

Research and Modeling of Lithium-Ion Batteries

Duong Van Anh^{*}, Tuan Pham Thanh, Tung Duong Tuan, Kien Do Nguyen Trung,
Dung Nguyen Van

Ho Chi Minh City University of Technology and Education, Vietnam

^{*}Corresponding author. Email: duongva@hcmute.edu.vn

ARTICLE INFO

Received: 17/03/2025
Revised: 25/04/2025
Accepted: 03/06/2025
Published: 28/11/2025

KEYWORDS

Lithium - ion;
Batteries;
Electrochemical model;
TDMA;
Modeling.

ABSTRACT

With the growing demand for Lithium-ion (Li-ion) batteries in personal electronic devices and energy storage systems, modeling their operational behavior has become essential for optimizing design and improving control strategies. Among various cathode materials, Lithium Nickel Manganese Cobalt Oxide (LiNiMnCoO₂ – NMC) is particularly noteworthy due to its high energy density, long cycle life, and adaptability under diverse operating conditions. This study develops a simulation model for the charge/discharge processes of Li-ion batteries employing NMC cathodes, using a system of partial differential equations (PDEs) to describe electrochemical kinetics, mass conservation, and charge conservation. The finite element method is implemented in MATLAB to solve the PDEs and analyze the spatial distribution of electric potential, current density, and ion concentration. Simulations are conducted at charge/discharge rates of 1C, 2C, and 10C. These C-rates represent typical real-world usage conditions: 1C corresponds to standard operation aimed at maximizing battery lifespan, 2C represents moderate load scenarios, and 10C simulates high-load conditions suitable for high-power applications such as electric vehicles. The simulation results provide a theoretical foundation for optimizing battery design and control, as well as a valuable reference for students and research scholars.

Nghiên cứu và mô hình hóa pin Lithium-Ion

Văn Ánh Dương^{*}, Phạm Thanh Tuấn, Dương Tuấn Tùng, Đỗ Nguyễn Trung Kiên,
Nguyễn Văn Dũng

Trường Đại học Sư phạm Kỹ thuật Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

^{*}Tác giả liên hệ. Email: duongva@hcmute.edu.vn

THÔNG TIN BÀI BÁO

Ngày nhận bài: 17/03/2025
Ngày hoàn thiện: 25/04/2025
Ngày chấp nhận đăng: 03/06/2025
Ngày đăng: 28/11/2025

TỪ KHÓA

Lithium – ion;
Pin;
Mô hình điện hóa;
TDMA;
Mô hình hóa.

TÓM TẮT

Trước nhu cầu ngày càng gia tăng của pin Lithium-ion (Li-ion) trong các thiết bị điện tử cá nhân và hệ thống lưu trữ năng lượng, việc mô hình hóa hành vi vận hành của pin trở nên thiết yếu nhằm phục vụ thiết kế tối ưu và điều khiển hiệu quả. Trong số các vật liệu cathode, Lithium Nickel Manganese Cobalt Oxide (LiNiMnCoO₂ – NMC) được chú ý nhờ mật độ năng lượng cao, tuổi thọ chu kỳ dài và khả năng thích ứng với nhiều điều kiện vận hành. Nghiên cứu này xây dựng mô phỏng quá trình sạc/xả pin Li-ion sử dụng cathode NMC bằng hệ phương trình vi phân từng phần (PDEs), mô tả chi tiết động học điện hóa, bảo toàn khối lượng và điện tích. Phương pháp phần tử hữu hạn được triển khai trên Matlab để tính toán và khảo sát sự phân bố điện thế, mật độ dòng và nồng độ ion. Mô phỏng được thực hiện tại các tốc độ sạc/xả 1C, 2C và 10C. Các tốc độ này đại diện cho các chế độ vận hành thực tế: 1C phản ánh điều kiện tiêu chuẩn giúp tối ưu tuổi thọ pin; 2C là mức tải trung bình; trong khi 10C biểu thị điều kiện tải cao, phù hợp với các ứng dụng yêu cầu công suất lớn như xe điện. Kết quả mô phỏng cung cấp nền tảng cơ sở lý thuyết cho việc tối ưu hóa thiết kế và kiểm soát pin, hoặc tài liệu tham khảo cho sinh viên, học viên nghiên cứu.

Doi: <https://doi.org/10.54644/jte.2025.1849>

Copyright © JTE. This is an open access article distributed under the terms and conditions of the [Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License](https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/) which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium for non-commercial purpose, provided the original work is properly cited.

1. Giới thiệu

Pin Lithium-ion (Li-ion) là một loại pin phổ biến, được ứng dụng rộng rãi trong các thiết bị điện tử như điện thoại di động, laptop, xe điện và nhiều sản phẩm công nghiệp khác. Với cấu trúc gồm cực dương làm từ hợp chất lithium và cực âm thường là graphite, pin Li-ion nổi bật nhờ mật độ năng lượng cao, trọng lượng nhẹ và khả năng duy trì hiệu suất ổn định qua nhiều chu kỳ sạc xả. Nhận thấy được tiềm năng to lớn của pin Lithium-ion, nhóm nghiên cứu đã tiến hành nghiên cứu và mô hình hóa pin Lithium-ion NMC thông qua việc sử dụng mô hình điện hóa một chiều bằng cách sử dụng các phương trình vi phân từng phần gồm hai phương trình bảo toàn khối lượng và hai phương trình bảo toàn điện tích ở điện cực, chất điện phân được giải bằng phương pháp rời rạc hóa. Một phương trình động học và một phương trình xác định trạng thái sạc SOC cùng với điện áp mạch ngoài. Toàn bộ quy trình tính toán được thực hiện trên phần mềm Matlab/Simulink.

Tình hình nghiên cứu trên thế giới:

Pin Lithium-ion (Li-ion) là trái tim của xe điện, với lớp ngăn cách, chất điện phân và điện cực quyết định hiệu suất, an toàn và tuổi thọ, được các nhà nghiên cứu quốc tế tối ưu hóa thông qua mô hình hóa số, vật liệu tiên tiến và công nghệ mới. *Yifu Li, Zhongchao Tan và Wei Zhang* [1] phát triển mô hình số cho pin LiFePO_4 38120, cho thấy độ dày lớp ngăn cách tăng từ 5 μm lên 100 μm làm giảm mật độ năng lượng từ 148,8 Wh/kg xuống 110,6 Wh/kg, giảm điện áp ổn định 0,02V, dung lượng xả từ 11,1 Ah xuống 6,3 Ah, nhưng giảm nhiệt độ pin, tăng an toàn; độ xốp tối ưu 80% cải thiện truyền khối, hỗ trợ sạc nhanh, và độ dẫn nhiệt tăng từ 0,3 $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$ lên 1,0 $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$ giảm nhiệt độ pin 0,4 K, giảm nguy cơ quá nhiệt. *Dhrupad Parikh, Jeffrey Allen và Robert Kee* [2] so sánh lớp ngăn cách Celgard 2325 và Celgard 2500, chứng minh Celgard 2500 có điện trở thấp hơn (2,23 Ω/cm^2) và thấm ướt điện phân tốt hơn, cải thiện dung lượng 57% ở 2C và 47% ở 3C, lý tưởng cho sạc nhanh. *Sebastian Klick, Martin Schulze và Hans Müller* [3] chỉ ra pin với lượng chất điện phân thấp (2,1 mL, hệ số lấp đầy 0,9) suy giảm dung lượng 60–85% sau 4 tuần, so với chỉ 10% ở 3,5 mL, do khô cạn điện phân tăng trở kháng ion. *Rahifa Ranom, Ahmad Zaki và Siti Noor* [4] sử dụng phương pháp đường thẳng (MOL) cho pin LiFePO_4 , cho thấy độ khuếch tán ion Lithium $6 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$ tăng hiệu suất phóng điện 30%, nồng độ ion ban đầu từ 800 mol/m³ lên 1200 mol/m³ tăng hiệu suất 14%, kéo dài thời gian sử dụng. *Chris Manzie, Changfu Zou và Dragan Nesic* [5] phát triển mô hình hạt đơn từ 17 phương trình đạo hàm riêng, đạt sai số RMS dưới 1% ở 0,5C, nhưng cần độ phân giải cao hơn ở 10C, phù hợp sạc nhanh công cộng. *Ao Li, Wei Wang và Cheng Wang* [6] sử dụng phân tích phần tử hữu hạn và động lực học phân tử, dự đoán vận chuyển ion và an toàn lớp ngăn cách, ngăn đoán mạch trong tai nạn. *D.Miranda, Carlos Costa và Susana Lanceros-Mendez* [7] tối ưu lớp ngăn cách với độ xốp trên 50% và dày 1–32 μm , đảm bảo độ bền cơ học.

Tình hình nghiên cứu ở Việt Nam:

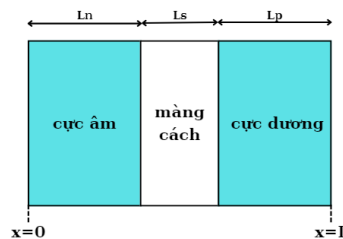
Việt Nam đang nổi lên như một thị trường xe điện tiềm năng, với sự phát triển của các hãng như VinFast và nhu cầu năng lượng tái tạo hỗ trợ sạc xe. Với bức xạ mặt trời cao (4–5 kWh/m²/ngày) và 1.600–2.700 giờ nắng/năm, pin Li-ion có thể tích hợp vào các trạm sạc sử dụng điện mặt trời, giảm phụ thuộc vào lưới điện. Tuy vậy việc nghiên cứu ở Việt Nam còn khá nhiều hạn chế nhưng đang được đẩy mạnh nhất. Nghiên cứu của đề tài “*Nghiên cứu, mô hình hóa và mô phỏng pin Lithium-ion sử dụng cho ô tô điện bằng phần mềm Matlab/Simulink*” [8] tập trung vào việc nghiên cứu mô hình điện hóa một chiều kết hợp với phần mềm Matlab/Simulink để mô phỏng quá trình sạc và xả pin. Giải bằng phương pháp thể tích hữu hạn để phân tích và so sánh các thông số như điện áp, điện thế tại từng tọa độ vị trí trong pin và nồng độ theo thời gian và tốc độ sạc/xả. “*Nghiên cứu mô hình nhiệt động học của pin Lithium-Ion 18650 bằng phương pháp số (COMSOL Multiphysics)*” [9] nghiên cứu mô hình nhiệt-điện hóa của Pin Lithium-ion bằng phương pháp số. Sự thay đổi của dòng điện và nhiệt của pin được nghiên cứu trên vấn đề nhiệt sinh ra trong tế bào pin và tản nhiệt ra môi trường trong điều kiện các chu kỳ

sạc/xả khác nhau. Từ cơ sở các nghiên cứu trước, cùng với nhu cầu sử dụng pin, tối ưu pin trên các ô tô điện hiện nay. Tác giả tiến hành tính toán, mô phỏng pin Lithium-ion để nghiên cứu: Mối liên hệ giữa điện áp làm việc và trạng thái sạc (SOC) và độ xả (DOD) ở các tốc độ sạc/xả khác nhau. So sánh sự khác nhau của giá trị điện áp làm việc khi thay đổi các thông số vật lý (độ dày điện cực,...) ở các tốc độ sạc/xả khác nhau. So sánh, nhận biết sự thay đổi các giá trị điện thế trên điện cực, điện thế trong chất điện phân trên miền tọa độ pin ở tốc độ xả, sạc 1C ở các bước thời gian khác nhau. So sánh, nhận biết sự thay đổi nồng độ ion Lithium trong chất điện phân và trên miền tọa độ hạt ở các bước thời gian khác nhau với tốc độ xả, sạc 1C.

2. Mô hình điện hóa một chiều

2.1. Cơ sở lý thuyết

Quy ước cấu trúc chung của một cell pin Lithium ion:



Hình 1. *Giản đồ cấu tạo một viên pin Lithium*

Hình 1 minh họa cấu trúc cơ bản của một cell pin Lithium - ion bao gồm ba miền: Điện cực dương, màng cách điện và cực âm, cả ba miền này đều được nhúng hoàn toàn trong chất điện phân tạo điều kiện cho ion Lithium di chuyển. Trong quá trình hoạt động sạc và xả, ion Lithium mang điện tích dương được khuếch tán từ điện cực môi trường chất điện phân và qua màng cách điện rồi di chuyển tới điện cực còn lại và khuếch tán vào điện cực. Màng cách điện thường có độ xốp cao đóng vai trò là một lớp cách điện ngăn cản các hạt electron đi qua và buộc các hạt electron mang điện tích âm phải di chuyển qua mạch ngoài. [10], [11]

Mô hình điện hóa phụ thuộc vào nồng độ của ion Lithium trên bề mặt của hạt hình cầu. Vì thế việc thu được nồng độ ion Lithium trên bề mặt hạt vô cùng quan trọng. [12]

$$C_s(x, t) = C_s(x, r, t) \quad (1)$$

Phương trình bảo toàn khối lượng ở chất điện phân:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\epsilon_e C_e) = \frac{\partial}{\partial x} (D_e^{eff} \nabla C_e) + \frac{1-t_+}{F} j_{Li} \quad (2)$$

Phương trình 2 được giải cho toàn bộ miền của pin với điều kiện biên bằng 0 tại hai điểm tiếp xúc với bộ thu dòng(tức tại $x=0$ và $x=L$) [12]. Hệ số truyền, thể tích pha điện phân, hệ số khuếch tán hiệu quả được coi là không đổi trên cả điện cực âm, điện cực dương và màng phân cách, tuy nhiên giá trị của hệ số truyền sẽ khác nhau tại mỗi miền.

Hệ số khuếch tán hiệu quả được tính như sau:

$$D_e^{eff} = \epsilon_e^\gamma D_e \quad (3)$$

Điều kiện biên cho phương trình bảo toàn khối lượng ở chất điện phân:

$$\frac{\partial C_e}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{\partial C_e}{\partial x} \Big|_{x=L} = 0 \quad (4)$$

Phương trình bảo toàn điện tích ở điện cực:

$$\frac{\partial}{\partial x} (\sigma_{eff} \nabla \varphi_s) = j_{Li} \quad (5)$$

Độ dẫn điện hiệu dụng trong điện cực (S/m) σ_{eff} được coi là không đổi trên hai miền điện cực nhưng có thể có các giá trị khác nhau ở mỗi điện cực. Phương trình 5 chỉ áp dụng tính toán cho điện cực âm và điện cực dương.

Điều kiện biên:

$$-\sigma_{-}^{eff} \frac{\partial \varphi_s}{\partial x} \Big|_{x=0} = \sigma_{+}^{eff} \frac{\partial \varphi_s}{\partial x} \Big|_{x=L} = \frac{I}{A} \quad (6)$$

$$\frac{\partial \varphi_s}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{\partial \varphi_s}{\partial x} \Big|_{x=L_n+L_s} = 0 \quad (7)$$

Phương trình bảo toàn điện tích ở chất điện phân:

$$\frac{\partial}{\partial x} (k^{eff} \frac{\partial}{\partial x} \varphi_e) + \frac{\partial}{\partial x} (k_d^{eff} \frac{\partial}{\partial x} (\ln C_e)) = j_{Li} \quad (8)$$

Phương trình 8 được áp dụng cho toàn bộ miền tính toán trong chất điện phân

Công thức tính hệ số khuếch tán hiệu quả:

$$k_d^{eff} = \frac{2RTK^{eff}}{F} (t_+ - 1) \left(1 + \frac{\partial \ln f}{\partial \ln C_e} \right) \quad (9)$$

Công thức tính độ dẫn ion hiệu quả:

$$k^{eff} = k \varepsilon_e \gamma \quad (10)$$

$$k = 15.8e - 4C_e \exp\left(0.85 \left(\frac{C_e}{1000}\right)^{1.4}\right) \quad (11)$$

Điều kiện biên: tại hai bộ thu dòng, không hàm chứa chất điện phân nên ta có điều kiện biên như sau:

$$\frac{\partial \varphi_e}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{\partial \varphi_e}{\partial x} \Big|_{x=L} = 0 \quad (12)$$

Phương trình động học Butler-Volmer

$$j_{Li} = a_s i_0 \left[\exp\left(\frac{\alpha_a F}{RT}\right) \eta - \exp\left(-\frac{\alpha_c F}{RT}\right) \eta \right] \quad (13)$$

Mật độ dòng trao đổi i_0 được tính dựa trên nồng độ ion Lithium trong chất điện phân và sự chênh lệch giữa nồng độ ion Lithium tối đa với nồng độ ion Lithium trên bề mặt của điện cực [13]

$$i_0 = k_0 C_e^{\alpha_a} (C_{s,max} - C_{s,surface})^{\alpha_a} C_{s,surface}^{\alpha_c} \quad (14)$$

Quá thế được tính dựa trên sự chênh lệch giữa điện thế ở điện cực, điện thế ở chất điện phân và điện thế cân bằng. [13]

$$\eta = \varphi_s - \varphi_e - U \quad (15)$$

Điện thế cân bằng được đánh giá như là một hàm số của nồng độ pha rắn ở bề mặt hạt. Điện thế cân bằng là điện thế của vật liệu rắn tại một vị trí x cụ thể khi không có dòng điện chạy bên trong pin

Điện thế cân bằng ở điện cực âm:

$$U_n = 8.0029 + 5.0647x - 12.578x^{0.5} - \frac{8.6322e-4}{x} + (2.1765e-5)x^{1.5} - 0.46016 \exp(15(0.06 - x)) - 0.55364 \exp(-2.4326(x-0.92)) \quad (16)$$

Điện thế cân bằng ở điện cực dương:

$$U_p = 85.681y^6 - 357.7y^5 + 613.89y^4 - 555.65y^3 + 281.06y^2 - 77.648y - 0.30987exp(5.657y^{115}) + 13.1983 \quad (17)$$

Hệ số x và y trong hai phương trình 16 và 17 là các hệ số cân bằng hóa học, là tỉ số của nồng độ ion Lithium bề mặt với nồng độ ion Lithium tối đa trong điện cực. [12]

$$x = \frac{C_{s,e-}}{C_{s,max}} \quad y = \frac{C_{s,e+}}{C_{s,max}} \quad (18)$$

Trạng thái sạc là một tham số phụ thuộc vào thời gian, có nhiều phương pháp toán học khác nhau để tính toán tham số này, và một phương pháp thông dụng là tính nồng độ Lithium trung bình ở pha rắn và các hệ số cân bằng hóa học x và y dựa trên trạng thái sạc 0% và trạng thái sạc 100%.

$$SOC(t) = \frac{\left(\frac{C_{s,avg}}{C_{s,max}}\right) - x_{0\%}}{x_{100\%} - x_{0\%}} \quad (19)$$

Nồng độ ion Lithium trung bình trong pha rắn $C_{s,avg}$ có thể tính bằng cách lấy tích phân nồng độ Lithium trong pha rắn trên thể tích chia cho thể tích của pha rắn.

Độ xả của pin được tính theo công thức:

$$DOD(t) = 1 - SOC(t) \quad (20)$$

Điện áp làm việc của pin được tính theo công thức: [12], [13], [14]

$$V(t) = \varphi_s(L,t) - \varphi_s(0,t) - \frac{R_f}{A} I(t) \quad (21)$$

Trong phương trình 21 R_f là điện trở tiếp xúc giữa điện cực và bộ thu dòng trên một đơn vị diện tích bề mặt.

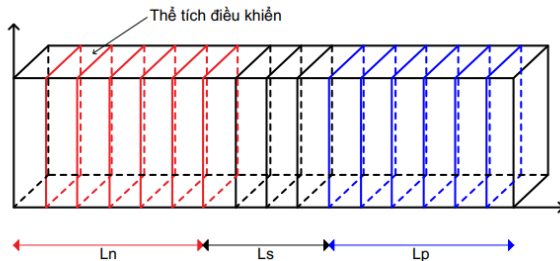
2.2. Phương pháp giải

Trong mô hình này ta sử dụng phương pháp thể tích hữu hạn (Finite Volume Method - FVM) để rời rạc hóa các phương trình vi phân từng phần. Phương pháp này dùng để chỉ ra sự thay đổi các thông số tính toán giữa các miền tính toán để rút ra đặc tính động học của ion Lithium hay sự phân bố các giá trị có thể thay đổi như điện thế trên điện cực,... là như thế nào [12].

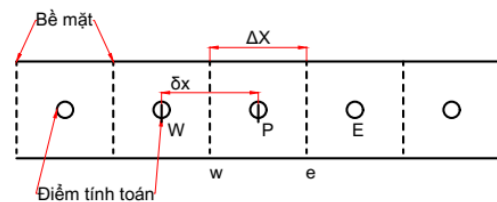
Việc đánh số các điểm lưới và các mặt của các miền con được thực hiện sao cho việc đánh số các mặt được thực hiện trước việc đánh số các điểm lưới. Ở đây, hệ tọa độ Descartes được sử dụng để giải các phương trình vi phân từng phần. Phần bên trái của miền tính toán là điện cực âm có độ dày L_N , phần ở giữa của miền tính toán là vách ngăn có độ dày L_S và phần bên phải của miền tính toán là điện cực dương có độ dày L_P .

Các phương trình bảo toàn khối lượng, phương trình bảo toàn điện tích sẽ có dạng cơ bản là:

$$\frac{d}{dx} \left(k \frac{d\phi}{dx} \right) + S = 0 \quad (22)$$



Hình 2. Hệ tọa độ Descartes [15]



Hình 3. Xác định các điểm lưới trên từng miền con [16]

Ta giải phương trình trên bằng cách đưa về dạng hệ phương trình ba đường chéo

$$a_P \Phi_P = b_E \Phi_E + c_W \Phi_W + d \quad (23)$$

Trong đó:

$$a_P = \frac{k_E}{\delta x_E} + \frac{k_W}{\delta x_W}; \quad b_E = \frac{k_E}{\delta x_E}; \quad c_W = \frac{k_W}{\delta x_W}; \quad d = S2\delta_x \quad (24)$$

Thuật toán Thomas còn được gọi là thuật toán ma trận ba đường chéo (TDMA) [12]. Nó là một dạng đơn giản của phép khử Gauss để giải hệ phương trình ba đường chéo. Hệ phương trình ba đường chéo là hệ phương trình có các hệ số khác không chỉ xuất hiện trên đường chéo chính và hai đường chéo phụ liền kề. Quá trình giải thuật toán ma trận ba đường chéo được tiến hành theo hai bước: khử tiền (forward sub) và thế lùi (còn gọi là khử lùi) (backward sub).

Đặt:

$$a_i = a_P; \quad b_i = b_E; \quad c_i = c_W; \quad d_i = d \quad (25)$$

Từ hệ phương trình ba đường chéo, suy ra:

$$a_i \Phi_i = b_i \Phi_{i+1} + c_i \Phi_{i-1} + d_i \quad (26)$$

Tại điểm lưới biên ta có:

$$c_1 = c_{W(1)} = 0 \quad \text{và} \quad b_n = b_{E(n)} = 0 \quad (27)$$

Đường chéo chính $a = [a_1, a_2, a_3, \dots, a_n]$

Đường chéo trên $b = [b_1, b_2, b_3, \dots, b_n]$

Đường chéo dưới $c = [c_1, c_2, c_3, \dots, c_n]$

Ma trận ba đường chéo:

$$\begin{bmatrix} a_1 & b_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ c_2 & a_2 & b_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & c_3 & a_3 & b_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & c_{n-1} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_n & a_n \end{bmatrix}$$

Sử dụng phương pháp khử Gauss để đưa ma trận về dạng tam giác trên và tam giác dưới ta thu được hai hệ số tạm thời P_i và Q_i

Bằng phép khử tiền, ta thu được hai phương trình có dạng:

$$\begin{aligned} \Phi_{i-1} &= P_{i-1} \Phi_i + Q_{i-1} \\ \Phi_i &= P_i \Phi_{i+1} + Q_i \end{aligned} \quad (28)$$

Thay thế Φ_{i-1} vào hệ phương trình ba đường chéo ở trên, ta được:

$$\Phi_i = \frac{b_i}{a_i - c_i P_{i-1}} \Phi_{i+1} + \frac{c_i Q_{i-1} + d_i}{a_i - c_i P_{i-1}} \quad (29)$$

So sánh với công thức tính Φ_i , ta có được hai hệ số tạm thời P_i và Q_i :

$$P_i = \frac{b_i}{a_i - c_i P_{i-1}} \quad (30)$$

$$Q_i = \frac{c_i Q_{i-1} + d_i}{a_i - c_i P_{i-1}} \quad (31)$$

Với $i = 2, 3, \dots, n$

Tại điểm lưới $i = n$ chúng ta có điều kiện $a_e(n) = 0$ nghĩa là $b_n = 0$, hệ phương trình ba đường chéo trở thành

$$a_n \phi_n = c_n \phi_{n-1} + d_n \quad (32)$$

Trong quá trình thực hiện phép khử tiến, ta thu được công thức tính ϕ_i , áp dụng công thức này cho điểm $i = n-1$

$$\phi_{n-1} = P_{n-1} \phi_n + Q_{n-1} \quad (33)$$

Thay (33) vào phương trình (32), so sánh với công thức Q_i suy ra:

$$Q_n = \phi_n \quad (34)$$

Kết hợp công thức (33) và công thức tính Q_n , tính toán được biến số ϕ bằng phép thế lùi, tại các điểm từ $i = n - 1$ đến $i = 1$

$$\begin{aligned} \phi_n &= Q_n \\ \phi_i &= P_i \phi_n + Q_i \end{aligned} \quad (35)$$

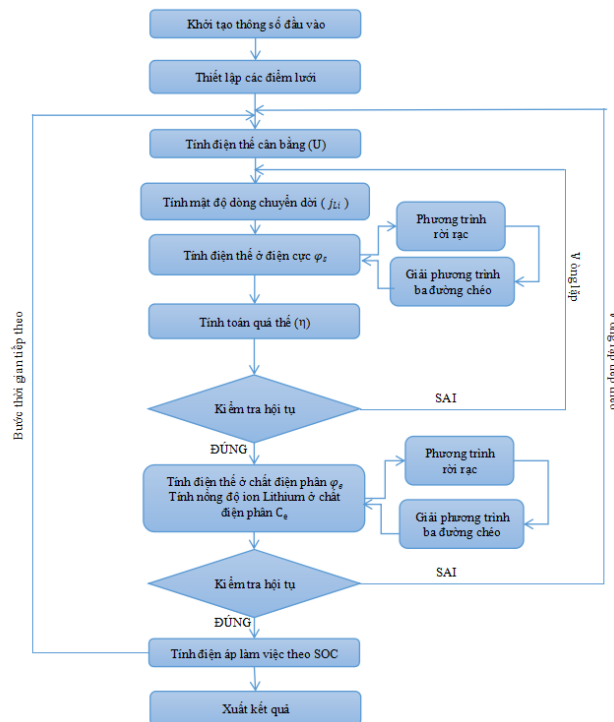
Thành phần nguồn (Source term - S) thường được coi là một hàm phi tuyến đối với biến phụ thuộc ϕ . Vì vậy quá trình tuyến tính hóa thành phần nguồn S được đưa ra và áp dụng cho các phương trình bảo toàn ϕ_s , ϕ_e và C_e .

Đối với ba phương trình vi phân có chứa ba biến đã nói trên, ta tuyến tính hóa thành phần nguồn S bằng cách sử dụng phương trình:

$$S = S_c + S_p \phi_p \quad (36)$$

Trong đó, S_p là đạo hàm của S đối với biến phụ thuộc ϕ_p , biến này có thể là ϕ_s , ϕ_e hoặc C_e

3. Kết quả và bàn luận



Hình 4. Lưu đồ thuật toán mô phỏng

Bước 1: Khởi tạo thông số đầu vào

Để thực hiện mô phỏng, ta tiến hành thực hiện nhập chương trình code trong phần mềm Matlab (tham khảo thêm ở phần “Tuyên bố dữ liệu sẵn có”) cùng với các thông số, hằng số ban đầu được khởi tạo, các thông số và hằng số này nhập từ **Bảng 2** (Bảng S2, Supporting Information).

Bước 2: Thiết lập các điểm lưới

Từ các công thức vi phân từng phần đã được rời rạc hóa theo phương pháp FVM, ta tiến hành thiết lập các hệ số a, b, c, d của hệ phương trình ba đường chéo của phương trình bảo toàn điện tích của điện cực trên từng miền pin và xây dựng công thức xét tính hội tụ để lấy kết quả chính xác nhất theo công thức tính sai số, với sai số nhỏ hơn 10^{-4} .

Bước 3: Thiết lập công thức tính giá trị điện cực cân bằng U, điện áp làm việc (cell voltage), trạng thái sạc/xả (SOC/DOD)

Bước 4: Thiết lập phương pháp tính TDMA áp dụng cho các công thức bảo toàn trên và công thức tính hội tụ.

Bước 5: Sau khi đã trình bày chương trình MATLAB, ta tiến hành chạy chương trình, sau khi tiến hành chạy ta thu được điện áp làm việc tương ứng với độ sạc SOC ở từng bước thời gian

Bước 6: Lấy giá trị φ_S để biểu thị giá trị điện thế trên 2 miền điện cực ở mỗi bước thời gian nhất định

Để thu được các giá trị như φ_E hay C_e trên mỗi mốc thời gian nhất định, ta tiến hành thay đổi thời gian mô phỏng (time) của pin ứng với mỗi mốc thời gian mô phỏng và thay đổi chế độ sạc/xả. Với mỗi kết quả chạy được trên từng mốc thời gian chỉ định, ta sẽ lấy dữ liệu φ_E, C_e từ cửa sổ Workspace. Từ đó ta lưu lại các kết quả φ_E, C_e ứng với từng tọa độ miền pin bằng phần mềm Excel. Sau đó ta sẽ xây dựng được đồ thị bằng cách nhập dữ liệu Excel bằng Matlab.

Pin đều được sạc ở trạng thái sạc từ 0% đến 100% (tức pin đầy) trong vòng 3.600 giây. Dựa vào các thông số của pin Lithium NMC được đề cập ở **Bảng 2** (Bảng S2, Supporting Information), dữ liệu về điện áp làm việc của pin được thể hiện rõ ở Hình 5 (Hình S5, Supporting Information) với tốc độ sạc 1C. Ở Hình 5 (Hình S5, Supporting Information), ta nhận thấy rằng, tại thời điểm bắt đầu sạc (tức 0% pin), điện áp làm việc của mẫu pin NMC bắt đầu ở mức điện áp 3,3913V. Ở các bước thời gian tiếp theo, ta dễ dàng nhận ra dải điện áp làm việc của pin Lithium NMC tăng dần đều so với giá trị điện áp làm việc ở các bước thời gian trước đó. Khi dữ liệu điện áp của mẫu pin NMC tăng dần cho đến khi pin được sạc đầy 100% tại thời điểm 3.600 giây. Khi đó, điện áp làm việc của pin NMC đạt giá trị 3,902V.

Tương tự với Hình 6 (Hình S6, Supporting Information) và Hình 7 (Hình S7, Supporting Information), dải giá trị điện áp làm việc tính từ lúc bắt đầu sạc cho đến khi pin được sạc đầy (SOC=1) của mẫu pin NMC này đều luôn cao hơn dải giá trị điện áp làm việc ở tốc độ sạc 1C. Ngoài ra, tốc độ sạc càng cao, thời gian sạc càng ngắn

Ngược lại với mô phỏng quá trình sạc, mọi mô phỏng quá trình xả ở các tốc độ xả khác nhau sẽ diễn ra từ lúc pin đầy (DOD = 0) cho đến khi pin hoàn toàn cạn (DOD = 1). Tất cả mô phỏng đều diễn ra trong vòng 3.600 giây. Và mọi dữ liệu đầu ra đều phụ thuộc vào các thông số được đề cập ở **Bảng 2** (Bảng S2, Supporting Information).

Trong Hình 8 (Hình S8, Supporting Information), tại thời điểm ban đầu $t = 0$, độ xả DOD = 0, mẫu pin NMC có giá trị điện áp làm việc là 3,8791V. Ở các bước thời gian tiếp theo, độ xả tăng tăng dần, giá trị điện áp làm việc cũng giảm dần theo thời gian. Khi pin được xả cho đến khi pin cạn hoàn toàn ở mức DOD = 1, điện áp làm việc của pin Lithium NMC dừng lại ở giá trị 3,4171V, kết thúc quá trình mô phỏng trong 3.600 giây. Tương tự với Hình 9 (Hình S9, Supporting Information) và Hình 10 (Hình S10, Supporting Information), dải giá trị điện áp làm việc của mẫu pin NMC từ lúc bắt đầu xả cho đến khi DOD = 1 đều luôn thấp hơn các dải giá trị điện áp làm việc ở tốc độ xả 1C.

Tiến hành thay đổi thông số vật lý của pin NMC, cụ thể là độ dày điện cực, ký hiệu là L. Vì vậy, ta thu được dữ liệu điện áp làm việc của pin NMC được biểu thị trong Hình 11a, 11b, 11c (Hình S11, Supporting Information) bằng những thay đổi như sau [4]:

$$L_N = 73,7 \mu\text{m};$$

$$L_S = 20 \mu\text{m};$$

$$L_P = 54,5 \mu\text{m}$$

Trong trường hợp mô phỏng ở tốc độ sạc 1C, kết quả đầu ra có sự khác biệt đáng kể về điện áp làm việc của mẫu pin Lithium NMC đã được thay đổi thông số L. Tại thời điểm khi trạng thái sạc SOC = 0,4 cho đến khi pin được sạc đầy, điện áp làm việc của mẫu pin được thay đổi thông số có giá trị cao hơn rất nhiều và tăng rất nhanh ở những bước thời gian tiệm cận cuối. Cụ thể, khi pin sạc được 90% trở đi, đường đồ thị ở Hình 11 (Hình S11, Supporting Information) hầu như biểu diễn theo hướng gần như thẳng đứng. Khi pin sạc đầy hoàn toàn, mẫu pin này có giá trị điện áp làm việc ở mức 4,299V.

Tương tự như kết quả đã được mô phỏng ở tốc độ sạc 1C, dải đồ thị của mẫu pin Lithium NMC có thay đổi L ở tốc độ sạc 2C theo như Hình 11b (Hình S11, Supporting Information) có giống nhau nhất định về hình dạng đồ thị. Tuy nhiên, vì pin đang được mô phỏng ở tốc độ sạc cao hơn nên dải giá trị điện áp làm việc của pin Lithium NMC có sự thay đổi L sẽ có giá trị cao hơn so với giá trị tương ứng ở tốc độ sạc 1C khoảng vài miliVolt ứng với mỗi bước thời gian. Và thời gian thực hiện mô phỏng kết thúc sau 1.800 giây.

Ở tốc độ sạc 10C, dù tốc độ sạc lớn hơn rất nhiều so với các tốc độ sạc 1C, 2C nhưng hình dạng đồ thị vẫn có sự tương đồng với dữ liệu đã được trình bày ở Hình 11a, 11b (Hình S11, Supporting Information). Toàn bộ chu trình xả chỉ diễn ra trong vòng 360 giây và điện áp làm việc của pin Lithium NMC có thay đổi L đạt được giá trị lớn nhất ở bước thời gian cuối cùng khi pin được sạc đầy 100%, khoảng 4,3448V.

Hình 12 (Hình S12, Supporting Information) mô tả sự phân bố điện thế ở hai điện cực âm và dương theo tọa độ một chiều x ứng với tốc độ sạc 1C. Tại mỗi mốc thời gian cụ thể, điện thế đo được ở hai miền điện cực gần như đồng đều nhau, sự đồng nhất trong sự phân bố điện cực này có thể đến từ thông số độ dẫn điện của hai điện cực. Tuy nhiên, độ dẫn điện của hai điện cực là hằng số không đổi, hoàn toàn khác nhau và có sự chênh lệch lớn về giá trị của độ dẫn điện trên điện cực. Tại điện cực âm, giá trị của độ dẫn điện là 100 S/m, cao hơn đáng kể so với độ dẫn điện 20 S/m của điện cực dương được đề cập ở **Bảng 2** (Bảng S2, Supporting Information). Ngoài ra, dữ liệu đầu ra trong mô phỏng sự phân bố điện thế ở miền điện cực âm chỉ có sự giảm nhẹ theo thời gian sạc và hầu như ổn định về giá trị điện thế trên tất cả mỗi bước thời gian. Còn lại, ở điện cực dương, ứng với mỗi bước thời gian nhất định, sẽ có mức giá trị điện thế nhất định và có sự tăng lên đáng kể theo thời gian sạc.

Ngược lại so với các kết quả đã được mô phỏng ở Hình 12 (Hình S12, Supporting Information), dữ liệu đầu ra trong mô phỏng sự phân bố điện thế ở miền điện cực âm chỉ có sự tăng nhẹ theo thời gian xả và hầu như ổn định về giá trị điện thế trên tất cả mỗi bước thời gian, sự dao động nhỏ này được trình bày rõ ở Hình 13 (Hình S13, Supporting Information). Còn lại, ở điện cực dương, ứng với mỗi bước thời gian nhất định, sẽ có mức giá trị điện thế nhất định và có sự giảm xuống rõ rệt theo thời gian xả.

Hình 14 (Hình S14, Supporting Information) và Hình 15 (Hình S15, Supporting Information) mô tả điện thế trong chất điện phân trong điều kiện sạc 1C. Ở những bước thời gian đầu tiên cho đến những bước thời gian cuối cùng, giá trị của dải điện thế trên toàn miền chất điện phân chỉ có sự thay đổi nhỏ (vài miliVolt). Và ứng với mỗi bước thời gian được mô phỏng như trên Hình 14 (Hình S14, Supporting Information), giá trị điện thế này có thể được coi như đồng nhất trên toàn miền pin nếu xét theo tọa độ x , nguyên nhân dẫn đến sự phân bố gần như đồng nhất này có thể đến từ sự ảnh hưởng của thông số độ dẫn truyền ion (ionic electrical conductivity), được đề cập ở **Bảng 2** (Bảng S2, Supporting Information).

Tuy nhiên, ở mỗi bước thời gian khác nhau, vẫn có sự chênh lệch nhỏ về giá trị điện thế ở tọa độ miền cực dương so với ở tọa độ miền cực âm. Giá trị điện thế trong chất điện phân ở miền tọa độ cực dương sẽ luôn cao hơn giá trị điện thế tương ứng ở miền tọa độ cực âm. Sự thay đổi nhỏ này được thể hiện rõ ở Hình 15 (Hình S15, Supporting Information).

Tương tự như kết quả mô phỏng ở tốc độ sạc 1C, từ những bước thời gian đầu tiên cho đến những bước thời gian cuối cùng, giá trị của dải điện thế trên toàn miền chất điện phân chỉ có sự thay đổi nhỏ (vài miliVolt). Và ứng với mỗi bước thời gian được mô phỏng như trên Hình 16 (Hình S16, Supporting Information), giá trị điện thế này có thể được coi như đồng nhất trên toàn miền pin nếu xét theo tọa độ x , nguyên nhân dẫn đến sự phân bố gần như đồng nhất này cũng có thể đến từ sự ảnh hưởng của thông số độ dẫn truyền ion (ionic electrical conductivity), thông số này được đề cập ở **Bảng 2** (Bảng S2, Supporting Information). Ở mỗi bước thời gian khác nhau, vẫn có sự chênh lệch rất nhỏ về giá trị điện

thể ở tọa độ miền cực dương so với ở tọa độ miền cực âm. Giá trị điện thế trong chất điện phân ở miền tọa độ cực dương sẽ luôn thấp hơn giá trị điện thế tương ứng ở miền tọa độ cực âm. Sự thay đổi nhỏ không đáng kể này được thể hiện rõ ở Hình 17 (Hình S17, Supporting Information).

Tại thời điểm ban đầu, khi pin đang ở trạng thái sạc SOC = 0. Nồng độ ion Lithium ban đầu trong chất điện phân là 1.200 mol/m^3 . Khi pin được sạc sâu hơn, nồng độ ion Lithium trên toàn miền pin trong chất điện phân sẽ đạt giá trị cao hơn theo từng bước thời gian sạc cho đến khi pin được sạc đầy. Trong quá trình mô phỏng sự phân bố nồng độ ion Lithium trong toàn miền pin NMC, sự phân bố nồng độ ion, tính từ điện cực âm thông qua vách ngăn cho đến điện cực dương, có thể coi như là đồng nhất trên toàn bộ dòng thời gian xét theo tọa độ x (Hình 18 (Hình S18, Supporting Information)). Trong quá trình sạc, giá trị nồng độ ion Lithium ở miền điện cực âm sẽ luôn thấp hơn giá trị nồng độ ion ban đầu vì vị trí điện cực âm là nơi mà các ion Lithium được hấp thụ vào điện cực âm. Cùng lúc đó, ngược lại ở vị trí điện cực dương, giá trị nồng độ ion Lithium sẽ đạt giá trị cao hơn rất nhiều so với ở vị trí nồng độ ion Lithium cân bằng vì đây là nơi mà các ion Lithium sẽ khuếch tán từ điện cực dương đi ra chất điện phân để đi đến điện cực âm.

Tương tự như quá trình mô phỏng sự phân bố nồng độ ion Lithium trong toàn miền pin NMC ở điều kiện sạc 1C, sự phân bố nồng độ ion, tính từ điện cực âm thông qua vách ngăn cho đến điện cực dương, có thể coi như là đồng nhất trên toàn bộ dòng thời gian xét theo tọa độ x (Hình 19 (Hình S19, Supporting Information)). Trong quá trình xả, giá trị nồng độ ion Lithium ở miền điện cực âm sẽ luôn cao hơn giá trị nồng độ ion Lithium ban đầu vì vị trí điện cực âm là nơi mà các ion Lithium sẽ khuếch tán từ điện cực âm đi ra chất điện phân để đến điện cực dương. Cùng lúc đó, ngược lại ở vị trí điện cực dương, giá trị nồng độ ion Lithium trong chất điện phân sẽ đạt giá trị thấp hơn rất nhiều so với ở vị trí nồng độ ion Lithium cân bằng vì đây là nơi mà các ion Lithium sẽ được hấp thụ vào điện cực dương.

4. Kết luận

Các kết quả mô phỏng và biểu đồ được trình bày trong nghiên cứu này được thực hiện thông qua phần mềm Matlab. Cụ thể, các đại lượng như điện thế tại các điện cực, điện thế trong chất điện phân và nồng độ ion Lithium trong chất điện phân được tính toán bằng cách giải các phương trình mô phỏng theo không gian và thời gian trong suốt quá trình sạc và xả của pin. Ngoài ra, tác giả cũng cung cấp các phân tích so sánh điện áp làm việc của pin ứng với các tốc độ sạc/xả khác nhau. Tuy nhiên, mô hình trong nghiên cứu hiện tại chỉ xem xét hoạt động của pin Lithium trong điều kiện lý tưởng và giới hạn trong một hướng tiếp cận nhất định. Do đó, trong các nghiên cứu tiếp theo, việc tích hợp thêm các yếu tố ảnh hưởng đến hiệu suất hoạt động thực tế của pin như áp suất, nhiệt độ và điện trở trong vào mô hình Matlab là cần thiết nhằm nâng cao độ chính xác và khả năng ứng dụng của mô phỏng trong điều kiện thực tế. Tác giả kỳ vọng rằng nghiên cứu này sẽ đóng góp tích cực vào việc xây dựng cơ sở lý thuyết cho lĩnh vực năng lượng tái tạo, đồng thời mở ra tiềm năng ứng dụng trong việc phát triển các mô hình mô phỏng pin Lithium cho phương tiện giao thông điện trong tương lai.

Lời cảm ơn

Bài báo này thuộc ngành Công nghệ kỹ thuật ô tô – Khoa Cơ khí động lực - Trường Đại học Sư phạm Kỹ thuật Thành Phố Hồ Chí Minh.

Xung đột lợi ích

Các tác giả tuyên bố không có bất kỳ xung đột lợi ích nào trong bài báo này.

Tuyên bố dữ liệu sẵn có

Dữ liệu hỗ trợ (Supporting Information) cho các khám phá của nghiên cứu này có tại link bên dưới, các dữ liệu khác khi độc giả yêu cầu một cách hợp lý cũng sẽ được tác giả liên hệ cung cấp.

https://drive.google.com/drive/folders/1BQNQwyHIE_G8PDKBINxhryBX2jAIwUMb?usp=drive_1ink

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Y. Li, Z. Tan, and W. Zhang, *Electrochemical and Thermal Modeling of Li-ion Batteries*. Boca Raton, FL, USA: CRC Press, 2021. doi: 10.1201/9781003090839.
- [2] D. Parikh, J. Allen, and R. Kee, "Elucidation of separator effect on energy density of Li-ion batteries," *J. Electrochem. Soc.*, vol. 166, no. 10, pp. A2129–A2138, 2019. doi: 10.1149/2.0231910jes.
- [3] S. Klick, M. Schulze, and H. Müller, "The influence of electrolyte volume on calendaric aging of lithium-ion batteries," *J. Energy Storage*, vol. 32, p. 101801, Dec. 2020. doi: 10.1016/j.est.2020.101801.
- [4] R. Ranom, A. Zaki, and S. N. S. Ibrahim, "The effect of electrolyte parameter variation upon the performance of lithium iron phosphate (LiFePO₄)," *Indonesian J. Electr. Eng. Comput. Sci.*, vol. 28, no. 3, pp. 1329–1337, Dec. 2022. doi: 10.11591/ijeecs.v28.i3.pp1329-1337.
- [5] C. Zou, C. Manzie, and D. Nešić, "Simplification techniques for PDE-based Li-ion battery models," *Automatica*, vol. 129, p. 109599, Jul. 2021. doi: 10.1016/j.automatica.2021.109599.
- [6] A. Li, W. Wang, and C. Wang, "A review on lithium-ion battery separators towards enhanced safety performances and modelling approaches," *J. Electrochem. Soc.*, vol. 166, no. 10, pp. A1798–A1819, 2019. doi: 10.1149/2.0371910jes.
- [7] D. Miranda, C. M. Costa, and S. Lanceros-Méndez, "Modeling separator membranes physical characteristics for optimized lithium ion battery performance," *J. Power Sources*, vol. 448, p. 227418, Feb. 2020. doi: 10.1016/j.jpowsour.2019.227418.
- [8] D. N. T. Kien, N. V. Dung, "Nghiên cứu, mô hình hóa và mô phỏng Pin Lithium-Ion sử dụng cho ô tô điện bằng phần mềm Matlab/Simulink," *Đồ án tốt nghiệp*, Trường Đại học Sư phạm Kỹ thuật TP. Hồ Chí Minh, 2025.
- [9] T. B. Chau and N. V. Hai, "Nghiên cứu mô hình nhiệt-đi động học của pin lithium-ion 18650 bằng phương pháp số," *Tạp chí Khoa học và Công nghệ Hàng hải*, no. 74, pp. 36–40, 2024.
- [10] J. M. Tarascon and M. Armand, "Issues and challenges facing rechargeable lithium batteries," *Nature*, vol. 414, no. 6861, pp. 359–367, Nov. 2001.
- [11] M. Armand and J. M. Tarascon, "Building better batteries," *Nature*, vol. 451, no. 7179, pp. 652–657, Feb. 2008.
- [12] A. S. Borakhadikar, "One dimensional computer modeling of a lithium-ion battery," 2017. [Online]. Available: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:55707153>.
- [13] K. A. Smith, C. D. Rahn, and C. Y. Wang, "Control oriented 1D electrochemical model of lithium ion battery," *Energy Conversion and Management*, vol. 48, 2007.
- [14] Y. Bandara, "Mathematical and numerical modelling of lithium battery," Master thesis, University of Stavanger, Norway, 2021. [Online]. Available: <https://uis.brage.unit.no/uis-xmlui/handle/11250/2786806>.
- [15] A. Rajan, A. McGordon, W. D. Widanage, and P. Jennings, "Modified electrochemical parameter estimation of NCR18650BD battery using implicit finite volume method," *Journal of Power Sources*, vol. 342, pp. 934–947, Mar. 2017.
- [16] A. K. Alshara, "Analytical Study of Heat Transfer Enhancement Due to Internal Oscillating Flow at Constant Heat Flux," Ph.D. dissertation, Dept. Mechanical Eng., Univ. of Technology, Baghdad, Iraq, 2006. doi: 10.13140/RG.2.2.28303.41122.

Duong Van Anh received engineer's degree in Automotive engineering, in 2013, and Master's degree, in 2015 from Ho Chi Minh city, University of Technology and Education. From 2014-2021, he is a Lecturer at Cao Thang Technical College. He had instructed his students when they competed in Minicar Racing Contest, Eco Mileage Challenge in Ha Noi. From 2022, he is a Lecturer at Ho Chi Minh City, University of Tehnology and Education (HCMUTE). In 2023, his students participated in Robocon 2023 with him. Besides, He still guides graduation thesis for his students. His research includes Automotive Powertrains system, Automotive Chassis System, Vehicle Stability Control and material for batteries for EV.

Email address: duongva@hcmute.edu.vn. ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-1572-4266>

Tuan Pham Thanh received the Bachelor of Science with Honor program in Physics, from University of Science – Vietnam National University, Ho Chi Minh city, in 2009 and Master degree in Optics, in 2013. He joined the Applied Material Science Institute (IAMS) – Vietnam Academy Science and Technology (VAST) in 2009. He had worked as a researcher in IAMS from 2009 to 2015 before studying Doctoral Program in Myongji University - Korea. He holds Ph.D. degree in 2019 in Myongji University. After that he worked as a Professor Reseacher in the same University. Currently, he is a Lecturer at University of Technology and Education – HCMUTE at Renewabke Energy Department. He has published 28 papers in International Journals and International Conference. Furthermore, He have three Patents in Industry about Photovoltaic technology and Optics. His current research interests include daylighting, photovoltaic system, thin film, optical material and material for batteries for large scale energy storage.

Email address: tuanpt@hcmute.edu.vn. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-2682-1427>

Tung Duong Tuan has received his B.E, M.E, and Ph.D degree in Automotive Engineering from HCMC University of Technology and Education (HCMUTE) in 2005, 2010 and 2020. He currently works at Faculty of International Education, HCMUTE. His research interest includes powertrain system, automotive control system and regenerative braking system.

Email: tungdt@hcmute.edu.vn. ORCID: <https://orcid.org/0009-0002-4479-3359>

Kien Do Nguyen Trung, former student at Ho Chi Minh University of Technology and Education, Ho Chi Minh City, Vietnam, majoring in Automotive Engineering Technology (2020-2024).

Email address: 2014211@student.hcmute.edu.vn. ORCID: <https://orcid.org/0009-0000-2177-3561>

Dung Nguyen Van, former student at Ho Chi Minh City University of Technology and Education, Ho Chi Minh City, Vietnam, majoring in Automotive Engineering Technology (2020–2024).

Email: 2014230@student.hcmute.edu.vn. ORCID: <https://orcid.org/0009-0001-8866-3663>