nabla \phi_{2,k}) - \nabla \cdot \left[ \kappa_k^{eff} \frac{2RT}{F} \nabla (\ln c_{2,k}) \right] = -a_k F j_k$$

(여기서  $\kappa_k^{eff}$  는 도메인 영역(k)에 따른 전해질상의 유효전도도,  $\phi_{2,k}$ 는 액체 상태에서 도메인 영역(k)에 따른 전위, R은 기체 상수 및 T는 온도를 나타낸다.)

으로 설정하는 단계; 및

전극 반응에서 전자교환 과정의 속도와 전극위치의 관계를 나타내는 버틀러 볼머 방정식을 수학식

$$j_k = 2k_k^{eff} \sqrt{c_{2,k}(c_{1,k}^{max} - c_{1,k}^*)c_{1,k}^*} \sinh \left[ \frac{0.5R}{FT} \eta_k \right]$$

(여기서  $c_{1,k}^{max}$  는 고체 입자 내부에서 도메인 영역(k)에 따른 최대 리튬이온 농도,  $\eta_k$ 는 도메인 영역(k)에 따른 활성화 과전위를 나타낸다.)

으로 설정하는 단계를 포함하는 이차전지 시뮬레이션 방법.

### 청구항 3

제2항에 있어서, 상기 차분 방정식으로 변환하는 단계는

5개의 이차전지 방정식 각각을 타임 스텝(t, t+1)에 따른 시간차( $\Delta t$ )에서의 변화로 표현되도록 차분하여, 5개의 차분 방정식을

수학식

$$\frac{c_{1,k}^{*,t+1} - c_{1,k}^{*,t}}{\Delta t} = - \left( \frac{1}{\Delta t} \frac{R_p}{5D_{1,k}^{eff}} + \frac{3}{2R_k} \right) j^{t+1} - \left( - \frac{1}{\Delta t} \frac{R_p}{5D_{1,k}^{eff}} + \frac{3}{2R_k} \right) j^t$$

과 수학식

$$\epsilon_k \frac{c_{2,k}^{t+1} - c_{2,k}^t}{\Delta t} = \frac{1}{2} \mathcal{L}_{D_{2,k}^{eff}}(c_{2,k}^{t+1} + c_{2,k}^t) + a_k(1 - t_+) \frac{1}{2} (j_k^{t+1} + j_k^t)$$

과 수학식

$$\mathcal{L}_{\sigma_k^{eff}} \Phi_{1,k}^{t+1} - a_k F j_k^{t+1} = 0$$

과 수학식

$$\mathcal{L}_{\kappa_k^{eff}} \Phi_{2,k}^{t+1} - \mathcal{L}_{\kappa_k^{eff}} \ln c_{2,k}^{t+1} + a_k F j_k^{t+1} = 0$$

및 수학식

$$j^{t+1} - 2k_k^{\text{eff}} \sqrt{c_{2,k}^{t+1}(c_{1,k}^{\text{max}} - c_{1,k}^{*,t+1})c_{1,k}^{*,t+1}} \sinh \left[ \frac{0.5R}{FT} (\Phi_{1,k}^{t+1} - \Phi_{2,k}^{t+1} - U_{1,k}^{t+1}) \right] = 0$$

(여기서  $\mathcal{L}_{D_{2,k}}^{\text{eff}}$  와  $\mathcal{L}_{\sigma_k}^{\text{eff}}$  및  $\mathcal{L}_{\kappa_k}^{\text{eff}}$  는 각각 고체 입자에서 도메인 영역(k)에 따른 확산 계수( $D_{2,k}^{\text{eff}}$ ), 도메인 영역(k)에 따른 고체상의 유효전도도( $\sigma_k^{\text{eff}}$ ) 및 도메인 영역(k)에 따른 전해질상의 유효전도도( $\kappa_k^{\text{eff}}$ )에 대한 차분화된 연산자로,  $\mathcal{L}_G = \frac{\partial}{\partial x} (G \frac{\partial}{\partial x})$ 의 형식으로 획득됨)

으로 획득하는 이차전지 시뮬레이션 방법.

#### 청구항 4

제3항에 있어서, 상기 단일 행렬 방정식 형태로 정리하는 단계는

상기 5개의 차분 방정식을 내부 상태 벡터( $M^{t+1} = [c_1^{t+1} c_2^{t+1} \Phi_1^{t+1} \Phi_2^{t+1} j^{t+1}]^T$ )와 비선형항 벡터( $U(M^{t+1})$ )와 타임 스텝(t+1)에서의 변수들의 계수로 이루어진 행렬(A), 타임 스텝(t)에서의 변수들의 계수로 이루어진 행렬(B) 및 경계 조건을 나타내는 벡터(BC)로 이루어지는 단일 행렬 방정식으로 수학적

$$A \times M^{t+1} + U(M^{t+1}) + B \times M^t + BC = 0$$

으로 정리하고,

여기서 A는

$$A_{12N \times 12N} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\Delta t} \mathbb{I}_{2N \times 2N} & 0 & 0 & 0 & \left( \left( \frac{1}{\Delta t} \frac{R_p}{5D_{1,k}^{\text{eff}}} + \frac{3}{2R_k} \right) \mathbb{I} \right)_{2N \times 2N} \\ 0 & \left( \frac{1}{\Delta t} \mathbb{I} - \frac{1}{2} \frac{1}{\epsilon_k} \mathcal{L}_{D_{2,k}}^{\text{eff}} \right)_{3N \times 3N} & 0 & 0 & \left( -\frac{1}{2\epsilon_k} a_k(1-t_+)A \right)_{3N \times 2N} \\ 0 & 0 & (\mathcal{L}_{\sigma_k}^{\text{eff}})_{2N \times 2N} & 0 & -a_k F \mathbb{I}_{2N \times 2N} \\ 0 & 0 & 0 & (\mathcal{L}_{\kappa_k}^{\text{eff}})_{3N \times 3N} & +a_k F A_{3N \times 2N} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbb{I}_{2N \times 2N} \end{bmatrix}$$

$$A_{3N \times 2N} = \begin{bmatrix} \mathbb{I}_{N \times N} & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & \mathbb{I}_{N \times N} \end{bmatrix}$$

(여기서  $\mathbb{I}$  는 단위 행렬을 나타내고,  $A$  는 임시 행렬을 나타내며, N은 1차원 기준 격자 수)이고,

B는

$$B_{12N \times 12N} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\Delta t} \mathbb{I}_{2N \times 2N} & 0 & 0 & 0 & \left( \left( -\frac{1}{\Delta t} \frac{R_p}{5D_{1,k}^{\text{eff}}} + \frac{3}{2R_k} \right) \mathbb{I} \right)_{2N \times 2N} \\ 0 & \left( -\frac{1}{\Delta t} \mathbb{I} - \frac{1}{2} \frac{1}{\epsilon_k} \mathcal{L}_{D_{2,k}}^{\text{eff}} \right)_{3N \times 3N} & 0 & 0 & \left( -\frac{1}{2\epsilon_k} a_k(1-t_+)A \right)_{3N \times 2N} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

이며,

U(M)은

$$U(M)_{12N \times N} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \left( -\mathcal{L}_{\kappa_k^{\text{eff}}} \ln c_2 \right)_{3N \times N} \\ \left( -2\kappa_k^{\text{eff}} \sqrt{c_{2,k}(c_{1,k}^{\text{max}} - c_{1,k}^*)} c_{1,k}^* \sinh \left[ \frac{0.5R}{FT} (\Phi_{1,k} - \Phi_{2,k} - U_k) \right] \right)_{2N \times N} \end{bmatrix}$$

인 이차전지 시뮬레이션 방법.

#### 청구항 5

제4항에 있어서, 상기 선형 근사된 비선형항 벡터를 대입하는 단계는

상기 비선형항 벡터( $U(M^{t+1})$ )를 테일러 근사하여 수학식

$$U(M^{t+1}) = U(M^t) + UP(M^t) \times (M^{t+1} - M^t) + \mathcal{O}(\Delta t^2)$$

(여기서  $UP(M)$ 는  $U(M)$ 의 도함수(자코비안) 행렬을 나타내고,  $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ 는 2계 정확도를 유지하도록 선형화하는 경우의 생략 가능한 오차이다.)

으로 상기 선형 근사된 비선형항 벡터를 획득하는 단계; 및

상기 선형 근사된 비선형항 벡터를 상기 단일 행렬 방정식에 대입하여, 수학식

$$\begin{aligned} & A \times M^{t+1} + U(M^{t+1}) + B \times M^t + BC \\ & \approx A \times M^{t+1} + U(M^t) + UP(M^t) \times [M^{t+1} - M^t] + B \times M^t + BC \\ & = (A + UP(M^t)) \times M^{t+1} + (B - UP(M^t)) \times M^t + U(M^t) + BC \end{aligned}$$

으로 정리하는 단계를 포함하는 이차전지 시뮬레이션 방법.

#### 청구항 6

제5항에 있어서, 상기 LU 분해하는 단계는

현재 타임 스텝(t)에 대한 임시 연산 행렬( $R^t$ )을 수학식

$$R^t = -((B - UP(M^t)) \times M^t + U(M^t) + BC)$$

으로 정의하여, 다음 타임 스텝(t+1)에서의 이차전지의 이후 내부 상태 벡터( $M^{t+1}$ )에 관한 방정식을 수학식

$$M^{t+1} = (A + UP(M^t))^{-1} R^t$$

으로 정리하는 단계;

내부 상태 벡터( $M^{t+1}$ )의 원소들 중 리튬 이온 농도( $c_1^{t+1}$ ,  $c_2^{t+1}$ )와 전위( $\phi_1^{t+1}$ ,  $\phi_2^{t+1}$ ), 단위부피당 리튬이온의 양( $j^{t+1}$ )을 구분하고, 구분된 리튬 이온 농도( $c_1^{t+1}$ ,  $c_2^{t+1}$ )와 전위( $\phi_1^{t+1}$ ,  $\phi_2^{t+1}$ ), 단위부피당 리튬이온의 양( $j^{t+1}$ )에 따라 근사된 비선형항 벡터가 대입된 단일 행렬 방정식을 수학식

$$[A + UP(M^t)] \times M^{t+1} = R^t \Leftrightarrow \begin{bmatrix} A' & B' \\ C' & D' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} CC \\ \Phi\Phi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R_{CC} \\ R_{\Phi\Phi} \end{bmatrix}$$

(여기서  $A'$ ,  $B'$ ,  $C'$  및  $D'$ 은  $A$ 를 LU 분해한 행렬을 나타내고,  $CC(CC = [c_1^{t+1} \ c_2^{t+1}]^T)$ 와  $\Phi\Phi(\Phi\Phi = [\phi_1^{t+1} \ \phi_2^{t+1}]^T)$

$_{2}^{t+1} j^{t+1}]^T$ )는 다음 타임 스텝(t+1)의 내부 상태 벡터( $M^{t+1}$ )에서 농도 벡터와 전위 및 이온양 벡터를 나타내며,  $R_{CC}$ 와  $R_{\Phi\Phi}$ 는 임시 연산 행렬(R)에서 농도 벡터와 전위 및 이온양 벡터에 대응하는 위치의 원소로 구성되는 벡터이다.)

으로 변환하는 단계;

변환된 단일 행렬 방정식을 수학식

$$\begin{aligned} [A + UP(M^t)] &= \begin{bmatrix} A' & B' \\ C' & D' \end{bmatrix} \downarrow \\ &= \begin{bmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ C'A'^{-1} & \mathbb{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A' & 0 \\ 0 & D' - C'A'^{-1}B' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbb{I} & A'^{-1}B' \\ 0 & \mathbb{I} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} A' & 0 \\ C' & D' - C'A'^{-1}B' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbb{I} & A'^{-1}B' \\ 0 & \mathbb{I} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

으로 LU 분해하는 단계를 포함하는 이차전지 시뮬레이션 방법.

#### 청구항 7

제6항에 있어서, 상기 내부 상태 벡터를 계산하는 단계는

임시 중간 단계 연산을 위한 임시 농도 벡터( $\bar{C}$ )를 수학식

$$\bar{C} = \mathbb{I} \times CC + (A'^{(-1)}B) \times \Phi\Phi$$

로 정의하여, LU 분해된 단일 행렬 방정식을 해석하기 위한 3개의 독립 방정식을 수학식

$$A'\bar{C} = R_{CC}$$

과 수학식

$$(D' - \Delta t C'B')\Phi\Phi = R_{\Phi\Phi} - (\Delta t C'A')\bar{C}$$

및 수학식

$$CC = \bar{C} - (\Delta t B')\Phi\Phi$$

로 획득하는 단계;

획득된 3개의 독립 방정식에 현재 타임 스텝(t)에서 획득된 측정값을 대입하여, 이차전지의 이후 내부 상태를 나타내는 내부 상태 벡터를 획득하는 단계를 포함하는 이차전지 시뮬레이션 방법.

#### 청구항 8

제7항에 있어서, 상기 내부 상태 벡터를 획득하는 단계는

수학식  $A'\bar{C} = R_{CC}$ 에서 LU 분해된 행렬( $A'$ )이 도메인이 2차원을 초과하는 고차원 행렬로서

수학식

$$A'_{N'XN'} = (\mathbb{I} + \Delta t L_{xx} + \Delta t L_{yy} + \Delta t L_{zz})_{N'XN'}$$

(여기서  $L_{xx}$ ,  $L_{yy}$  및  $L_{zz}$ 는 차분화된 확산 연산자에 해당하는 계수로 이루어진 행렬을 나타내고,  $N'$  1차원 벡터의 길이가 n이라 할 때,  $n^3 (= N')$ 을 의미한다.) 형식을 가지면,

상기 LU 분해된 행렬( $A'$ )을 근사 분해법에 따라 행렬 분해하여, 수학적식

$$\begin{aligned} A'_{N'XN'} &= \mathbb{I} + \Delta t L_{xx} + \Delta t L_{yy} + \Delta t L_{zz} \\ &= (\mathbb{I} + \Delta L_{xx})(\mathbb{I} + \Delta L_{yy})(\mathbb{I} + \Delta L_{zz}) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \end{aligned}$$

으로 변환하여 적용하는 이차전지 시뮬레이션 방법.

#### 청구항 9

제1항 내지 제8항 중 어느 한 항에 따른 이차전지 시뮬레이션 방법을 수행하기 위한 컴퓨팅 장치에서 판독 가능한 프로그램 명령어가 기록된 기록 매체.

#### 청구항 10

제1항 내지 제8항 중 어느 한 항에 따른 이차전지 시뮬레이션 방법에 따라 시뮬레이션하고자 하는 이차전지에 대응하는 다수의 방정식으로부터 추출된 LU 분해된 단일 행렬 방정식을 해석하기 위한 3개의 독립 방정식이 저장되는 메모리; 및

BMS가 이차전지의 현재 상태를 감지하여 획득한 측정값을 인가받고, 상기 3개의 독립 방정식에 측정값을 대입하여, 상기 내부 상태 벡터를 획득하는 프로세서를 포함하는 이차전지 시뮬레이션 장치.

### 발명의 설명

#### 기술 분야

[0001] 본 발명은 이차전지 시뮬레이션 방법 및 장치에 관한 것으로, 저복잡도로 이차전지 상태를 시뮬레이션할 수 있는 이차전지 시뮬레이션 방법 및 장치에 관한 것이다.

#### 배경 기술

[0002] 최근 이차전지를 활용하는 분야가 급격하게 확장됨에 따라 부각되고 있는 중요한 이슈는 배터리 관리 시스템(Battery Management System: 이하 BMS)과 관련된 모델링이다. BMS가 이차전지인 배터리를 효율적으로 컨트롤하기 위해서는 현재 배터리 상태에 대한 각종 정보를 수집하고, 수집된 현재 배터리 상태로부터 배터리의 충전 상태(State of Charge, SoC), 열화 상태(State of Health: SoH) 등과 같은 이후 배터리 상태를 예측할 수 있어야 한다. 이에 BMS는 배터리가 모델링된 이차전지 시뮬레이션 장치를 포함하고, 수집된 파라미터를 이차전지 시뮬레이션 장치에 입력하여 배터리의 이후 상태를 예측하여, 이차전지의 충전 시간을 단축시키거나 열화를 억제해야 한다.

[0003] 일반적으로 BMS의 이차전지 시뮬레이션 장치는 전기 회로 모델(Electric Circuit Model: ECM)을 주로 이용한다. ECM은 적은 수의 파라미터를 사용하여 배터리를 모델링하므로, 매우 적은 계산 비용을 바탕으로 실시간 계산이 가능한 장점이 있다. 그러나 ECM의 경우 배터리의 입력(input)과 출력(Output)을 표현하기에는 적합하지만, 배터리 내부의 실제 화학 반응과 SEI(Solid Electrolyte Interphase) 레이어 성장, 부반응, 노화, 열전달 등과 같은 다양한 물리적 반응을 표현하기에는 한계가 존재한다.

[0004] 특히 최근에는 전기 자동차 등에서 대용량의 리튬 이온 배터리 사용이 늘어남에 따라, 기존의 소형 배터리와 달리, 배터리 내부의 다양한 반응으로 인해 발생하는 문제점들이 더 중요해지고 있다. 따라서 이차전지 시뮬레이션 장치가 배터리 내부의 상태까지 시뮬레이션할 수 있도록 요구되고 있으며, 이러한 요구에 따라 여러 전기화학 모델이 제안되었다. 이 중 수치 해석 알고리즘에 따른 편미분 방정식 기반의 의사 2차원(Pseudo-two-dimensional: 이하 P2D) 모델에 기초한 배터리 모델이 배터리 상태 표현에 적합하다고 알려져 있다. 다만 P2D 모델의 경우, 계산 비용이 매우 높다는 문제가 있다.

[0005] P2D 모델은 기본적으로 1차원 전극과 각 전극 그리드 포인트 내부의 1차원 리튬 이온 입자를 수송 방정식, 확산 방정식, 버틀러 볼머 방정식(Butler-Volmer's equation), 전하 보존 방정식을 이용하여 배터리의 상태를 표현하는 모델이다. 여기서 배터리 내부 상태를 표현하는 식은 편미분 방정식이 매우 비선형적인 특성을 가지는 대수 방정식과 결합되어 있기 때문에 계산 비용이 높을 뿐만 아니라 풀기 어렵다는 문제가 있다. 더 큰 문제점은, 실제 배터리와 유사한 모델을 구현하기 위해 전극 차원을 2차원, 3차원으로 확장하는 경우, 전극의 차원과 고체 입자 차원의 합인 4(= 3 + 1)차원 수치해석 문제가 되어 계산비용이 격자수(n)의 4승으로 증가한다는 점이다.



그리고 이러한 문제는 P2D 모델과 유사하게 수송방정식, 확산방정식, 버틀러 볼머식, 전하 보존 방정식을 이용하는 대부분의 수치 해석 알고리즘 기반 모델에 동일하게 적용된다.

- [0006] 즉 기존에는 배터리의 내부 상태까지 표현할 수 있는 수치 해석 알고리즘 기반 모델을 이용하고자 하여도, 높은 계산 비용으로 인해 이차전지 시뮬레이션 장치가 실시간 또는 요구되는 시간 이내에 배터리 이후 상태를 예측할 수 없다는 한계가 있어 현실적으로 적용되지 못하는 문제가 있다.

## 선행기술문헌

### 특허문헌

- [0007] (특허문헌 0001) 한국 등록 특허 제10-1792975호 (2017.10.26 등록)

## 발명의 내용

### 해결하려는 과제

- [0008] 본 발명의 목적은 저복잡도로 이차전지 상태를 시뮬레이션할 수 있는 이차전지 시뮬레이션 방법 및 장치를 제공하는데 있다.

- [0009] 본 발명의 다른 목적은 저비용으로 이차전지의 내부 상태까지 시뮬레이션 가능한 이차전지 시뮬레이션 방법 및 장치를 제공하는데 있다.

### 과제의 해결 수단

- [0010] 상기 목적을 달성하기 위한 본 발명의 일 실시예에 따른 이차전지 시뮬레이션 방법은 시뮬레이션하고자 하는 이차전지에 대응하는 다수의 방정식을 포함하는 이차전지 방정식을 설정하는 단계; 설정된 이차전지 모델 방정식의 다수의 방정식 각각을 타임 스텝에 대한 차분 방정식으로 변환하는 단계; 변환된 다수의 차분 방정식을 획득해야 하는 다음 타임 스텝에서의 리튬 이온 농도와 전위, 단위부피당 리튬이온의 양을 원소로 포함하는 내부 상태 벡터와 비선형항 벡터를 포함하는 단일 행렬 방정식 형태로 정리하는 단계; 상기 비선형항 벡터를 테일러 근사 기법에 따라 선형 근사하여, 단일 행렬 방정식에 선형 근사된 비선형항 벡터를 대입하는 단계; 상기 내부 상태 벡터의 원소들 중 리튬 이온 농도와 전위, 단위부피당 리튬이온의 양을 구분하고, 구분된 리튬 이온 농도와 전위, 단위부피당 리튬이온의 양에 따라 근사된 비선형항 벡터를 대입된 단일 행렬 방정식을 LU 분해하는 단계; 및 LU 분해된 단일 행렬 방정식을 계산하여, 상기 내부 상태 벡터를 계산하는 단계를 포함한다.

### 발명의 효과

- [0011] 따라서, 본 발명의 실시예에 따른 이차전지 시뮬레이션 방법 및 장치는 수치 해석 알고리즘 기반 모델에 대한 저복잡도의 효율적인 연산 기법을 적용하여 저비용의 처리 성능이 낮은 하드웨어로도 이차전지의 내부 상태까지 시뮬레이션을 수행할 수 있도록 한다.

### 도면의 간단한 설명

- [0012] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 이차전지 시뮬레이션 방법을 나타낸다.  
 도 2는 본 발명의 일 실시예에 따른 이차전지 시뮬레이션 장치를 포함하는 배터리 시스템을 나타낸다.  
 도 3은 본 발명의 일 실시예에 따른 이차전지 시뮬레이션 장치의 개략적 구성을 나타낸다.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0013] 본 발명과 본 발명의 동작상의 이점 및 본 발명의 실시예에 의하여 달성되는 목적을 충분히 이해하기 위해서는 본 발명의 바람직한 실시예를 예시하는 첨부 도면 및 첨부 도면에 기재된 내용을 참조하여야만 한다.

- [0014] 이하, 첨부한 도면을 참조하여 본 발명의 바람직한 실시예를 설명함으로써, 본 발명을 상세히 설명한다. 그러나, 본 발명은 여러 가지 상이한 형태로 구현될 수 있으며, 설명하는 실시예에 한정되는 것이 아니다. 그리고, 본 발명을 명확하게 설명하기 위하여 설명과 관계없는 부분은 생략되며, 도면의 동일한 참조부호는 동일한 부재

임을 나타낸다.

[0015] 명세서 전체에서, 어떤 부분이 어떤 구성요소를 "포함"한다고 할 때, 이는 특별히 반대되는 기재가 없는 한 다른 구성요소를 제외하는 것이 아니라, 다른 구성요소를 더 포함할 수 있는 것을 의미한다. 또한, 명세서에 기재된 "...부", "...기", "모듈", "블록" 등의 용어는 적어도 하나의 기능이나 동작을 처리하는 단위를 의미하며, 이는 하드웨어나 소프트웨어 또는 하드웨어 및 소프트웨어의 결합으로 구현될 수 있다.

[0016] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 이차전지 시뮬레이션 방법을 나타낸다.

[0017] 도 1을 참조하면, 본 실시예에 따른 이차전지 시뮬레이션 방법은 우선 시뮬레이션을 수행할 이차전지 모델을 선정한다(S10). 여기서는 시뮬레이션되는 이차전지가 리튬 이온 배터리인 것으로 가정한다. 그리고 이차전지 모델은 수송방정식, 확산방정식, 버틀러 볼머식, 전하 보존 방정식을 이용하는 P2D 모델, 레독스 흐름 전지 모델 및 전고체 방정식 모델 등과 같은 다양한 수치 해석 알고리즘 기반 모델 중 하나로 설정될 수 있으며 여기서는 일 예로 P2D 모델을 이용하는 것으로 가정한다. 다만 리튬 이온 배터리와 P2D 모델은 일 예로서 다른 이차전지나 이차전지 모델이 이용될 수도 있다.

[0018] 이차전지 모델이 선정되면, 선정된 이차전지 모델에 따라 시뮬레이션할 이차전지에 대응하는 모델 방정식을 설정한다(S20). 기본적으로 이차전지 모델은 이차전지를 모사하기 위한 각종 수치해석 방정식을 포함하도록 구성되지만, 시뮬레이션할 실제 이차전지에 대응하도록 이차전지 모델에 포함된 모델 방정식을 설정해야 한다. 이때, 실제 이차전지 구조와 선정된 이차전지 모델에 대응하여 각종 파라미터가 함께 설정될 수 있다.

[0019] 여기서는 이차전지 모델로 P2D 모델을 이용하는 것으로 가정하였으며, P2D 모델에서는 수학식 1 내지 수학식 5로 표현되는 5개의 방정식을 지배 방정식으로 이용하여 이차전지의 상태를 해석한다.

[0020] 5개의 지배 방정식 중 수학식 1은 전극 내 고체 입자 내부의 농도 분포를 해석하기 위한 수송 방정식을 나타낸다.

### 수학식 1

$$\frac{\partial c_{1,k}}{\partial t} = D_{1,k}^{\text{eff}} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial c_{1,k}}{\partial r} \right)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial c_{1,k}^{\text{avg}}}{\partial t} = -3 \frac{j_k}{R_p}, c_{1,k}^* - c_{1,k}^{\text{avg}} = -\frac{R_p}{D_{1,k}^{\text{eff}}} \frac{j_k}{5}$$

[0021]

[0022] 본 실시예에서 각 기호에 대한 아래 첨자 1과 2는 각각 고체 입자에 대한 물리량(1)과 액체 상태에서의 물리량(2)을 나타내고, 아래 첨자 k(k ∈ {p, s, n})는 도메인 영역을 나타내는 기호로 양극(p), 분리막(s) 및 음극(n)을 나타낼 수 있다.

[0023] 이에 수학식 1에서 c<sub>1,k</sub>는 고체 입자 내부에서 도메인 영역(k)에 따른 리튬이온 농도, c<sub>1,k</sub><sup>\*</sup>는 고체 입자 표면에서 도메인 영역(k)에 따른 리튬이온 농도, c<sub>1,k</sub><sup>avg</sup>는 고체 입자 내부에서 도메인 영역(k)에 따른 평균 리튬이온 농도, t는 타임 스텝에 따른 현재 시간, D<sub>1,k</sub><sup>eff</sup>는 고체 입자에서 도메인 영역(k)에 따른 확산 계수, r은 구형 좌표계, j<sub>k</sub>는 도메인 영역(k)에 따른 고체 입자 표면에서 전기화학 반응으로 인한 단위부피당 리튬이온의 양, R<sub>p</sub>는 고체 입자의 반지름을 나타낸다.

[0024] 그리고 수학식 2는 전극 내 전해질 내부 농도 분포를 해석하기 위한 수송 방정식을 나타낸다.

## 수학식 2

$$\varepsilon_k \frac{\partial c_{2,k}}{\partial t} = \nabla \cdot (D_{2,k}^{\text{eff}} \nabla c_{2,k}) + a_k(1 - t_+)j_k$$

여기서  $\varepsilon_k$ 는 도메인 영역(k)에 따른 공극률을 나타내고,  $c_{2,k}$ 는 액체 상태에서 도메인 영역(k)에 따른 리튬이온 농도,  $D_{2,k}^{\text{eff}}$ 는 액체 상태에서 도메인 영역(k)에 따른 확산 계수,  $a_k$ 는 도메인 영역(k)에 따른 다공성 전극의 활성화 면적 비율,  $t_+$ 는 수율을 나타낸다.

한편 수학식 3은 전극 내부 고체 입자 간의 전위 분포를 해석하기 위한 전하 보존 방정식을 나타낸다.

## 수학식 3

$$\nabla \cdot (\sigma_k^{\text{eff}} \nabla \phi_{1,k}) = a_k F j_k$$

여기서  $\sigma_k^{\text{eff}}$ 는 도메인 영역(k)에 따른 고체상의 유효전도도,  $\phi_{1,k}$ 는 고체 입자 내부에서 도메인 영역(k)에 따른 전위를 나타내며, F는 패러데이 상수를 나타낸다.

또한 수학식 4는 전극 내부 전해질 내부의 전위 분포를 해석하기 위한 전하 보존 방정식을 나타낸다.

## 수학식 4

$$\nabla \cdot (\kappa_k^{\text{eff}} \nabla \phi_{2,k}) - \nabla \cdot \left[ \kappa_k^{\text{eff}} \frac{2RT}{F} \nabla (\ln c_{2,k}) \right] = -a_k F j_k$$

여기서  $\kappa_k^{\text{eff}}$ 는 도메인 영역(k)에 따른 전해질상의 유효전도도,  $\phi_{2,k}$ 는 액체 상태에서 도메인 영역(k)에 따른 전위, R은 기체 상수 및 T는 온도를 나타낸다.

마지막으로 수학식 5는 전극 반응에서 전자교환 과정의 속도와 전극위치의 관계를 나타내는 버틀러 볼머 방정식을 나타낸다.

## 수학식 5

$$j_k = 2k_k^{\text{eff}} \sqrt{c_{2,k}(c_{1,k}^{\text{max}} - c_{1,k}^*)c_{1,k}^*} \sinh \left[ \frac{0.5R}{FT} \eta_k \right]$$

여기서  $c_{1,k}^{\text{max}}$ 는 고체 입자 내부에서 도메인 영역(k)에 따른 최대 리튬이온 농도,  $\eta_k$ 는 도메인 영역(k)에 따른 활성화 과전위를 나타낸다.

수학식 1 내지 5로 표현되는 이차전지 모델의 5개의 지배 방정식은 이차전지의 내부에서 발생하는 반응으로 인한 내부 상태 변화를 계산할 수 있도록 한다.

수학식 1 내지 5와 같이 이차전지 모델에 대한 모델 방정식이 설정되면, 설정된 모델 방정식 각각을 타임 스텝(t, t+1)에 따른 시간차( $\Delta t$ )에서의 변화로 표현되도록 차분하여, 차분 모델 방정식을 획득한다(S30).

즉 수학식 1 내지 5로 표현된 5개의 모델 방정식을 기반으로 다음 타임 스텝(t+1)에서의 모델 방정식에서 현재 타임 스텝(t)에서의 모델 방정식을 차분함으로써, 수학식 6 내지 10의 5개의 차분 모델 방정식을 획득할 수 있

다.

### 수학식 6

$$\frac{c_{1,k}^{*,t+1} - c_{1,k}^{*,t}}{\Delta t} = - \left( \frac{1}{\Delta t} \frac{R_p}{5D_{1,k}^{eff}} + \frac{3}{2R_k} \right) j^{t+1} - \left( - \frac{1}{\Delta t} \frac{R_p}{5D_{1,k}^{eff}} + \frac{3}{2R_k} \right) j^t$$

### 수학식 7

$$\epsilon_k \frac{c_{2,k}^{t+1} - c_{2,k}^t}{\Delta t} = \frac{1}{2} \mathcal{L}_{D_{2,k}^{eff}}(c_{2,k}^{t+1} + c_{2,k}^t) + a_k(1 - t_+) \frac{1}{2} (j_k^{t+1} + j_k^t)$$

### 수학식 8

$$\mathcal{L}_{\sigma_k^{eff}} \Phi_{1,k}^{t+1} - a_k F j_k^{t+1} = 0$$

### 수학식 9

$$\mathcal{L}_{\kappa_k^{eff}} \Phi_{2,k}^{t+1} - \mathcal{L}_{\kappa_k^{eff}} \ln c_{2,k}^{t+1} + a_k F j_k^{t+1} = 0$$

### 수학식 10

$$j^{t+1} - 2\kappa_k^{eff} \sqrt{c_{2,k}^{t+1}(c_{1,k}^{max} - c_{1,k}^{*,t+1})c_{1,k}^{*,t+1}} \sinh \left[ \frac{0.5R}{FT} (\Phi_{1,k}^{t+1} - \Phi_{2,k}^{t+1} - U_{1,k}^{t+1}) \right] = 0$$

수학식 7 내지 수학식 9에서  $\mathcal{L}_{D_{2,k}^{eff}}$  와  $\mathcal{L}_{\sigma_k^{eff}}$  및  $\mathcal{L}_{\kappa_k^{eff}}$  는 각각 고체 입자에서 도메인 영역(k)에 따른 확산 계수( $D_{2,k}^{eff}$ ), 도메인 영역(k)에 따른 고체상의 유효전도도( $\sigma_k^{eff}$ ) 및 도메인 영역(k)에 따른 전해질상의 유효전도도( $\kappa_k^{eff}$ )에 대한 차분화된 연산자로,  $\mathcal{L}_G = \frac{\partial}{\partial x} (G \frac{\partial}{\partial x})$ 의 형식으로 획득될 수 있다.

여기서는 일 예로 Crank-Nicolson 방법에 따라 차분을 수행하였으나, Backward Euler 방법을 포함한 다른 차분 방법을 이용할 수도 있다.

그리고 수학식 6 내지 10의 차분 모델 방정식은 효율적인 수치 해석을 위해 수학식 11과 같은 단일 행렬 방정식으로 정리한다(S40).

### 수학식 11

$$A \times M^{t+1} + U(M^{t+1}) + B \times M^t + BC = 0$$

수학식 11에서 M은 리튬 이온 농도(c)와 전위( $\phi$ ), 단위부피당 리튬이온의 양(j)을 원소로 포함하는 벡터이고,  $M^{t+1}$ 은 이차전지 시뮬레이션이 예측해야 하는 다음 타임 스텝(t+1)에서의 이차전지의 이후 내부 상태를 나타내는

파라미터들을 원소로 포함하도록 구성된 벡터이며, 수학식 12로 정의된다.

### 수학식 12

$$\mathbf{M}^{t+1} = [\mathbf{c}_1^{t+1} \mathbf{c}_2^{t+1} \boldsymbol{\Phi}_1^{t+1} \boldsymbol{\Phi}_2^{t+1} \mathbf{j}^{t+1}]^T$$

즉 본 실시예에 따른 이차전지 시뮬레이션에서는 다음 타임 스텝(t+1)에서의 이차전지의 이후 내부 상태 벡터 ( $\mathbf{M}^{t+1}$ )를 획득하는 것을 목적으로 한다.

그리고 수학식 11에서 A는 차분 방정식에서 타임 스텝 t+1에서의 변수들의 계수로 이루어진 행렬로서 수학식 13으로 정리된다.

### 수학식 13

$$\mathbf{A}_{12N \times 12N} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\Delta t} \mathbb{I}_{2N \times 2N} & 0 & 0 & 0 & \left( \left( \frac{1}{\Delta t} \frac{R_p}{5D_{1,k}^{\text{eff}}} + \frac{3}{2R_k} \right) \mathbb{I} \right)_{2N \times 2N} \\ 0 & \left( \frac{1}{\Delta t} \mathbb{I} - \frac{1}{2} \frac{1}{\epsilon_k} \mathcal{L}_{D_{2,k}^{\text{eff}}} \right)_{3N \times 3N} & 0 & 0 & \left( -\frac{1}{2\epsilon_k} a_k (1 - t_+) \mathbf{A} \right)_{3N \times 2N} \\ 0 & 0 & (\mathcal{L}_{G_k^{\text{eff}}})_{2N \times 2N} & 0 & -a_k \mathbf{F} \mathbb{I}_{2N \times 2N} \\ 0 & 0 & 0 & (\mathcal{L}_{K_k^{\text{eff}}})_{3N \times 3N} & +a_k \mathbf{F} \mathbf{A}_{3N \times 2N} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbb{I}_{2N \times 2N} \end{bmatrix}$$

수학식 13에서  $\mathbb{I}$ 는 단위 행렬을 나타내고,  $\mathbf{A}$ 는  $\mathbf{A}_{3N \times 2N} = \begin{bmatrix} \mathbb{I}_{N \times N} & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & \mathbb{I}_{N \times N} \end{bmatrix}$ 로 정의되는 단위 행렬로 이루어지는 임의 행렬을 나타내며, 여기서 N은 1차원 기준 격자 수를 나타낸다.

한편 수학식 11에서 B는 차분 방정식에서 타임 스텝(t)에서의 변수들의 계수로 이루어진 행렬로서 수학식 14로 정리된다.

### 수학식 14

$$\mathbf{B}_{12N \times 12N} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\Delta t} \mathbb{I}_{2N \times 2N} & 0 & 0 & 0 & \left( \left( -\frac{1}{\Delta t} \frac{R_p}{5D_{1,k}^{\text{eff}}} + \frac{3}{2R_k} \right) \mathbb{I} \right)_{2N \times 2N} \\ 0 & \left( -\frac{1}{\Delta t} \mathbb{I} - \frac{1}{2} \frac{1}{\epsilon_k} \mathcal{L}_{D_{2,k}^{\text{eff}}} \right)_{3N \times 3N} & 0 & 0 & \left( -\frac{1}{2\epsilon_k} a_k (1 - t_+) \mathbf{A} \right)_{3N \times 2N} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

또한 수학식 11에서 U(M)은 차분 방정식에서 M에 대한 비선형항으로 이루어진 벡터로 수학식 15로 정리된다.

### 수학식 15

$$\mathbf{U(M)}_{12N \times N} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ (-\mathcal{L}_{K_k^{\text{eff}}} \ln c_2)_{3N \times N} \\ \left( -2k_k^{\text{eff}} \sqrt{c_{2,k}(c_{1,k}^{\text{max}} - c_{1,k}^*) c_{1,k}^*} \sinh \left[ \frac{0.5R}{F T} (\Phi_{1,k} - \Phi_{2,k} - U_k) \right] \right)_{2N \times N} \end{bmatrix}$$

[0058] 마지막으로 BC는 경계 조건에 해당하는 벡터를 나타낸다.

[0059] 일반적으로 수학식 11의 행렬 방정식을 계산하기 위해서는 반복법(iterative method)을 이용한다. 그러나 각 타임 스텝마다 반복법에 기초하여 수학식 11을 계산한다면, 계산 시간이 매우 오래 걸리게 된다. 즉 이차전지 시뮬레이션이 요구되는 시간 이내에 수행될 수 없게 된다.

[0060] 그리고 이와 같이 반복법을 이용하여 계산하는 것은 수학식 11의 행렬 방정식에서 비선형항으로 이루어진 벡터(U(M))가 포함되기 때문이다. 즉 벡터(U(M))의 비선형성에 의해 반복법을 수행해야만 하였다.

[0061] 이에 본 실시에서는 테일러 급수를 이용하는 테일러 근사 기법을 이용하여 비선형항으로 이루어진 벡터(U(M))를 선형화한다(S50). 즉 다음 타임 스텝(t+1)에서의 M에 대한 비선형항으로 이루어진 벡터(U(M<sup>t+1</sup>))를 수학식 16과 같이 현재 타임 스텝(t)에서의 M에 대한 비선형항으로 이루어진 벡터(U(M<sup>t</sup>))에 관한 함수로 근사한다.

### 수학식 16

[0062] 
$$U(M^{t+1}) = U(M^t) + UP(M^t) \times (M^{t+1} - M^t) + \mathcal{O}(\Delta t^2)$$

[0063] 여기서 UP(M)는 U(M)의 도함수(자코비안) 행렬을 나타내고,  $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ 는 2계(Second-order) 정확도를 유지하도록 선형화하는 경우의 생략 가능한 오차이다.

[0064] 그리고 수학식 16의 선형화된 벡터(U(M<sup>t+1</sup>))를 수학식 11에 대입하면, 수학식 11은 수학식 17과 같이 정리될 수 있다.

### 수학식 17

[0065] 
$$\begin{aligned} & A \times M^{t+1} + U(M^{t+1}) + B \times M^t + BC \\ & \approx A \times M^{t+1} + U(M^t) + UP(M^t) \times [M^{t+1} - M^t] + B \times M^t + BC \\ & = (A + UP(M^t)) \times M^{t+1} + (B - UP(M^t)) \times M^t + U(M^t) + BC \end{aligned}$$

[0066] 따라서 이차전지 시뮬레이션은 수학식 17로부터 수학식 18로 정리되는 행렬 방정식을 풀이함으로써 수행될 수 있다.

### 수학식 18

[0067] 
$$(A + UP(M^t)) \times M^{t+1} + (B - UP(M^t)) \times M^t + U(M^t) + BC = 0$$

[0068] 여기서 수학식 18을 간략하게 하기 위해, 현재 타임 스텝(t)에 대한 임시 연산 행렬(R<sup>t</sup>)을 수학식 19로 정의한다.

### 수학식 19

[0069] 
$$R^t = -((B - UP(M^t)) \times M^t + U(M^t) + BC)$$

[0070] 수학식 18에 수학식 19의 임시 연산 행렬(R<sup>t</sup>)을 적용하면, 수학식 18은 수학식 20과 같이 다음 타임 스텝(t+1)에서의 이차전지의 이후 내부 상태 벡터(M<sup>t+1</sup>)에 관한 방정식으로 간략화되어 표현될 수 있다.

## 수학식 20

$$M^{t+1} = (A + UP(M^t))^{-1} R^t$$

즉 수학식 20을 계산하면, 다음 타임 스텝(t+1)에서 이차전지 내부 상태를 확인하기 위한 리튬 이온 농도(c)와 전위( $\phi$ ) 및 단위부피당 리튬이온의 양(j)을 획득할 수 있으며, 시간 차원 간의 관계로 다수 횟수로 반복하여 계산하는 반복법에 따르지 않고, 역행렬 $((A+UP(M^t))^{-1})$ 을 계산하여 한번에 계산할 수 있다.

그리고 수학식 20에서 역행렬 $((A+UP(M^t))^{-1})$ 의 원행렬 $((A+UP(M^t)))$ 은 수학식 21과 같다.

## 수학식 21

$$[A + UP(M^t)]_{12N \times 12N} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\Delta t} \mathbb{I}_{2N \times 2N} & 0 & 0 & 0 & \left( \left( \frac{1}{\Delta t} \frac{R_p}{5D_{1,k}^{eff}} + \frac{3}{2R_k} \right) \mathbb{I} \right)_{2N \times 2N} \\ 0 & \left( \frac{1}{\Delta t} \mathbb{I} - \frac{1}{2\epsilon_k} \mathcal{G}_{D_{2,k}^{eff}} \right)_{3N \times 3N} & 0 & 0 & \left( -\frac{1}{2\epsilon_k} a_k (1 - t_+) \mathbb{A} \right)_{3N \times 2N} \\ 0 & 0 & (\mathcal{G}_{\sigma_k^{eff}})_{2N \times 2N} & 0 & -a_k F \mathbb{I}_{2N \times 2N} \\ 0 & \left( -\mathcal{G}_{k_k^{eff}} \frac{\partial \ln c_{2,k}^t}{\partial c_{2,k}} \right)_{3N \times 3N} & 0 & (\mathcal{G}_{k_k^{eff}})_{3N \times 3N} & +a_k F \mathbb{A}_{3N \times 2N} \\ \left( -\frac{\partial j_k^t}{\partial c_{1,k}} \mathbb{I} \right)_{2N \times 2N} & \left( -\frac{\partial j_k^t}{\partial c_{2,k}} \mathbb{A} \right)_{2N \times 3N} & \left( -\frac{\partial j_k^t}{\partial \Phi_{1,k}} \mathbb{I} \right)_{2N \times 2N} & \left( -\frac{\partial j_k^t}{\partial \Phi_{2,k}} \mathbb{A} \right)_{2N \times 3N} & 0 \end{bmatrix}$$

따라서 수학식 19와 수학식 21을 계산하면, 수학식 20의 다음 타임 스텝(t+1)에서 이차전지 내부 상태 벡터( $M^{t+1}$ )를 계산할 수 있다.

결과적으로 테일러 근사 기법을 통해 비선형항에 대한 행렬을 선형화하여 다음 타임 스텝(t+1)에서 이차전지 내부 상태 벡터( $M^{t+1}$ )를 계산함으로써, 반복 계산을 수행하지 않아 매우 빠르게 이차전지 시뮬레이션을 수행할 수 있게 된다.

다만, 수학식 20의 행렬식 연산은 실제로 많은 량의 데이터가 포함되며, 특히 이차전지의 격자의 개수(n)나 전극 차원 수에 따라 행렬의 크기와 그에 따른 연산량이 기하급수적으로 증가하게 된다. 이에 연산 메모리의 저장 용량 부족 등의 문제가 발생하여 연산 속도가 크게 느려지게 되거나, 연산 중지되는 문제가 발생될 수 있다.

이러한 문제를 해소하기 위해 본 실시예에서는 적은 저장 용량으로도 연산 가능하도록 각 파라미터를 독립적으로 계산할 수 있도록 행렬을 LU 분해하여 연산을 수행할 수 있다(S60).

우선 다음 타임 스텝(t+1)에서의 이차전지의 이후 내부 상태 벡터( $M^{t+1} = [c_1^{t+1} \ c_2^{t+1} \ \Phi_1^{t+1} \ \Phi_2^{t+1} \ j^{t+1}]^T$ )에 서 리튬이온 농도(c)와 전위( $\phi$ ) 및 리튬이온의 양(j)을 구분하여 수학식 20을 수학식 22와 같이 변환할 수 있다.

## 수학식 22

$$[A + UP(M^t)] \times M^{t+1} = R^t \Leftrightarrow \begin{bmatrix} A' & B' \\ C' & D' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} CC \\ \Phi\Phi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R_{CC} \\ R_{\Phi\Phi} \end{bmatrix}$$

여기서 A', B', C' 및 D'은 A를 LU 분해한 행렬을 나타내고, CC( $CC = [c_1^{t+1} \ c_2^{t+1}]^T$ )와  $\Phi\Phi$ ( $\Phi\Phi = [\Phi_1^{t+1} \ \Phi_2^{t+1} \ j^{t+1}]^T$ )는 다음 타임 스텝(t+1)의 내부 상태 벡터( $M^{t+1}$ )에서 농도 벡터와 전위 및 이온양 벡터를 나타내며,  $R_{CC}$ 와



$R_{\Phi\Phi}$ 는 임시 연산 행렬(R)에서 농도 벡터와 전위 및 이온양 벡터에 대응하는 위치의 원소로 구성되는 벡터이다.

[0082] 수학식 22에서 각 행렬과 벡터의 크기는  $A'$  이  $5N \times 5N$ 이고,  $B'$ 은  $5N \times 7N$ ,  $C'$  은  $7N \times 5N$ 이고,  $D'$ 은  $7N \times 7N$ 이며,  $CC$ 와  $R_{CC}$ 는  $5N \times 1$ 이고,  $\Phi\Phi$ 와  $R_{\Phi\Phi}$ 은  $7N \times 1$ 이다.

[0083] 수학식 22로 변환 표현된 행렬을 LU 분해법에 따라 분해하면, 수학식 23으로 분해될 수 있다.

### 수학식 23

$$\begin{aligned} [A + UP(M^t)] &= \begin{bmatrix} A' & B' \\ C' & D' \end{bmatrix} \downarrow \\ &= \begin{bmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ C'A'^{-1} & \mathbb{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A' & 0 \\ 0 & D' - C'A'^{-1}B' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbb{I} & A'^{-1}B' \\ 0 & \mathbb{I} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} A' & 0 \\ C' & D' - C'A'^{-1}B' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbb{I} & A'^{-1}B' \\ 0 & \mathbb{I} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

[0084]

[0085] 그리고 수학식 23의 계산 편의를 위해, 임시 중간 단계 연산을 위한 임시 농도 벡터( $\bar{C}$ )를 수학식 24와 같이 정의할 수 있다.

### 수학식 24

$$\bar{C} = \mathbb{I} \times CC + (A'^{(-1)}B) \times \Phi\Phi$$

[0086]

[0087] 수학식 24로 정의된 임시 농도 벡터( $\bar{C}$ )를 이용하면 수학식 22를 풀기위한 과정은 수학식 25 내지 27의 3개의 독립적 연산으로 구분될 수 있다.

### 수학식 25

$$A'\bar{C} = R_{CC}$$

[0088]

### 수학식 26

$$(D' - A'^{-1}C'B')\Phi\Phi = R_{\Phi\Phi} - (A'^{-1}C'A')\bar{C}$$

[0089]

### 수학식 27

$$CC = \bar{C} - (A'^{(-1)}B) \times \Phi\Phi$$

[0090]

[0091] 수학식 22가 수학식 25 내지 27의 3개의 방정식으로 분해됨에 따라 각 방정식에서 행렬의 길이가 짧아지게 되므로, 낮은 계산 비용과 작은 저장 용량으로 시뮬레이션을 수행할 수 있다.

[0092] 다만 수학식 26, 27에서는 LU 분해된 행렬( $A'$ )에 대한 역행렬( $A'^{-1}$ )이 포함되어 수학식 25에 비해 연산이 복잡해질 수 있다. 그러나 LU 분해된 행렬( $A'$ )의 역행렬( $A'^{-1}$ )은 타임 스텝 간격( $\Delta t$ )로 근사( $A'^{-1} \approx \Delta t$ )될 수 있는 것으로 알려져 있다(Fully decoupled monolithic projection method for natural convection problems, 2017, Pan et al.).



[0093] 따라서 수학적식 26과 27은 수학적식 28 및 29와 같이 변형되어 더욱 낮은 계산 비용으로 계산될 수 있다.

### 수학적식 28

$$[0094] (D' - \Delta t C' B') \Phi \Phi = R_{\Phi \Phi} - (\Delta t C' A') \bar{C}$$

### 수학적식 29

$$[0095] C C = \bar{C} - (\Delta t B') \Phi \Phi$$

[0096] 즉 수학적식 25, 28 및 29를 이용하여 LU 분해된 수학적식 23을 풀이함으로써, 이차전지의 이후 내부 상태를 나타내는 내부 상태 벡터( $M^{t+1} = [c_1^{t+1} c_2^{t+1} \Phi_1^{t+1} \Phi_2^{t+1} j^{t+1}]^T$ )를 낮은 계산 비용으로 획득할 수 있다.

[0097] 다만, 수학적식 25를 해석할 때, LU 분해된 행렬(A')은 도메인이 2차원을 초과하는 고차원행렬인 경우, 수학적식 30과 같은 형식을 가지며 크기가 기하급수적으로 커지게 된다.

### 수학적식 30

$$[0098] A'_{N' \times N'} = (\mathbb{I} + \Delta t L_{xx} + \Delta t L_{yy} + \Delta t L_{zz})_{N' \times N'}$$

[0099]  $L_{xx}$ ,  $L_{yy}$  및  $L_{zz}$ 는 차분화된 확산 연산자에 해당하는 계수로 이루어진 행렬을 나타낸다. 여기서 N' 1차원 벡터의 길이가 n이라 할 때,  $n^3 (= N')$ 을 의미한다.

[0100] 이에 LU 분해된 행렬(A')이 고차원인지 여부를 우선 판별한다(S70). 만일 LU 분해된 행렬(A')이 고차원행렬이 아니라면, 상기한 바와 같이, 수학적식 25, 28 및 29를 이용하여 LU 분해된 수학적식 23을 풀이함으로써, 이차전지의 이후 내부 상태를 나타내는 내부 상태 벡터( $M^{t+1} = [c_1^{t+1} c_2^{t+1} \Phi_1^{t+1} \Phi_2^{t+1} j^{t+1}]^T$ )를 획득한다(S90).

[0101] 그러나 LU 분해된 행렬(A')이 고차원행렬인 경우, 수학적식 30을 근사 분해법(Approximate factorization)을 이용하여 행렬 분해하여, 수학적식 31을 획득한다(S80).

### 수학적식 31

$$[0102] A'_{N' \times N'} = \mathbb{I} + \Delta t L_{xx} + \Delta t L_{yy} + \Delta t L_{zz} \\ = (\mathbb{I} + \Delta L_{xx})(\mathbb{I} + \Delta L_{yy})(\mathbb{I} + \Delta L_{zz}) + \mathcal{O}(\Delta t^2)$$

[0103] 수학적식 16에서 이미 비선형항으로 이루어진 벡터( $U(M^{t+1})$ )를 2계(Second-order) 정확도를 유지하도록 선형화하였으므로, 오차( $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ )는 동일한 정확도를 유지하면서 생략 가능하다.

[0104] 수학적식 31을 수학적식 25에 적용하게 되면, 수학적식 25는 수학적식 32와 같이 획득된다.

수학식 32

$$\frac{1}{\Delta t} \left( (\mathbb{I} + L_{xx})_{N' \times N'} (\mathbb{I} + L_{yy})_{N' \times N'} (\mathbb{I} + L_{zz})_{N' \times N'} \right) \bar{\mathbf{C}} = \mathbf{R}_{CC}$$

[0105]

[0106]

LU 분해된 행렬(A')은 희소 행렬(sparse matrix)이지만, 수학식 31로 변환된 LU 분해된 행렬(A'<sub>N'×N'</sub>)은 3중 대각 행렬(tridiagonal matrix)의 곱의 형태로 나타난다. 따라서 가우스 소거법(Gaussian elimination)으로 수학식 25를 풀게 되면 계산 비용이 N'<sup>3</sup> = n<sup>9</sup> 인 반면, 수학식 32를 풀게 되면, 계산 비용이 N'<sup>3</sup> = 3n<sup>3</sup>으로 크게 저감된다. 즉 계산 복잡도를 O(n<sup>9</sup>)에서 O(n<sup>3</sup>)으로 줄일 수 있다.

[0107]

이에 LU 분해된 행렬(A')이 고차원인 경우, 수학식 25 대신 수학식 32를 적용하여 수학식 28, 29 및 32을 이용하여 LU 분해된 수학식 23을 풀이함으로써, 이차전지의 이후 내부 상태를 나타내는 내부 상태 벡터 ( $\mathbf{M}^{t+1} = [\mathbf{c}_1^{t+1} \mathbf{c}_2^{t+1} \Phi_1^{t+1} \Phi_2^{t+1} \mathbf{j}^{t+1}]^T$ )를 낮은 계산 비용으로 획득할 수 있다(S90).

[0108]

상기에서는 이차전지 시뮬레이션 방법으로 이차전지 모델을 선정하는 단계(S10)부터 수행하는 것으로 설명하였으나, 실제 이차전지 시뮬레이션 시에는 LU 분해된 행렬(A')의 차원에 따라 연산에 필요한 방정식으로, 수학식 23, 25, 28 및 29 또는 수학식 23, 28, 29 및 32이 미리 지정되어 메모리 등에 저장되어 있으며, 요구되는 파라미터에 대한 측정값이 인가되면, 저장된 수학식에 측정값을 대입하는 단순 계산으로 내부 상태 벡터 ( $\mathbf{M}^{t+1} = [\mathbf{c}_1^{t+1} \mathbf{c}_2^{t+1} \Phi_1^{t+1} \Phi_2^{t+1} \mathbf{j}^{t+1}]^T$ )를 획득하게 된다.

[0109]

상기한 본 실시예에 따른 이차전지 시뮬레이션 방법은 각종 프로세서와 같은 연산 장치에서 실행되는 소프트웨어 프로그램으로 구현될 수 있다.

[0110]

도 2는 본 발명의 일 실시예에 따른 이차전지 시뮬레이션 장치를 포함하는 배터리 시스템을 나타내고, 도 3은 본 발명의 일 실시예에 따른 이차전지 시뮬레이션 장치의 개략적 구성을 나타낸다.

[0111]

도 2 및 도 3을 참조하면, 배터리 시스템은 전력이 충방전되는 이차전지(100), 이차전지(100)를 관리하는 BMS(200) 및 본 실시예에 따른 이차전지 시뮬레이션 장치인 시뮬레이터(300)를 포함한다. 이차전지(100)는 사용 용도에 따라 다양한 종류의 배터리로 구현될 수 있으나, 일 예로 리튬 이온 배터리로 구현될 수 있다.

[0112]

BMS(200)는 다수의 센서를 포함하여 이차전지(100)를 감지하여, 이차전지(100)의 현재 상태를 확인하기 위해 지정된 각종 파라미터를 획득한다. 그리고 획득된 파라미터 중 이차전지(100)의 이후 상태를 예측하기 위해 시뮬레이터(300)에서 요구되는 파라미터에 대한 측정값을 시뮬레이터(300)로 전달하고, 시뮬레이터(300)에서 예측된 이차전지(100)의 이후 상태에 따라 제어 신호를 생성하여 이차전지(100)로 인가함으로써, 이차전지(100)를 관리한다. 즉 이차전지(100)의 과충전, 과열, 노화 등이 억제되도록 이차전지(100)를 제어한다.

[0113]

시뮬레이터(300)는 이차전지(100)에 대응하여 이차전지(100)에 대응하는 모델 방정식이 미리 선정되어 저장되고, 선정된 모델 방정식에 따라 이차전지(100)의 이후 상태를 예측하기 위해 요구되는 파라미터가 미리 설정된다. 그리고 BMS(200)로부터 이차전지(100)의 현재 상태에 대한 설정된 파라미터에 따른 측정값을 인가받아, 지정된 모델 방정식에 대입하여, 이차전지(100)의 이후 상태를 나타내는 내부 상태 벡터 ( $\mathbf{M}^{t+1} = [\mathbf{c}_1^{t+1} \mathbf{c}_2^{t+1} \Phi_1^{t+1} \Phi_2^{t+1} \mathbf{j}^{t+1}]^T$ )를 계산하고, 계산된 내부 상태 벡터의 각 원소값을 BMS(200)로 전달한다.

[0114]

도 3을 참조하면, 시뮬레이터(300)는 통신모듈(310), 메모리(320) 및 프로세서(330)를 포함할 수 있다. 통신모듈(310)은 BMS(200)로부터 이차전지의 현재 상태를 측정한 측정값을 인가받아 메모리(320) 또는 프로세서(330)로 전달하고, 프로세서(330)에서 이차전지(100)에 대응하여 미리 선정된 모델 방정식에 대한 연산을 통해 획득되는 내부 상태 벡터 ( $\mathbf{M}^{t+1} = [\mathbf{c}_1^{t+1} \mathbf{c}_2^{t+1} \Phi_1^{t+1} \Phi_2^{t+1} \mathbf{j}^{t+1}]^T$ )를 BMS(200)로 전달한다.

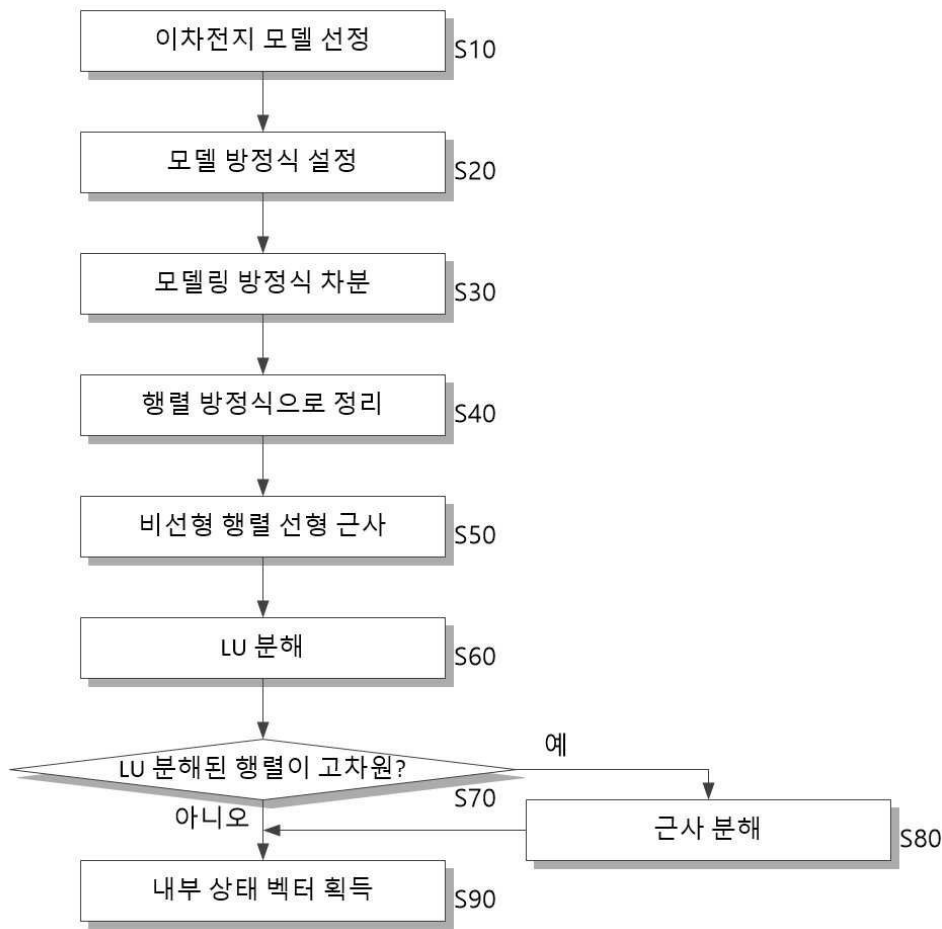
[0115]

메모리(320)는 미리 선정된 이차전지 모델 방정식이 저장되어, 프로세서(330)로 저장된 이차전지 모델 방정식을 전달한다. 그리고 통신모듈(310)로부터 측정값이 인가되면, 인가된 측정값을 저장하고 프로세서(330)로 전달할

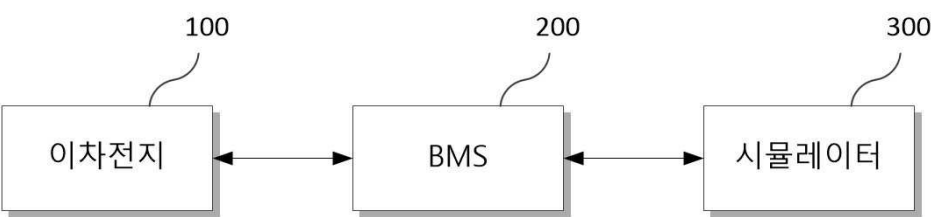


도면

도면1



도면2



도면3

