

令和 2 年 5 月 21 日現在

機関番号：33302
研究種目：基盤研究(C)（一般）
研究期間：2017～2019
課題番号：17K06318
研究課題名（和文）回路シミュレータ用Liイオン電池物理モデルの開発とマルチドメインシミュレーション

研究課題名（英文）Development of Physics-based Model of Lithium-ion Batteries Running on Circuit Simulator

研究代表者
河野 昭彦（Kono, Akihiko）
金沢工業大学・工学部・准教授

研究者番号：40597689
交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,600,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、各種電気化学方程式による理論計算に連動して動作するリチウムイオン電池（LIB）等価回路モデルを開発した。本モデルは、バトラー・フォルマー方程式、Li⁺拡散方程式、ネルンストの式等によるLIB電池反応の理論計算に従って、等価回路各素子の値が時々刻々変化する独自の計算アルゴリズムを核とする。本モデルは、LIBの定電流充放電特性、パルス充放電特性を高精度に計算し得る。また、本モデルは回路シミュレータ上で動作することから、電力変換器モデルやモータモデルからなる電気自動車システム等のシミュレーションにも適用でき、LIBの出力特性や電気化学的状態をシステム動作に関連付けて解析することができる。

研究成果の学術的意義や社会的意義

近年、リチウムイオン電池（LIB）の用途が急速に拡大しており、高性能LIBの開発研究に加え、LIBを賢く使いこなす技術開発が必要である。本研究ではこの技術の1つとしてLIB動作シミュレーション技術の高度化に取り組んだ。開発モデルは、LIBの電気的出力特性に加え内部電気化学的状態も解析できる特徴があり、更に電気自動車のようなシステム全体のシミュレーションにも適用でき、高性能LIBを使いこなすための基礎技術となり得る。

研究成果の概要（英文）：An physics-based equivalent circuit model of the lithium-ion battery (LIB) working in conjunction with numerical calculations according to electrochemical theories was developed. An developed model was constructed by using a algorithm that parameters of the equivalent circuit continue to be updated reflecting theoretical calculation results of the Butler-Volmer equation, diffusion equations of the Li ion, and Nernst equations of liquid and solid phases. Simulated results of developed model and experimental of constant current discharges and pulsed-charge/discharge were found to be in excellent agreement. In addition, we carried out motor drive simulation assumed EV system using LIB module constructed based on developed model. An developed model calculated the charge and discharge behavior related to the system operation.

研究分野：蓄電デバイス

キーワード：リチウムイオン電池 シミュレーション モデル化

1. 研究開始当初の背景

近年、リチウムイオン電池 (Lithium-Ion Battery: LIB) の用途は、EV や HEV 等の数 100kW クラスの高出力電気システムにおける蓄電池へと拡大している。車載される LIB は、車両の加減速に伴い充放電電流が秒オーダーで変動する。これは LIB を過渡状態とし、充電レベル (State of Charge: SOC) 等の LIB の状態推定やシステムの運転限界の把握を困難にする。したがって、今後は電池システムの設計技術や運転技術の基盤となる電気工学の視点に立った LIB の制御技術、効果的活用技術等の“LIB を使いこなす技術”の深化が重要であり、本研究ではシミュレーションに供する LIB モデルに着目した。

2. 研究の目的

以上のような背景を踏まえ、本研究では、電池システム全体の包括的シミュレーションを通じたシステム設計や運転解析等に利用可能な、回路シミュレータ上で動作する LIB 物理モデルの開発を目的とした。また、このモデルを応用した電池システム、すなわち LIB モジュール、電力変換器、負荷等からなるシステムの全体シミュレーション技術開発に取り組み、システム運転に伴う LIB の電氣的、電気化学的状態、システム運転特性をシミュレーションをベースに解析した。

3. 研究の方法

既存の代表的な LIB モデルとして、物理モデル (電気化学モデル) と RC 等価回路モデルがあるが、これらのモデルでは本研究の目的は達成できない。すなわち、物理モデルは LIB の電池反応を精密に表現した優れたモデルであり LIB の出力特性、安全性・信頼性の理論解析を可能とするが、回路シミュレータ上で動作させられない。したがって、電池システムの全体シミュレーションは困難である。一方、RC 等価回路モデルは回路シミュレータ上で動作させることが可能である。しかしながら、このモデルは R や C の値をチューニングにより決定するため、LIB の電池反応の物理や電池構造と著しく乖離したブラックボックスモデルであり、LIB の電気化学的状態は全く計算できない。したがって、システム動作に伴う LIB の安全性・信頼性の理論的解析は困難である。以上を踏まえ、本研究では物理モデルと等価回路モデルを組み合わせさせた全く新しい LIB モデルの開発を目指すことにした。

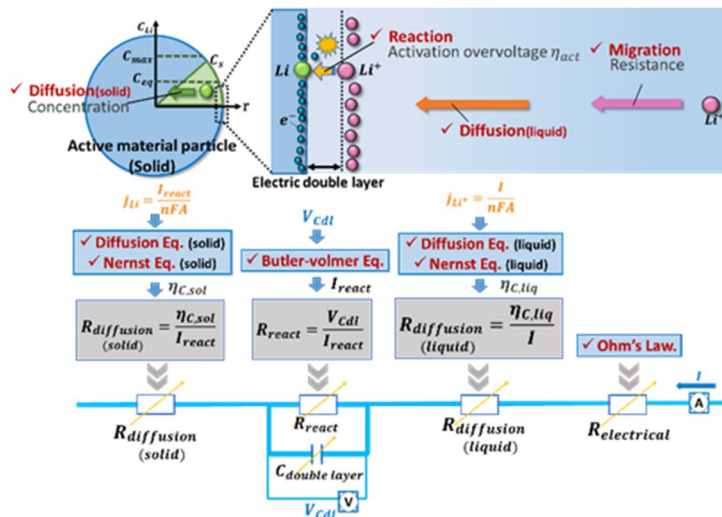
すなわち、本モデルは等価回路を基本骨格とし、この中にセパレータ領域における Li^+ の輸送、電極 / 電解液界面における電気二重層の充電および電子移動反応 (電極反応)、活物質粒子内部における Li^+ の輸送に関する理論計算が組み込まれている。本モデルは、回路シミュレータ上から取得した等価回路各素子の端子電圧、通流電流に基づいて上記電池反応の過電圧と電流との関係を理論計算し、この結果を基に等価回路を構成する一部の可変抵抗素子のパラメータを計算刻み Δt 毎に更新していくアルゴリズムから成る。これにより、電池反応の物理に基づく等価回路に従って、回路シミュレータ上で LIB の動作がシミュレーションできる。このように、LIB の等価回路計算と電気化学理論計算を連成させることにより、例えば以下の優れた特徴が創出される。

特徴 : 等価回路が基本骨格であるため、回路シミュレータ上で動作させられる。したがって、電池システムの全体シミュレーションに適用できる。

特徴 : 等価回路計算と電気化学理論計算を連成させることにより、等価回路モデルを基本骨格としながらも、LIB 内部の電気化学的状態が解析できる。

特徴 : 等価回路を構成する可変抵抗素子のパラメータが電気化学理論計算に基づいて決定されるため、素子の応答が本来の電気化学的現象に近づく。例えば、拡散方程式と可変抵抗素子を連成させれば (拡散抵抗モデル)、反応種濃度勾配の発達に伴う拡散抵抗の変化を表現できる。

特徴 : モデル化に手間のかかる電気化学的現象を、回路素子で簡易的に表現できる。例えば、回路シミュレータ上に実装されているコンデンサを使用すれば電気二重層が簡易的に表現できる。



4. 研究成果

4 - 1. モデル開発

LIB 電池反応および本モデルにおける計算方法の概略を図 1

図 1 LIB 電池反応と本モデルにおける計算方法の概略

に示す。本モデルにおける電気化学理論計算は、LIBの多孔質電極を1つの活物質粒子で代表させる1粒子近似の考え方をベースとする。

LIB内部において、 Li^+ は泳動および拡散により電解液中を移動し、活物質/電解液界面に形成された電気二重層にて電子移動反応を生じる。これに伴い Li^+ は活物質粒子へと挿入され、活物質中を拡散により移動する。本モデルでは、このような一連の電池反応の支配方程式と等価回路を連成計算する。図1における $R_{\text{electrical}}$ は電解液中の Li^+ 泳動抵抗を意味しておりLIBの電気化学インピーダンスの実測値を適用する。 $R_{\text{diffusion}}(\text{liquid})$ は電解液中の Li^+ 拡散抵抗を意味している。このパラメータは、電解液中の Li^+ 拡散方程式とネルンストの式を組み合わせ、これを過電圧を理論計算し、これを過電圧としてバトラー-フォルム方程式から反応電流を計算することにより決定している。すなわち、 R_{react} は電気二重層充電電圧を反応電流で除すことで与えられる。 $R_{\text{diffusion}}(\text{solid})$ は活物質中の Li^+ 拡散抵抗を意味している。このパラメータは、活物質中の Li^+ 拡散方程式とネルンストの式を組み合わせ、これを過電圧を理論計算し、これを過電圧としてバトラー-フォルム方程式から反応電流を計算することにより決定している。

実際のモデルでは、以上の計算を正極と負極について行うとともに、SOC (State of Charge: 充電レベル) 依存性を考慮した開回路電圧、電極の巻回構造を考慮したインダクタンス等も再現し、LIBのフルセルモデルとして構築する。

4-2. 定電流放電およびパルス充放電シミュレーション

電気容量2.24Ahの18650型LIBを供試電池としてパラメータを取得し、充放電シミュレーションを実施した。モデルの構築には、MATLAB/SimulinkおよびSimulink上で動作する回路シミュレータであるSimscapeを使用した。

0.5C(1.12A)、1.0C(2.24A)、2.0C(4.48A)での定電流放電曲線の実測値とシミュレーション値を図2に示す。シミュレーション値は実測値をおおよそ再現している。また、この時の誤差率は、放電末期を除き3%以内に収まっていることが分かっている。すなわち、LIBが実用されるSOC領域(EV用途: SOC10~90%, HEV用途: SOC30~70%)の範囲では、本モデルは精度良くLIBの出力電圧を計算し得ると言える。

SOC50% (開回路電圧 = 3.808V) 時において、OCVに対して $\pm 0.2\text{V}$ のパルス状電圧を印加した際のLIBの応答電流波形のシミュレーション値と実測値を図3(a)に示す。また、応答電流に含まれる、正極の反応電流と電気二重層充電電流のシミュレーション値を図3(b)に示す。応答電流の実測値は、電圧変化に対して瞬間的に立ち上がり、その後急速に減衰した後一定値に収斂している。電圧変化直後に流れる電流は、活物質粒子/電解液界面に形成される電気二重層の充電電流である。この電気二重層充電電流減衰後の定常的な電流は、電気二重層の充電により誘起される電極反応電流である。シミュレーション値は、このような電流応答の実測波形を良好に再現して

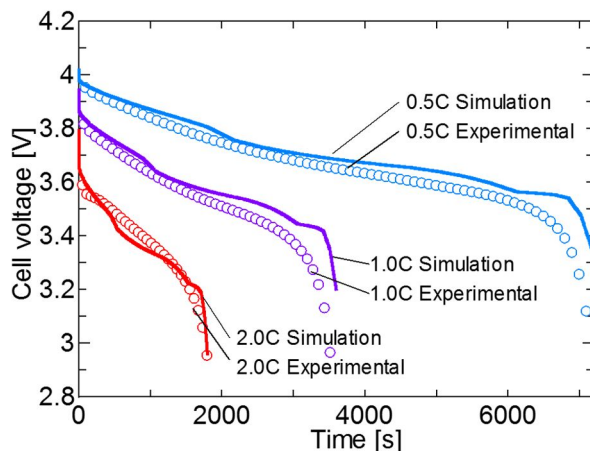
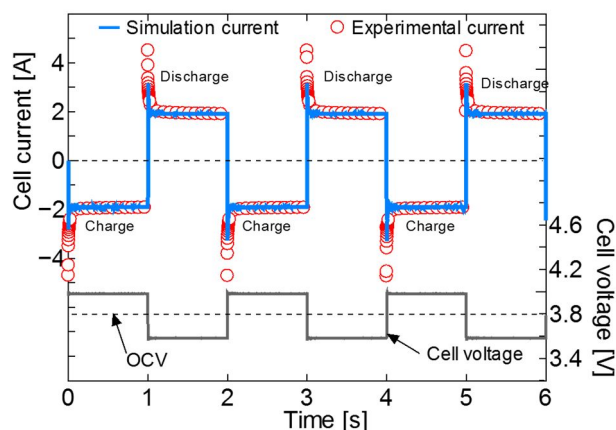
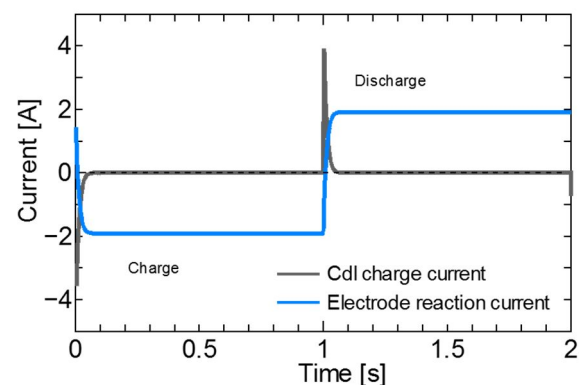


図2 LIBの定電流放電シミュレーション



(a) 応答電流波形



(b) 正極における電極反応電流および電気二重層充電電流のシミュレーション

図3 パルス電圧充放電シミュレーション

いることから、本モデルはLIBの活物質粒子/電解液界面における電池反応の物理メカニズムを良く表現していると言える。

以上のように、等価回路計算と電気化学理論計算を連成させた本モデルでは、定電流充放電のようなLIBの定常特性、およびパルス充放電のようなLIBの過渡特性が精度よく計算できると言える。

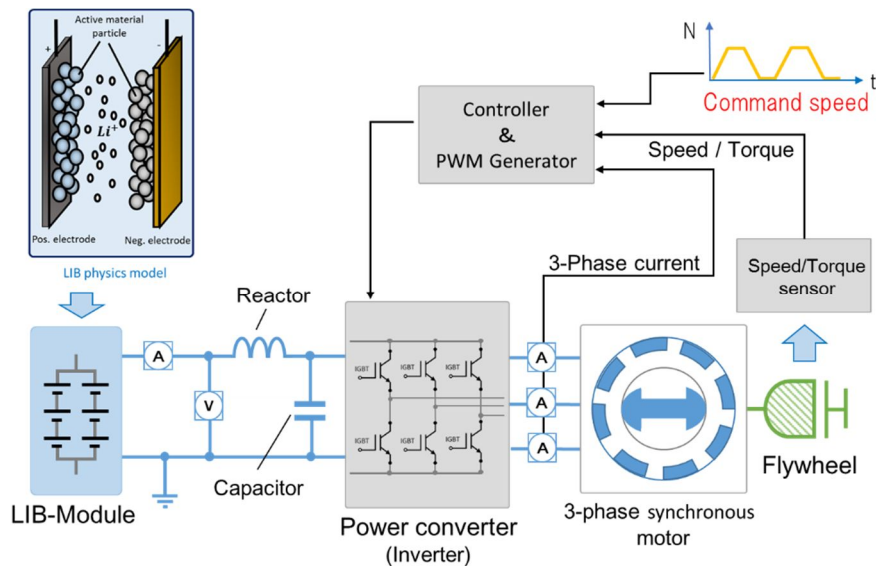


図4 モータ駆動システムモデルの概略

4-3. 電池システムシミュレーション

本モデルは、回路シミュレータ上で動作させられることから、図4のような3相同期モータ駆動システムモデルを構築し、システム運転に伴うLIB動作およびシステム運転特性をシミュレーションをベースに解析した。図4のモデルでは、本モデルを直並列化した8.9kWhのLIBモジュールモデルを電源とし、LCフィルタとIGBT三相インバータを介して慣性モーメント0.8kgm²の負荷(フライホイール)が取り付けられた10kWの3相同期モータと接続している。モータ運転パターンは、モータ停止状態から1秒間かけて1000rpmまで加速し、その後0.5秒間一定速度を維持する。この後、加速期間と同様に1秒間かけて0回転へと減速し、その後0.5秒間停止状態を維持する。以上のような運転を1サイクルとし、これを継続する。この試験では、LIBの過渡特性に重点を置いた解析とするため、短時間のうちに極端な加減速を行うような運転条件としている。

モータ回転速度、モータトルク、モータ固定子電流(一相分)、LIBモジュール電流、LIB出力電力、LIB SOCの計算値を図5に示す。モータ加速時は、LIBの放電電流および固定子電流の周波数が増加しており、機械的負荷を指令値通りに回転させるためインバータがLIBに放電を要求している様子が見られる。一方、1000rpmの定速運転時では、蓄積されたエネルギーによりフライホイールが自立的に回転するため、固定子電流およびLIBの放電電流がともに急減している。また、モータ減速直後に、LIBへの充電電流が急増している。これは、高速で回転しているフライホイールの減速により、LIBに大きな回生電力が投入されていることに対応する。また、LIBへの入出力電力の変化に対応し、LIBのSOCが増減している。加減速サイクルを重ねるごとに徐々にSOCが低下していく挙動が見られ、LIB、電力変換器およびモータで生じる電力損失の影響が示唆される。

モータの加速期間および減速期間の正極活物質粒子内部のLi⁺濃度分布のシミュレーション値

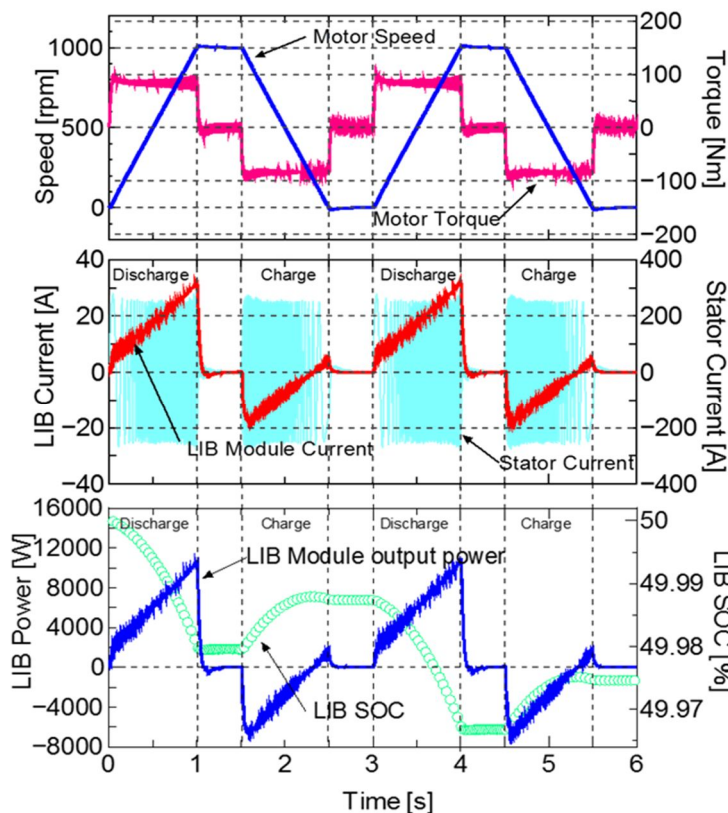


図5 モータ駆動シミュレーションにおけるモータ回転速度、モータトルク、モータ固定子電流、LIBモジュール電流、LIBモジュール出力電力、LIB SOC

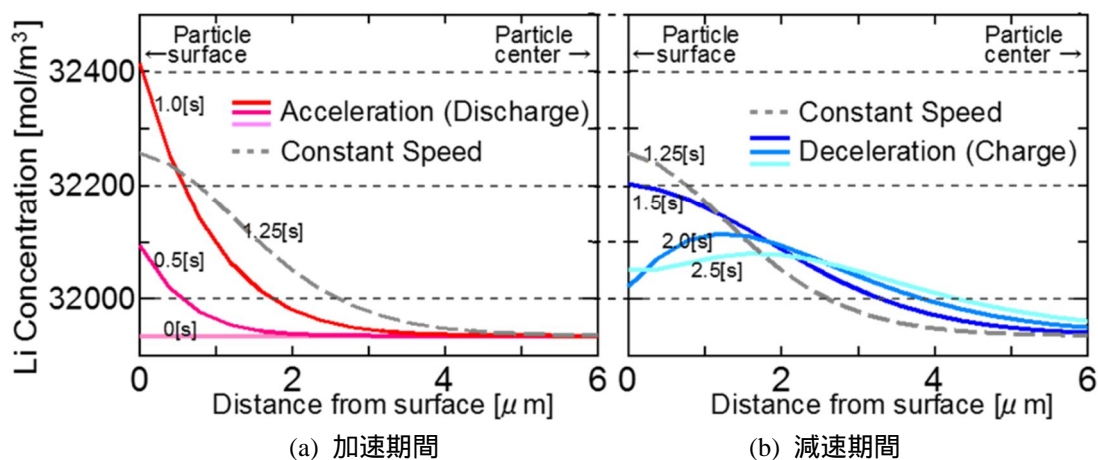


図 6 正極活物質粒子内部の Li 濃度分布

を図 6(a)および(b)に示す。加速期間は、LIB が放電動作をとるため正極活物質粒子に Li⁺が挿入される。このとき、モータ速度の上昇にしたがって徐々に放電電流値およびモータ出力が増加するため、加速期間の末期ほど電流値が大きくなり、活物質粒子表面の Li⁺濃度上昇が顕著となる。一方、減速期間では LIB が充電動作を取るため正極活物質粒子から Li⁺が脱離する。このとき、減速期間の初期に高速回転するフライホイールが瞬時に大きなエネルギーを放出するため、LIB には大電流が投入されるが、その後の減速期間の末期に向けては充電電流値が徐々に減少する。これに従い、減速期間初期には活物質粒子表面の Li⁺濃度低下が顕著であるが、放電時間の経過とともに Li⁺濃度低下は次第に緩和する。このように本モデルでは、システムの運転に伴う LIB 内部の電気化学的状態変化も計算可能である。

4 - 4 . 成果のまとめ

以上のように、本研究では、LIB の電池反応の物理を取り入れた等価回路モデルおよびこのモデルを応用した回路シミュレータ上での LIB 充放電シミュレーション技術の開発を行った。セパレータ領域における Li⁺の輸送、電極 / 電解液界面における電気二重層の充電および電極反応、活物質粒子内部における Li⁺の輸送を記述する各種電気化学方程式の数値計算と、LIB 全体の電池反応を模擬した等価回路による回路計算を連動させる新たなアルゴリズムを開発し、回路シミュレータ上で LIB の充放電特性を高精度にシミュレーションすることに成功した。また、本モデルに電力変換器モデル、負荷（モータ等）モデルを回路シミュレータ上で接続し、システム全体の動作シミュレーションを通じた LIB の性能解析、システムの運転解析等を実施した。本モデルは物理モデルであるため、LIB の電圧、電流応答の理論解析が可能であることを示すとともに、システム動作に伴う LIB 内部の電気化学的状態変化も解析可能であることを示した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Kosuke Sato, Akihiko Kono, Hiroaki Urushibata, Yoji Fujita, Masato Koyama	4. 巻 208
2. 論文標題 Physics-based model of lithium-ion batteries running on a circuit simulator	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Electr. Eng. Jpn.	6. 最初と最後の頁 18-63
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/eej.23237	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 佐藤航輔, 河野昭彦, 漆畑広明, 藤田洋司, 小山正人	4. 巻 139
2. 論文標題 回路シミュレータ上で動作するリチウムイオン電池物理モデル	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 電気学会論文誌D（産業応用部門誌）	6. 最初と最後の頁 523-534
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1541/ieejias.139.523	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計10件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 1件）

1. 発表者名 大口正憲, 河野昭彦, 漆畑広明, 藤田洋司, 小山正人
2. 発表標題 回路シミュレータ対応Liイオン電池物理モデル =Liイオン輸送特性のモデル化=
3. 学会等名 2019年電気学会産業応用部門大会講演論文集
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 佐藤航輔, 河野昭彦, 漆畑広明, 藤田洋司, 小山正人
2. 発表標題 リチウムイオン電池物理モデルを応用したモータ駆動シミュレーション
3. 学会等名 平成30年電気学会産業応用部門大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 A. Kono, M. Tokito, K. Sato, H. Urushibata, and Y. Fujita
2. 発表標題 Battery Performance Analysis Combined with Circuit Simulation and Electrochemical Calculation
3. 学会等名 2018 ECS and SMEQ Joint International Meeting (AIMES2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 佐藤航輔, 河野昭彦, 漆畑広明, 藤田洋司, 小山正人
2. 発表標題 回路シミュレータ上で動作するリチウムイオン電池物理モデル
3. 学会等名 第59回電池討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 河野昭彦, 漆畑広明, 藤田洋司
2. 発表標題 電気二重層キャパシタにおける活性炭細孔内の電位・イオン濃度分布解析
3. 学会等名 平成31年電気学会全国大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 佐藤航輔, 河野昭彦, 漆畑広明, 藤田洋司
2. 発表標題 各種過電圧の独立計算に基づく単一活物質粒子リチウムイオン電池モデルの開発
3. 学会等名 平成29年度電気学会産業応用部門大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 河野昭彦, 吉澤純一, 時任倫央, 佐藤航輔, 漆畑広明, 藤田洋司
2. 発表標題 回路シミュレータを応用した電池反応解析
3. 学会等名 第58回電池討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 金城敬太, 佐伯佳彦, 小西拓斗, 河野昭彦, 漆畑広明, 藤田洋司
2. 発表標題 3極セルを応用したリチウムイオン電池のパルス充放電特性解析
3. 学会等名 平成30年電気学会全国大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 河野昭彦, 時任倫央, 佐藤航輔, 金城敬太, 漆畑広明, 藤田洋司
2. 発表標題 回路シミュレータを応用したリチウムイオン電池の電池反応解析
3. 学会等名 平成30年電気学会全国大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 佐藤航輔, 河野昭彦, 漆畑広明, 藤田洋司
2. 発表標題 回路シミュレータ上で動作するリチウムイオン電池物理モデルの開発
3. 学会等名 平成30年電気学会全国大会
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

漆畑・藤田・河野研究室
http://kitnet.jp/laboratories/lab0045/index.html?_ga=2.67596177.1284008755.1525146068-1745675162.1365419782

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	漆畑 広明 (Urushibata Hiroaki) (40723367)	金沢工業大学・工学部・教授 (33302)	
研究分担者	藤田 洋司 (Fujita Yoji) (40720222)	金沢工業大学・工学部・教授 (33302)	