

# 锂离子动力电池模型理论综述

杨佳兴

上海工程技术大学, 机械与汽车工程学院, 上海

收稿日期: 2023年3月28日; 录用日期: 2023年5月4日; 发布日期: 2023年5月12日

## 摘要

本文对锂离子动力电池的建模理论进行综述, 详细介绍了三类动力电池模型, 即微观层面的电化学反应模型、宏观层面时域的集总模型和宏观层面的频域模型, 三种模型建模思路及其对应产热模型相互有联系也有区别。电化学反应模型基于动力电池的内部反应原理, 准确度较高但计算复杂。时域集总模型计算量小, 但精确度较低, 而频域集总模型理论可以对电池内部机理的电化学阻抗谱实验提供理论指导。

## 关键词

动力电池, 电化学反应模型, 时域模型, 频域模型

# Review of Modeling Theory for Lithium-Ion Power Batteries

Jiaying Yang

School of Mechanical and Automotive Engineering, Shanghai University of Engineering Science, Shanghai

Received: Mar. 28<sup>th</sup>, 2023; accepted: May 4<sup>th</sup>, 2023; published: May 12<sup>th</sup>, 2023

## Abstract

This article reviews the modeling and theory of lithium-ion power batteries, and introduces three types of power battery models in detail, namely, electrochemical models at the micro level, lumped models at the macro level in the time domain, and frequency domain models at the macro level. The three modeling ideas and their corresponding heat generation models are related to each other and have differences. The electrochemical model is based on the internal reaction principle of the power battery, with high accuracy but computational complexity. The time domain lumped model requires less computation, but its accuracy is relatively low. The frequency domain lumped model theory can provide theoretical guidance for electrochemical impedance spectroscopy experiments of battery internal mechanisms.

## Keywords

Power Battery, Electrochemical Model, Time Domain Model, Frequency Domain Model

Copyright © 2023 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

## 1. 引言

动力电池收到越来越多的关注,在该领域中关于电化学系统的数值仿真模型有准二维模型、单粒子模型、集总模型等。准二维模型(P2D 模型)源自于 Newman 等人[1]提出的多孔电极理论,该理论液相部分基于浓溶液理论,固相部分基于多孔电极理论和固相运输动力学,在均质化的多孔电极区域,分布球形电极颗粒,采用菲克扩散定律描述锂离子在固相材料中的嵌入和脱出,该全电池模型操作性极强,得到了广泛的应用。Yang 等人[2]利用该模型研究了磷酸铁锂电池循环容量衰减特性,以 SEI 膜和锂电镀作为主要的容量衰减机制,在原来 P2D 模型的基础上增加了膜阻与浓度随时间的变化项,从数值上分析了相对容量随放电倍率增加而降低,并考虑了 SEI 膜增长的电池最高温度的变化。Ouyang 等人[3]利用 P2D 模型设计了一个基于复合相变材料和冷却通道的热管理系统,以提高锂离子电池的安全性。该模型基于动力电池的内部反应原理,建立了电化学模型的解析形式,可以深层次多角度地研究锂离子电池的各种性能,包括电化学与各物理场的耦合,电池寿命研究,电池参数辨识等方向。其准确度较高,但需要大量的计算,在计算过程中需要降维处理。

除此之外,仍旧有大量的研究者根据不同电池模型的适用情况进行大量的探索,本文基于电化学模型的基本建模规律,对电化学模型、时域模型集总模型、时域模型等效电路模型以及频域模型进行了文献调研,并根据相关文献研究进展进行综述,期望能够给部分研究同仁提供更全面的可选择的模型。

## 2. 电化学模型

### 2.1. 模型介绍

电化学模型为含负极、隔膜和正极的锂离子电池准一维模型,宏观方向沿电极厚度方向,微观方向沿活性物质固体颗粒半径方向。

### 2.2. 模型构建

该模型采用 Newman 等人提出的 P2D 模型。该模型采用体积平均方法,该模型将多孔电极结构划分为正极、负极、隔膜三种多孔均质体,进行如下假设:

- 1) 正负电极区域使用同一套控制方程进行描述;
- 2) 采用平均曲折系数与孔隙率描述隔膜多孔结构的影响;
- 3) 采用等效的传质系数,如等效固相电子电导率、等效液相离子电导率;
- 4) 在模拟的区域内不建立导电剂、粘结剂等物理成分的具体几何形态与定义。
- 5) 任意一点固液两相共存,是一种体积平均意义上的混合相。

在放电过程中,锂离子电池模型内部过程可以分为以下 3 个连续步骤:

- 1) 在负极上,锂离子从石墨固相颗粒中脱出向外扩散,在石墨颗粒表面处发生失去电子的电化学反

应，同时电子进入外电路；

2) 锂离子在液相中经隔膜进入到 NMC 正极固相颗粒界面；

3) 在正极上，锂离子在正极颗粒表面处发生得到电子的电化学反应，同时电子从外电路得到，并且锂离子由活性颗粒表面向内部扩散。

利用该模型 Liu 等[4]分析了基于电化学模型的参数识别，并得到了不同工作条件下的内部物理化学演变。He 等人[5] [6]为不同尺寸的圆柱形锂离子电池建立了电化学 - 热耦合模型，研究其产热和温度分布。Yin 等人[7] [8]将三维电化学模型与二维热学模型耦合，研究了 21700 电池的老化动力学，将其与电化学 - 机械 - 热等因素耦合进行容量衰减的研究。

单粒子模型仍旧作为物理化学模型在文章中被汇总，该模型是指把每个电极看成一个“颗粒”，研究带有固相锂的内部扩散而忽略锂离子在液相中的扩散。由于该理论较为简单，计算速度快单粒子模型最成熟的模型之一[9] [10] [11]。Baba 等人[12]利用单粒子模型进行了锂离子电池的热特性数值模拟，对于 18650 型锂离子电池模拟和实验研究结果取得了良好的一致性。Pozzi 等人[13] [14]开发了具有电解质动力学的单颗粒模型，并表现出对实际参数的良好依从性。

基于此可以看出，电化学模型主要从锂离子电池内部反应机理出发，适用于对电池进行机理分析的研究者，如寿命衰减，容量衰减，多场耦合等研究方向。也可进行锂离子电池热管理研究，并在单电芯基础上进行不同容量、不同内阻的仿真研究。

### 3. 时域集总模型

#### 3.1. 模型介绍

时域上的集总模型常常利用几个集总参数就可以表示出电池的欧姆阻抗、质量传输和电荷转移过程。于是有了以物理化学过程为主但参数较少的集总模型(Lumped parameter Model)。同时也可用传统电路的电压、电阻、电容等元件来描述动力电池的特性，被称作等效电路模型(Equivalent circuit model)。

#### 3.2. 模型构建

##### 1. 集总参数模型

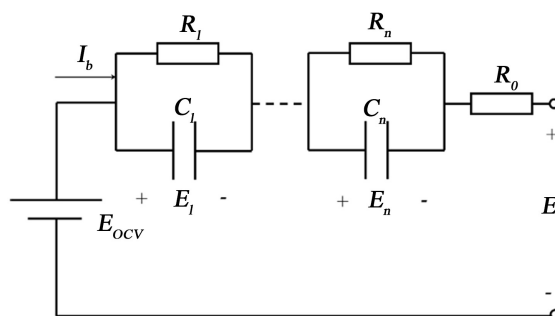
该模型中电池电位的计算与开路电压和三个过电位有关，三个过电位分别是代表电池欧姆内阻的欧姆过电位，放电过程中电池极化的极化过电位与电极颗粒浓度扩散的浓度过电位。其中又因浓度过电位的不同求解方式而衍生出两个基本模型： $\tau$  模型与 RC 电路模型。

该模型定义了欧姆过电位  $E_0$  代表了电池电压的欧姆降。电化学反应是锂离子电池持续充放电能力的基础，在这项工作中用倒置的 Butler-Volmer 公式来定义(阳极和阴极极化曲线为对称的，此时反应传递系数为 0.5)，用极化过电位  $E_{pol}$  来表示。第三个电压降的来源是离子在电极颗粒内部的传输，可以通过增加一个扩散阻抗来表示，可以定义这个因锂离子在电极颗粒内部扩散导致的电压损失为浓度过电位  $E_{conc}$ 。在本节中有两个基本模型用来描述  $E_{conc}$ ，分别是 RC 模型和  $\tau$  模型。这两种模型中都引入了时间常数  $\tau(s)$ 。

##### 2. 等效电路模型

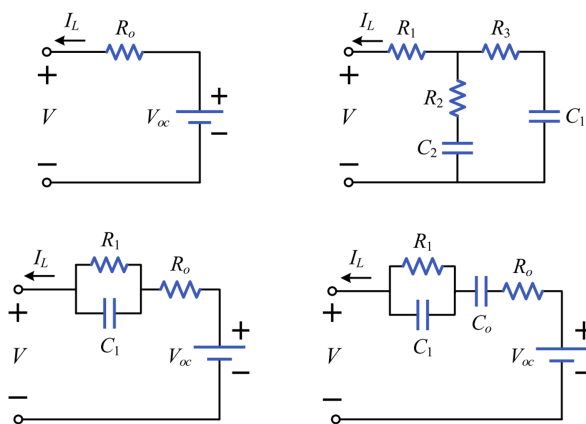
等效电路模型被大量用在动力电池的模拟仿真分析当中，该模型使用电压这一物理量来表示动力电池的电化学与热力学平衡电势，使用  $n$  阶 RC 电路表示电池的动力性特性。

图 1 中， $E_i$  为电池的电化学反应或者浓差极化导致的电压变化，常用的等效电路模型有  $R_{int}$  模型，戴维南模型和双极化模型，该模型分别对应当  $n = 0$ 、 $n = 1$  和  $n = 2$  时的状态方程。



**Figure 1.** Nth order RC equivalent circuit model  
**图 1.** n 阶 RC 等效电路模型

对于时域集总模型来讲，其在建模过程中考虑了动力电池全尺寸特征和全物理场作用，Hu 等人[15]对动力电池的 12 种等效电路模型进行了比较研究，通过综合评估了这些时域集总模型的适用性。图 2 显示了动力电池的一些基本 ECM [16]，其中部分 ECM 可以归类为时域模型。Johnson 等人[17]建立了最简单的 Rint 模型形式包括与电阻串联的理想电压源，如图 2 所示，左上图没有表示出内部极化现象。基于 Rint 模型，Ding 等人[18]通过在图 2 中添加一个并联电阻 - 电容器(RC)谐振模型提出了戴维宁模型。后又有研究者 Yao 等人[19] [20]通过添加了两个或多个 RC 电路以更好地反映一个电池的动态特性。



**Figure 2.** Power battery time domain equivalent circuit model summary  
**图 2.** 动力电池时域等效电路模型汇总

以上介绍了时域集总模型，一种以简化版的物理化学模型为基础，使用较少的电化学参数如电池的欧姆阻抗、极化阻抗以及浓差阻抗进行模拟而产生的集总模型。而另一种是用电压、电阻、电容等元件描述动力电池特性的传统电路，这叫做等效电路模型。这两种集总模型既相互区别，也相互联系。其欧姆阻抗都可以看做是一个电阻元件，而针对极化阻抗与浓差阻抗来说则有不同的区分形式。该类模型因为只用了较少的参数，使得模型可以快速计算。它很难反映动力电池的内部特性，也很难解决动力电池的机理分析，但它经常用作热管理仿真的计算工具。

## 4. 频域模型

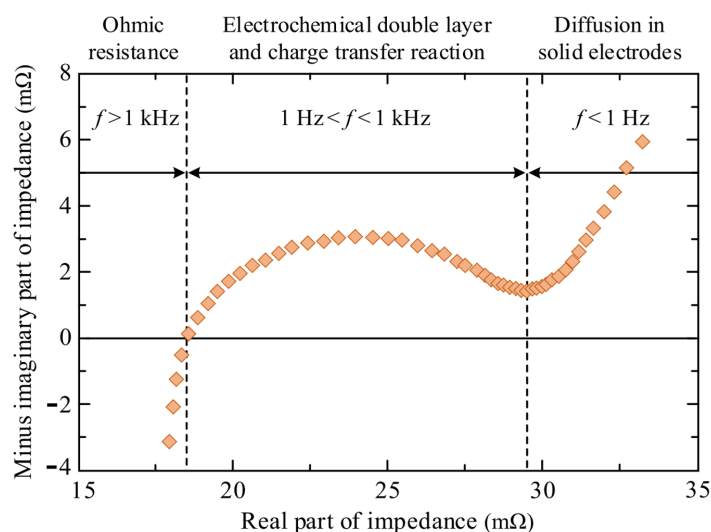
### 4.1. 模型介绍

频域模型为交流阻抗(AC impedance)的实验理论。交流阻抗方法是通过小振幅的正弦波电压或电流为扰动完成对电极系统的测量。

## 4.2. 模型构建

动力电池本质为由两个相组成的电极系统，两相分别为固相与液相，其中固相为电子导体，液相为离子导体。在两相接触的界面，存在着电荷转移，两相之间的电荷转移过程为化学反应。众所周知，化学反应会发生物质变化，即一种物质转换成另一种物质，故被称为电极反应。

频域模型利用了频域中的不同 ECM 来表示。在图中常常用常相位角元件替换纯电容元件，并引入韦伯阻抗来对模型进一步描述[21]。频域模型能够拟合整个频率范围，并且在表示物理现象方面具有更高的精度。尽管如此，它们的模拟速度较慢，结构也比较复杂。选择合适的 ECM 后，就需要通过各种方法确定模型参数，其中 AC 阻抗和 Bode 图都是最经典的[22]。图 3 显示了典型动力电池交流阻抗[23]。



**Figure 3.** Typical AC impedance of power battery  
**图 3.** 动力电池典型交流阻抗

频域模型从交流阻抗测量出发，结合频域模型的理论在时域中进行计算，由于必须使用等效电路进行迭代，所以计算量往往很大。该模型可以认为是等效电路模型的泛化，又由于该模型常用于频域内的交流阻抗拟合，因此可以得到很多关于动力电池反应机理的信息，该模型也具有很大的研究价值。

## 5. 结论

本文从微观到宏观，从时域到频域介绍了三类动力电池模型。三种模型建模思路相互有联系也有区别。电化学模型基于动力电池的内部反应原理，建立了电化学模型的解析形式。时域模型以简化版的物理化学模型为基础对电池进行描述，而频域模型则为动力电池的无损测量理论。因此，在进行动力电池的仿真模拟与实验测量中，上述不同模型理论为了解动力电池的物理化学过程提供了坚实的理论基础。

## 参考文献

- [1] Doyle, M., Fuller, T.F. and Newman, J. (1993) Modeling of Galvanostatic Charge and Discharge of the Lithium/Polymer/Insertion Cell. *Journal of the Electrochemical Society*, **140**, 1526-1533. <https://doi.org/10.1149/1.2221597>
- [2] Yang, Y., Chen, L., Yang, L.J., Du, X.Z. and Yang, Y.P. (2020) Capacity Fade Characteristics of Lithium Iron Phosphate Cell during Dynamic Cycle. *Energy*, **206**, Article ID: 118155. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2020.118155>
- [3] Ouyang, T.C., Liu, B.L., Xu, P.H., Wang, C.C. and Ye, J.L. (2022) Electrochemical-Thermal Coupled Modelling and

- Multi-Measure Prevention Strategy for Li-Ion Battery Thermal Runaway. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **194**, Article ID: 123082. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2022.123082>
- [4] Liu, Y., Tang, S., Li, L.X., *et al.* (2020) Simulation and Parameter Identification Based on Electrochemical-Thermal Coupling Model of Power Lithium Ion-Battery. *Journal of Alloys and Compounds*, **844**, Article ID: 156003. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.156003>
- [5] He, T.F., Zhang, T., Wang, Z.R. and Cai, Q. (2022) A Comprehensive Numerical Study on Electrochemical-Thermal Models of a Cylindrical Lithium-Ion Battery during Discharge Process. *Applied Energy*, **313**, Article ID: 118797. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2022.118797>
- [6] Hamza, M., Li, J.Y., Zhang, W.T., *et al.* (2022) Multi-Scale Electrochemical Thermal Model of Electric Double Layer Capacitor under Galvanostatic Cycling. *Journal of Power Sources*, **548**, Article ID: 231983. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2022.231983>
- [7] Yin, L.T., Björneklett, A., Söderlund, E. and Brandell, D. (2021) Analyzing and Mitigating Battery Ageing by Self-Heating through a Coupled Thermal-Electrochemical Model of Cylindrical Li-Ion Cells. *Journal of Energy Storage*, **39**, Article ID: 102648. <https://doi.org/10.1016/j.est.2021.102648>
- [8] He, C.X., Yue, Q.L., Wu, M.C., Chen, Q. and Zhao, T.S. (2021) A 3D Electrochemical-Thermal Coupled Model for Electrochemical and Thermal Analysis of Pouch-Type Lithium-Ion Batteries. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **181**, Article ID: 121855. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.121855>
- [9] Tamilselvi, S., Gunasundari, S., Karuppiah, N., Razak, R.K.A., Madhusudan, S., Nagarajan, V.M., *et al.* (2021) A Review on Battery Modelling Techniques. *Sustainability*, **13**, Article No. 10042. <https://doi.org/10.3390/su131810042>
- [10] Fotouhi, A., Auger, D.J., Propp, K., Longo, S. and Wild, M. (2016) A Review on Electric Vehicle Battery Modelling: From Lithium-Ion toward Lithium-Sulphur. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **56**, 1008-1021. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2015.12.009>
- [11] Romero-Becerril, A. and Alvarez-Icaza, L. (2011) Comparison of Discretization Methods Applied to the Single-Particle Model of Lithium-Ion Batteries. *Journal of Power Sources*, **196**, 10267-10279. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2011.06.091>
- [12] Baba, N., Yoshida, H., Nagaoka, M., Okuda, C. and Kawauchi, S. (2014) Numerical Simulation of Thermal Behavior of Lithium-Ion Secondary Batteries Using the Enhanced Single Particle Model. *Journal of Power Sources*, **252**, 214-228. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2013.11.111>
- [13] Pozzi, A., Ciaramella, G., Volkwein, S. and Raimondo, D.M. (2019) Optimal Design of Experiments for a Lithium-Ion Cell: Parameters Identification of an Isothermal Single Particle Model with Electrolyte Dynamics. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **58**, 1286-1299. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.8b04580>
- [14] Aldo, R. and Luis, A. (2011) Comparison of Discretization Methods Applied to the Single-Particle Model of Lithium-Ion Batteries. *Journal of Power Sources*, **196**, 10267-10279. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2011.06.091>
- [15] Hu, X.S., Li, S.B. and Peng, H. (2012) A Comparative Study of Equivalent Circuit Models for Li-Ion Batteries. *Journal of Power Sources*, **198**, 359-367. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2011.10.013>
- [16] Wang, Q., Jiang, B., Li, B. and Yan, Y. (2016) A Critical Review of Thermal Management Models and Solutions of Lithium-Ion Batteries for the Development of Pure Electric Vehicles. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **64**, 106-128. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2016.05.033>
- [17] Johnson, V. (2002) Battery Performance Models in ADVISOR. *Journal of Power Sources*, **110**, 321-329. [https://doi.org/10.1016/S0378-7753\(02\)00194-5](https://doi.org/10.1016/S0378-7753(02)00194-5)
- [18] Ding, X., Zhang, D., Cheng, J., Wang, B. and Luk, P.C.K. (2019) An Improved the Venin Model of Lithium-Ion Battery with High Accuracy for Electric Vehicles. *Applied Energy*, **254**, Article ID: 113615. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2019.113615>
- [19] Yao, L.W., Wirun, A., Aziz, J. and Sutikno, T. (2015) Battery State of Charge Estimation with Extended Kalman Filter Using Third Order the Venin Model. *Telkomnika*, **13**, 401-412. <https://doi.org/10.12928/telkomnika.v13i2.1467>
- [20] Xia, B., Sun, Z., Zhang, R. and Lao, Z. (2017) A Cubature Particle Filter Algorithm to Estimate the State of the Charge of Lithium-Ion Batteries Based on a Second-Order Equivalent Circuit Model. *Energies*, **10**, Article No. 457. <https://doi.org/10.3390/en10040457>
- [21] Liu, C., Hu, M., Jin, G., Xu, Y. and Zhai, J. (2021) State of Power Estimation of Lithium-Ion Battery Based on Fractional-Order Equivalent Circuit Model. *Journal of Energy Storage*, **41**, Article ID: 102954. <https://doi.org/10.1016/j.est.2021.102954>
- [22] Ruan, H., Sun, B., Jiang, J., Zhang, W., He, X., Su, X., *et al.* (2021) A Modified-Electrochemical Impedance Spectroscopy-Based Multi-Time-Scale Fractional-Order Model for Lithium-Ion Batteries. *Electrochimica Acta*, **394**, Article ID: 139066. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2021.139066>

- 
- [23] Zou, C., Zhang, L., Hu, X., Wang, Z., Wik, T. and Pecht, M. (2018) A Review of Fractional-Order Techniques Applied to Lithium-Ion Batteries, Lead-Acid Batteries, and Supercapacitors. *Journal of Power Sources*, **390**, 286-296.  
<https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2018.04.033>