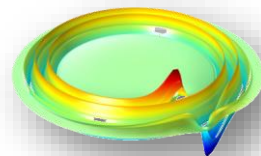


**Simuler les Batteries avec COMSOL
Multiphysics®**

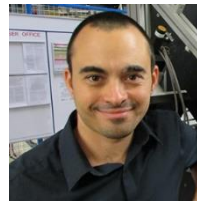


*Batterie Li-ion
enroulée en spirale*

Simuler les Batteries avec COMSOL Multiphysics®



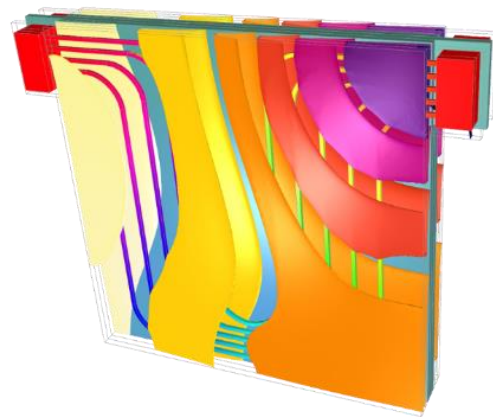
Sébastien KAWKA
Groupe Applications
COMSOL France
Sebastien.kawka@comsol.fr



Loïc RENVERSADE
Groupe Applications
COMSOL France

Programme

- Batteries : usage, types et enjeux
- Scénario typiques de simulation
- Un aperçu du logiciel COMSOL Multiphysics®
- Approches de simulation
 - Demo : batterie Li-ion enroulée en spirale
- Aspect thermique des batteries
 - Demo : batterie Li-ion refroidie par air
- Questions / Réponses



Isothermes dans une batterie
Lithium-ion refroidie par eau

Une batterie c'est ...

- Un générateur électrique
- Rechargeable
- Fonctionnement basé sur l' électrochimie



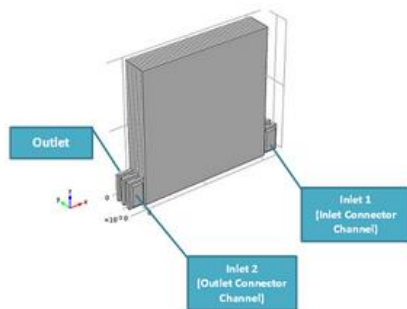
*Batterie de voiture électrique en charge.
Image dans le domaine public,
via [Wikimedia Commons](#)*

COMSOL Blog

Modeling Lithium-Ion Battery Cooling



Fanny Littmarck January 21, 2013



Using an Origami Battery to Power a Biosensor



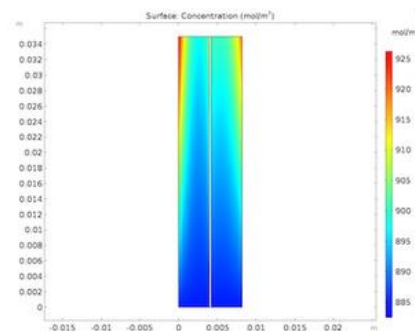
Brianne Costa July 16, 2015



Advancing Vanadium Redox Flow Batteries with Modeling



Caty Fairclough December 21, 2017



Batteries rechargeables : un historique

- 1859 – batterie plomb-acide
 - toujours largement utilisée dans les voitures
- 1899 – nickel-cadmium
- 1980s – nickel-hydrure métallique
- 1991 – sortie commerciale lithium-ion

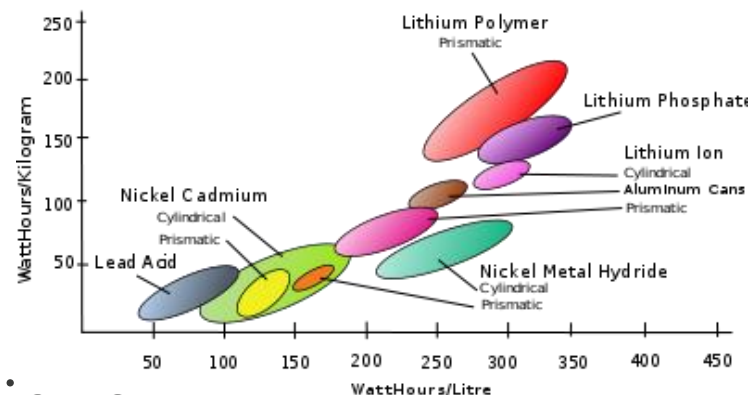


Image dans le domaine public,
via [Wikimedia Commons](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Ragone_plot_battery_evolution.png)

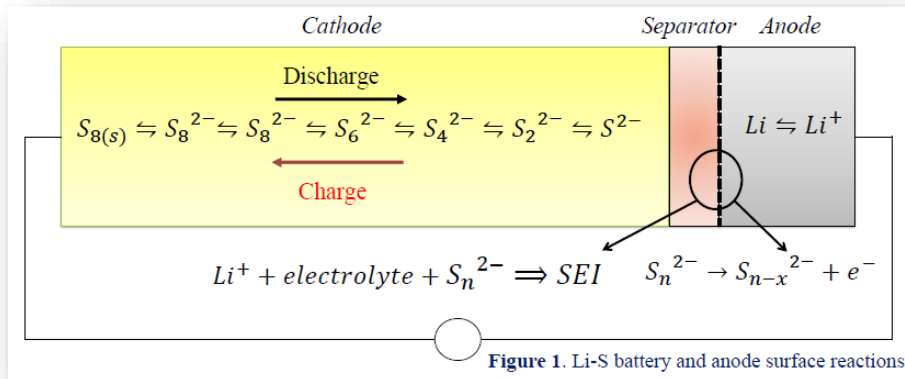
https://en.wikipedia.org/wiki/Rechargeable_battery

Batterie Lithium-ion “Traditionnelle”

- Développée dans les années 1980
 - Goodenough et al: oxyde de métaux de transition lithié
 - Yoshino et al from Asahi Kasei: carbone comme le coke de pétrole
- Le Lithium est “light”
 - Forte densité d'énergie
 - Forte densité de puissance
 - Intéressant pour des applications portables

Nouvelles technologies

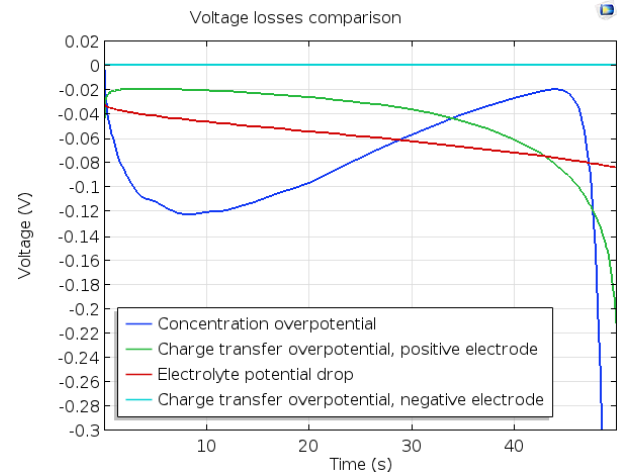
- Lithium-ion à électrolyte solide
- Lithium-soufre
- Sodium-ion
- Sel fondu
- Batterie double carbone
-



Chimie d'une cellule lithium-soufre de "Modeling Degradation in Lithium-Sulfur Batteries", R. Purkayastha et al. (OXIS Energy Ltd, Abingdon, and Imperial College London), COMSOL Conference 2015 Grenoble

Pourquoi simuler les batteries ?

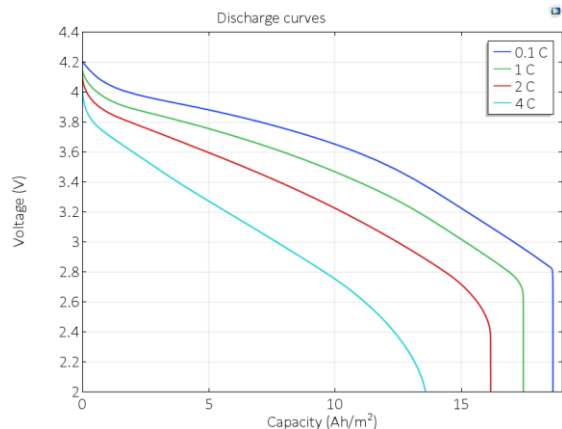
- Conception et compréhension
 - Permettre l'innovation
 - Interpréter quantitativement les mesures
- Design et optimisation
 - Obtenir les meilleures performances possibles
 - Identifier les goulots d'étranglements et évaluer la sensibilité
- Test et vérification
 - Les tests via les simulations sont souvent plus rapides, moins coûteux et moins risqués que de tester des prototypes



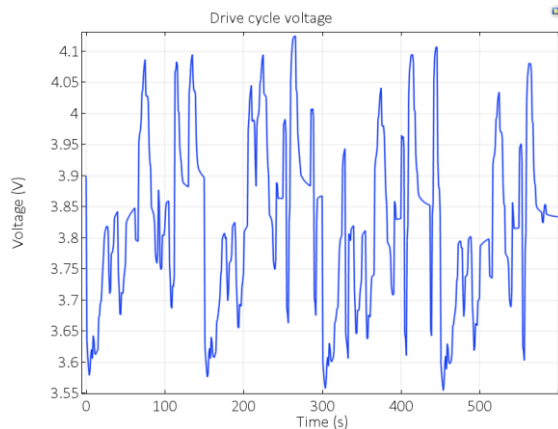
Simulation de différentes contributions de pertes de tension pendant une décharge 1.6C d'une batterie lithium-ion à électrolyte solide

Performance et Design

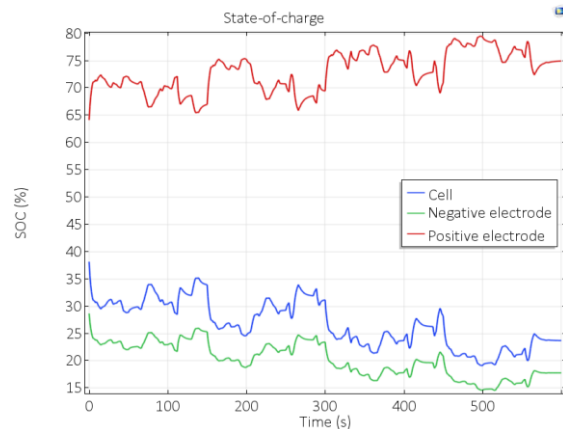
- Simuler des cycles de charge-décharge selon divers scénarios et des cycles de conduite
- Suivre : état de charge (SOC), tension, résistance interne, polarisation, température



Courbes de décharge pour différents C ratio



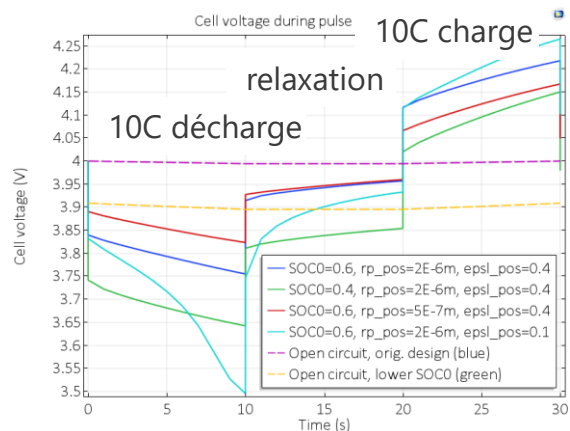
Tension de cellule pendant un cycle de conduite



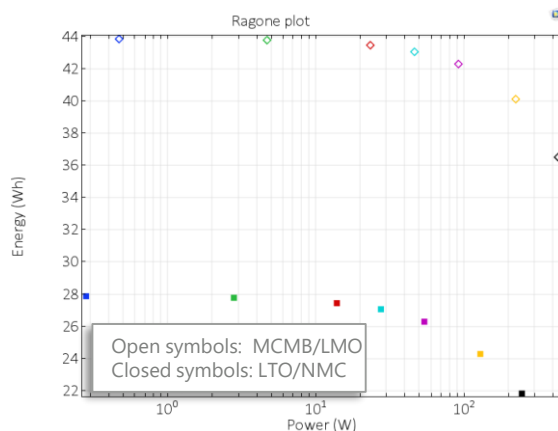
SOC de la cellule et des électrodes durant un cycle de conduite

Performance et Design 2

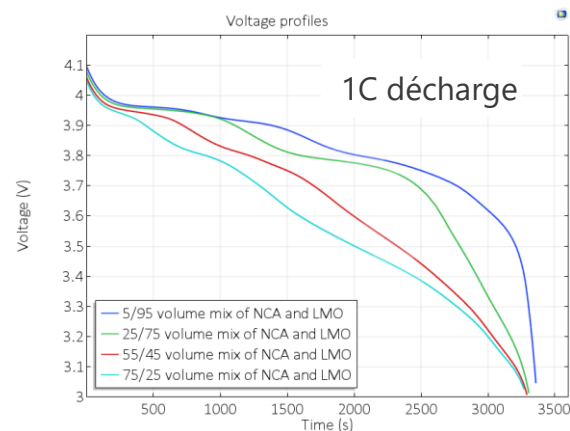
- Optimiser design et paramètres de contrôle
- Explorer des combinaisons de matériaux



Tension de cellule durant un pulse pour différents designs de batterie



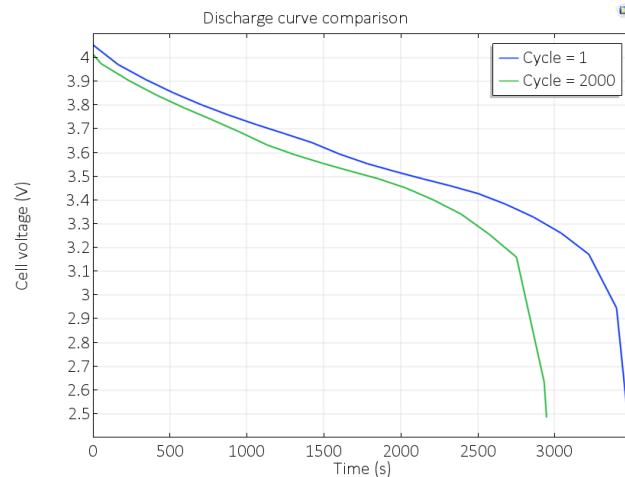
Graphique de Ragone pour des cellules MCMB/LMO et LTO/NMC



Profil de tension pour différentes fractions de mélange de NCA et LMO

Chute de capacité et vieillissement

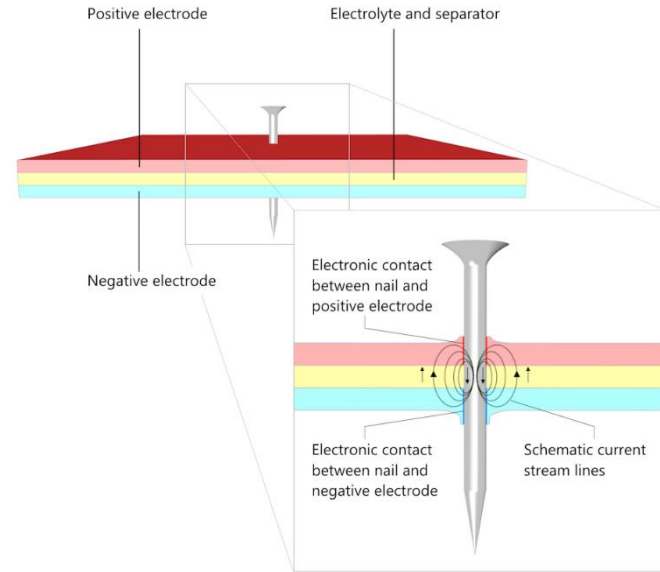
- Lié à des reactions parasites secondaires
- Croissance et résistance accrue de l'interface solide-electrolyte (SEI) lors de la répétition des cycles
- Dépôt de Lithium à l'anode notamment
- Dégagement de gaz



Tension de cellule durant la décharge pour différents nombres de cycle

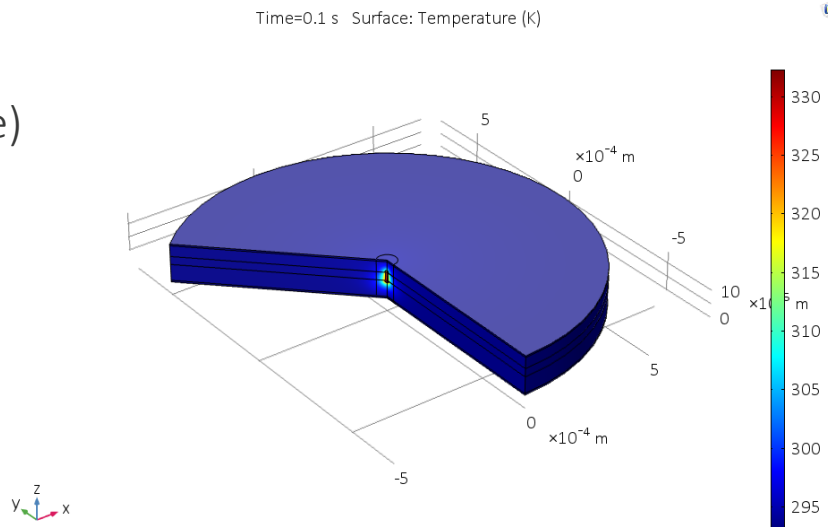
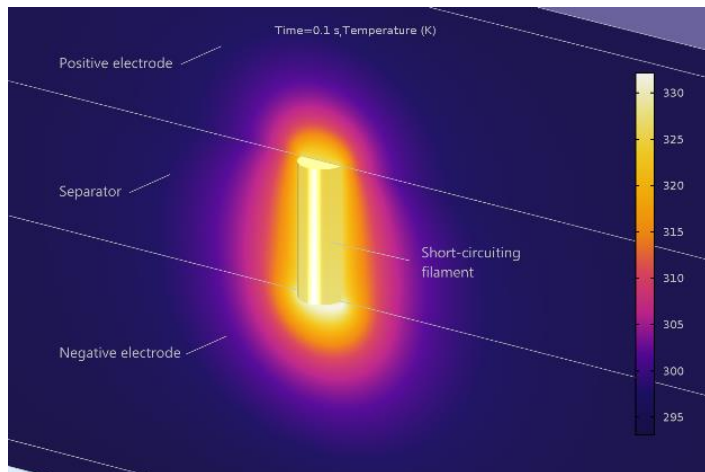
Risques de fonctionnement

- Court-circuit interne
 - Formation de dendrites
 - Incident mécanique avec pénétration
 - Problèmes de fabrication
- Court-circuit externe
 - Défaillance du contrôle électronique
 - Défaillance physique des connexions
- Thermique
 - Défaillance du refroidissement
 - Inflammation
 - Utilisation dans un environnement chaud



Court-Circuit Interne

- Formation de filament (dendrite ou pointe)
- Echauffement local autour du filament



*Distribution de
temperature après 0.1 s*

Phénomènes en jeu dans les batteries

- Deux phases: électrolyte et électrode
- Gradient de potentiel dans les électrodes et l'électrolyte
- Transport des ions dans l'électrolyte
- Transport des électrons dans les électrodes
- Diffusion des espèces dans les électrodes (option)
- Transfert de charge et (option) intercalation aux interfaces électrode-electrolyte
- Réactions secondaires supplémentaires (formation SEI, dépôt de métal, dégazage, etc.)

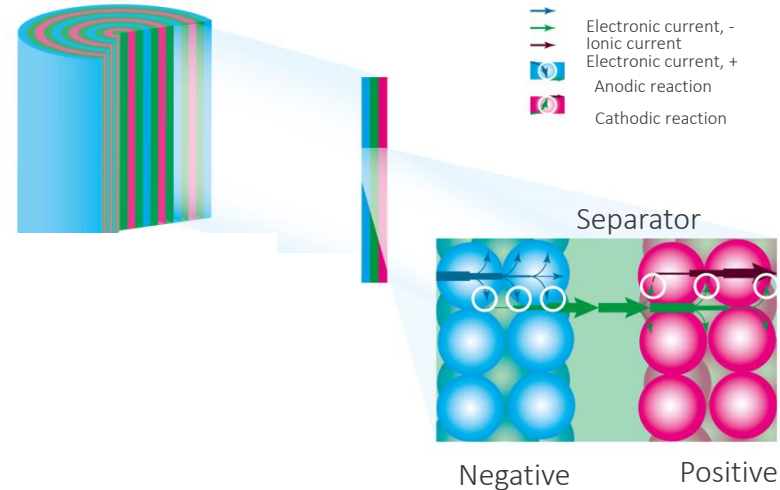


Schéma d'une batterie Li-ion cylindrique, prenant en compte l'intercalation et la modélisation de la SEI à la surface des particules dans les électrodes poreuses

Approches de simulation

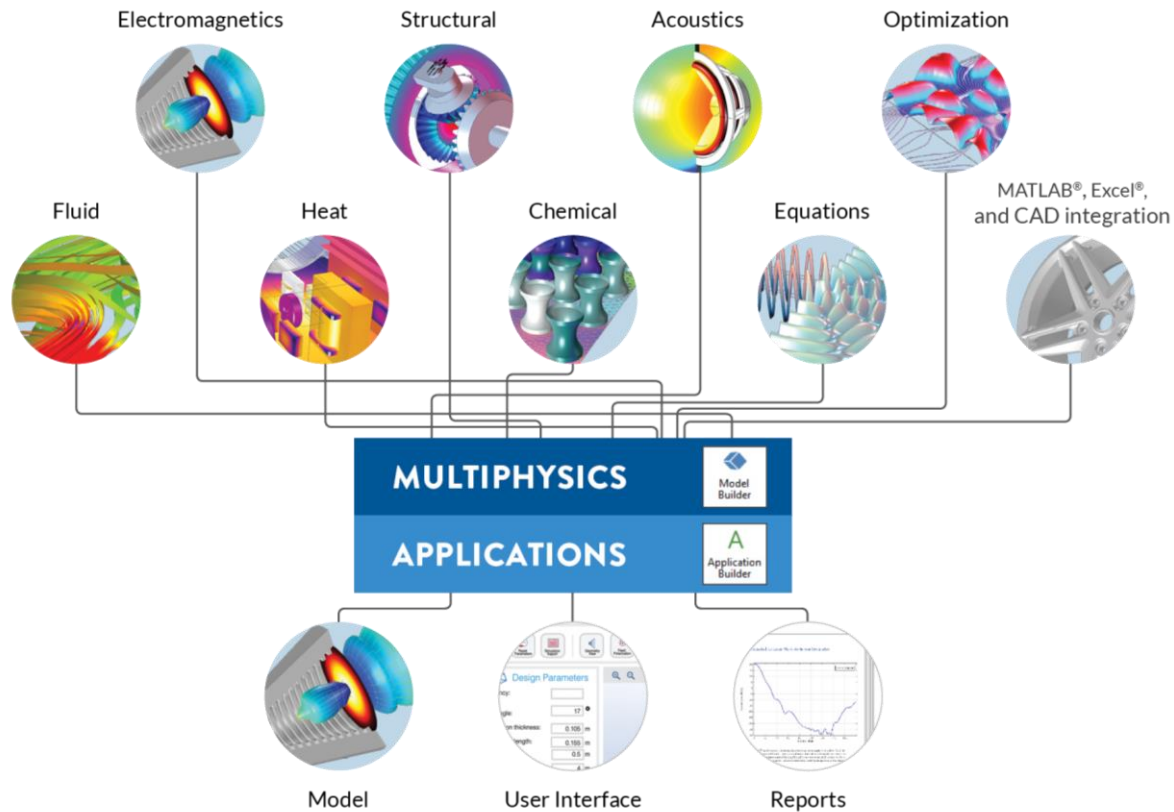
- Modèle réduit (équivalence circuit électrique, utile dans les BMS)
 - Résistance ohmique de la cellule
 - Mesure du SOC (intégration du courant) pour déterminer la tension en circuit ouvert
- Approche particule unique (single particle)
 - Décrit chaque electrode comme une "particule", avec diffusion interne du lithium
 - Prise en compte de l'intercalation
 - Cinétique électrochimique aux electrode (type BV, dépendance en concentration)
- Modèle des électrodes poreuses (Doyle-Newman, et al.)
 - Electrodes poreuses homogènes
 - Transport des électrolytes dans les séparateurs et les électrodes poreuses
- Modèles hétérogènes
 - Utilise des données de tomographies pour représenter explicitement la géométrie des électrodes poreuses

SIMPLE



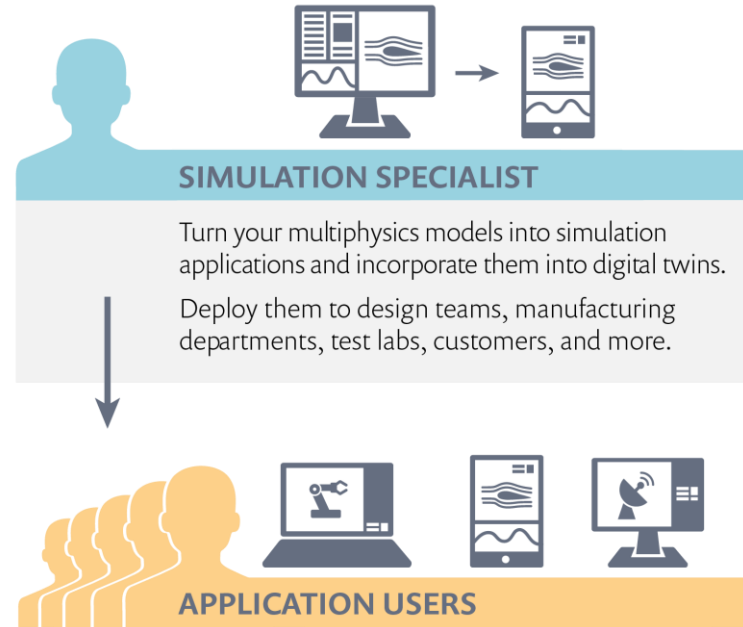
COMPLEXE

COMSOL Multiphysics®



Deployment

- COMSOL Compiler™
 - Create standalone simulation applications that anyone can run with this add-on to COMSOL Multiphysics®.
- COMSOL Server™
 - Give your organization access to applications and manage them using administrator tools.



The COMSOL® Software Product Suite

COMSOL MULTIPHYSICS®

The platform product.
Understand, predict,
and optimize physics-
based designs and
processes with
numerical simulation.

DEPLOYMENT PRODUCTS

- COMSOL Compiler™
- COMSOL Server™

Distribute simulation
applications created with
COMSOL Multiphysics.

ADD-ON PRODUCTS

ELECTROMAGNETICS

- AC/DC Module
- RF Module
- Wave Optics Module
- Ray Optics Module
- Plasma Module
- Semiconductor Module

FLUID & HEAT

- CFD Module
 - Mixer Module
- Subsurface Flow Module
- Pipe Flow Module
- Microfluidics Module
- Molecular Flow Module
- Heat Transfer Module

STRUCTURAL & ACOUSTICS

- Structural Mechanics Module
 - Nonlinear Structural Materials Module
 - Composite Materials Module
 - Geomechanics Module
 - Fatigue Module
 - Multibody Dynamics Module
 - Rotordynamics Module
- MEMS Module
- Acoustics Module

CHEMICAL

- Chemical Reaction Engineering Module
- Batteries & Fuel Cells Module
- Electrodeposition Module
- Corrosion Module
- Electrochemistry Module

MULTIPURPOSE
















- Optimization Module
- Material Library
- Particle Tracing Module

INTERFACING

- LiveLink™ for MATLAB®
- LiveLink™ for Excel®
- CAD Import Module
- Design Module
- ECAD Import Module
- LiveLink™ for SOLIDWORKS®
- LiveLink™ for Inventor®
- LiveLink™ for AutoCAD®
- LiveLink™ for Revit®
- LiveLink™ for PTC® Creo® Parametric™
- LiveLink™ for PTC® Pro/ENGINEER®
- LiveLink™ for Solid Edge®
- File Import for CATIA® V5

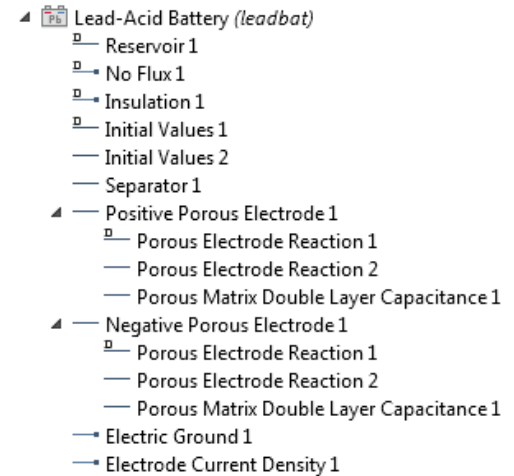
Interfaces Batterie dans COMSOL

- Basées sur une solution concentrée d'électrolytes (sauf pour l'interface *Single Particle Battery*)
- *Lithium-Ion Battery*
 - Bilan des charges au niveau électrodes et électrolyte
 - Bilan des espèces pour les ions
 - Bilan d'énergie pour les réactions électrochimiques
 - Bilan des espèces pour l'intercalation au niveau des particules d'électrode
 - Interface Solide Electrolyte (SEI) au niveau des électrodes

- ▲  Electrochemistry
 - ▲  Primary and Secondary Current Distribution
 -  Primary Current Distribution (cd)
 -  Secondary Current Distribution (cd)
 - ▲  Tertiary Current Distribution, Nernst-Planck
 -  Tertiary, Electroneutrality (tcd)
 -  Tertiary, Water-Based with Electroneutrality (tcd)
 -  Tertiary, Supporting Electrolyte (tcd)
 -  Electroanalysis (elan)
 -  Electrode, Shell (els)
- ▲  Battery Interfaces
 -  Lithium-Ion Battery (liion)
 -  Battery with Binary Electrolyte (batbe)
 -  Lead-Acid Battery (leadbat)
 -  Single Particle Battery (spb)

Interfaces Batterie dans COMSOL

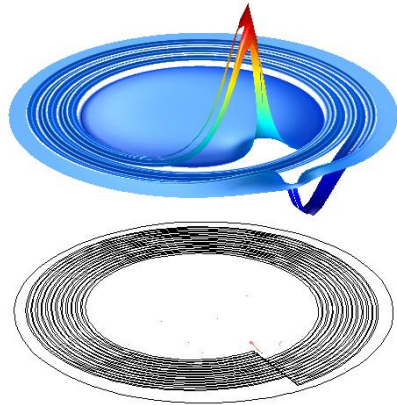
- *Battery with Binary Electrolyte*
 - Interface générique pour les batteries avec des électrolytes binaires concentrés
- *Lead-Acid Battery*
 - Variation de la porosité des électrodes, couplée aux réactions et aux bilans d'espèces
- *Single Particle Battery*
 - Interface générique simplifiée pour les batteries
 - Chaque électrode est traitée comme une "particule" unique
 - Pour des géométries plus grandes, des empilements d'accumulateurs, ou des simulations à temps très courts



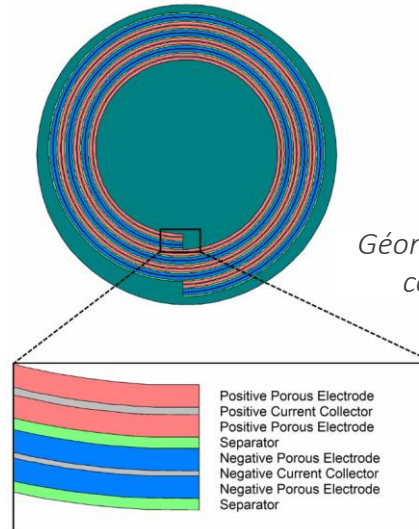
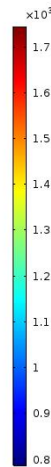
Typical set of nodes of the Lead-Acid Battery interface for creating a model

Demo:

Batterie Lithium-ion enroulée en spirale



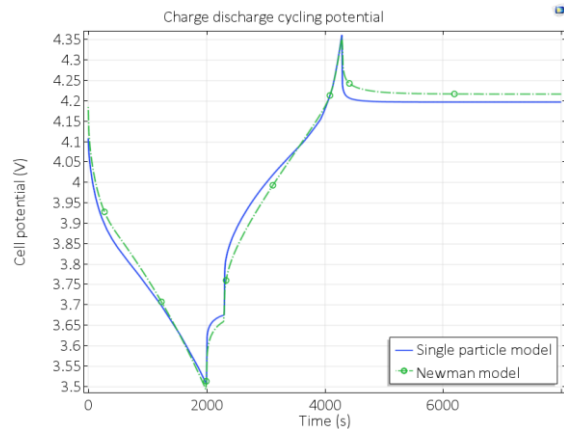
Concentration (mol/m³) en électrolyte
à 1800s à la fin d'une décharge 1C



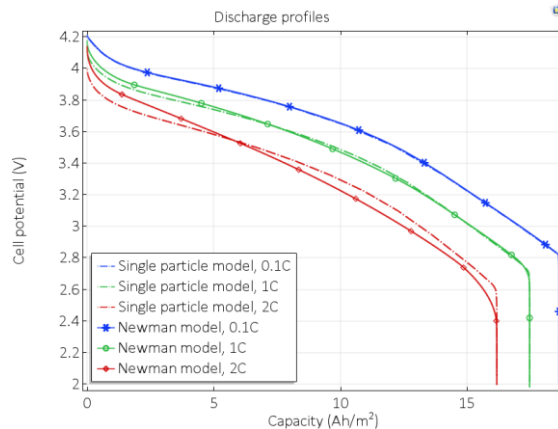
*Géométrie enroulée en spirale d'une
coupe de batterie cylindrique*

Approche particule unique

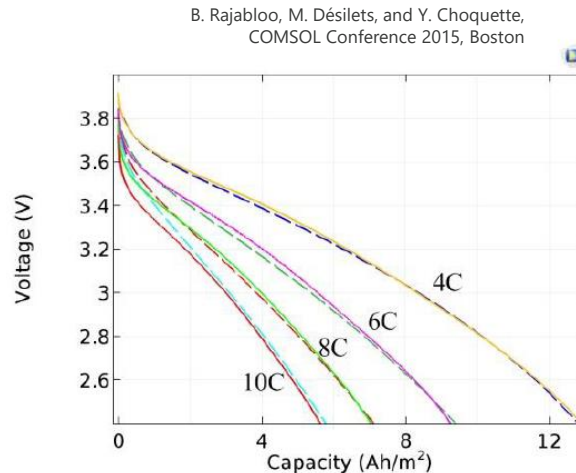
- Valide pour des densités de courant de faible à moyenne
- Fournir la résistance/ densité de courant pour une meilleure description à de fort C ratio



Potentiel de cellule en charge - décharge



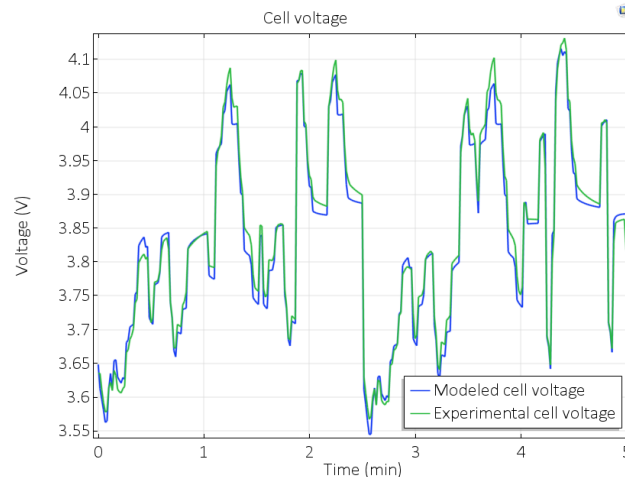
Profil de décharge pour des C ratio faible à moyen



Profil de décharge pour de forts C ratio

Approche modèle réduit

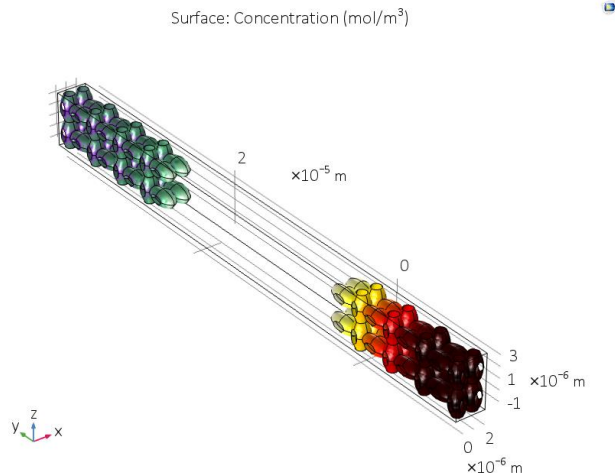
- Approche “boite” noire basée sur un petit nombre de paramètres réduits
- Estimation de paramètres avec le module *Optimization*
- Nécessite de connaître la capacité de la batterie, l'état de charge (SOC) initial et une courbe tension de circuit ouvert versus SOC, avec les données d'un cycle de chargement



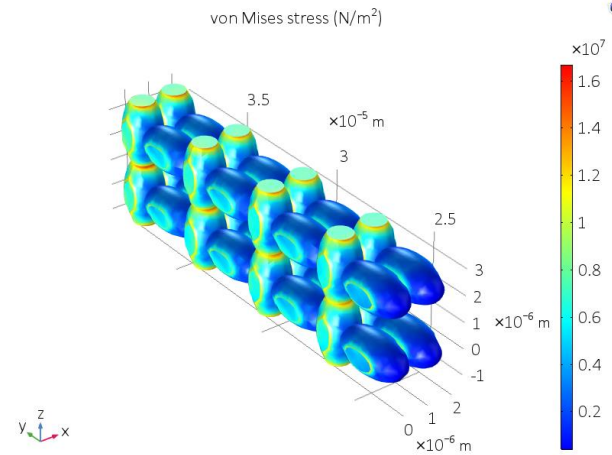
Tension de cellule calculée à partir des paramètres fittés et comparée aux données expérimentales

Approche modèle hétérogène

- Les détails de structure des électrodes poreuses sont inclus



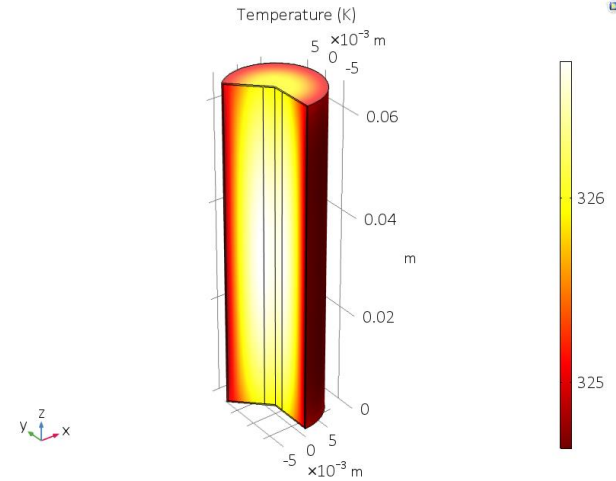
Concentration de surface du lithium à la surface des particules électrodes



Contraintes de von Mises stress à la surface des particules électrodes

Aspects thermiques

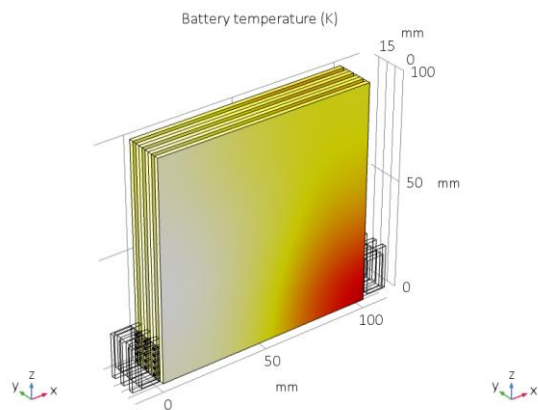
- Respecter les contraintes de refroidissement
 - Une température élevée favorise la formation de SEI ou le dégazage (\Rightarrow vieillissement)
- Identifier les points chauds et les gradients thermiques
 - Des gradients de température peuvent conduire à un vieillissement hétérogène
- Eviter le démarrage à froid
 - De basses températures peuvent conduire à du dépôt de lithium sur le graphite (\Rightarrow vieillissement)
 - De basses températures impliquent une faible conductivité de l'électrolyte (et de faibles performances)
- Analyse des cas les plus défavorables
 - Trouver la température maximale de fonctionnement



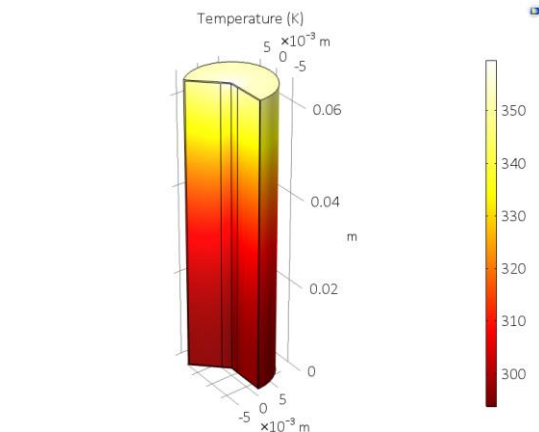
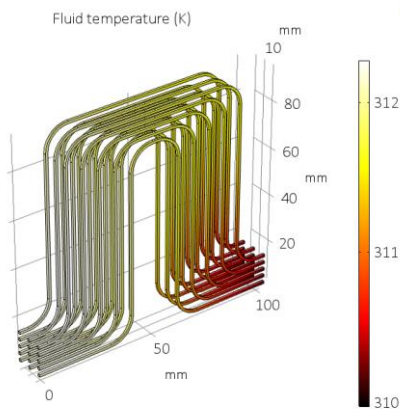
Distribution de température dans une batterie lithium-ion cylindrique

Gestion thermique

- Couplage de l'électrochimie et du transfert de chaleur au travers de
 - Valeur moyenne de la température et de la chaleur générée
 - Valeur locale de la température et de la chaleur générée



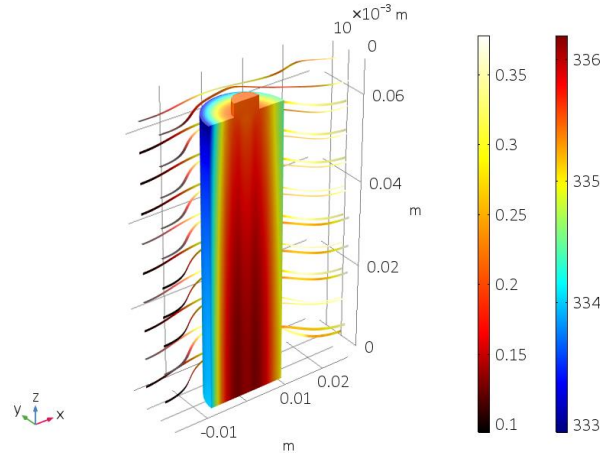
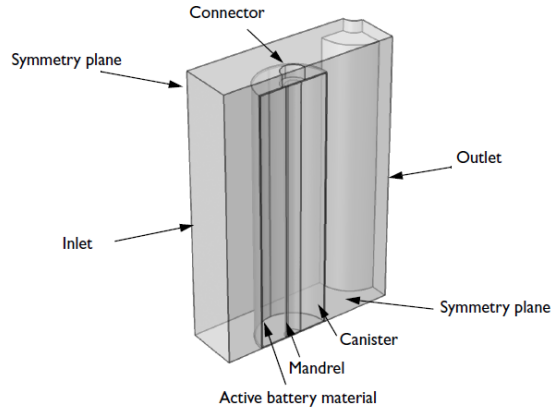
Distribution de température dans une batterie lithium-ion refroidie par eau



Distribution de température dans une batterie lithium-ion cylindrique

Demo:

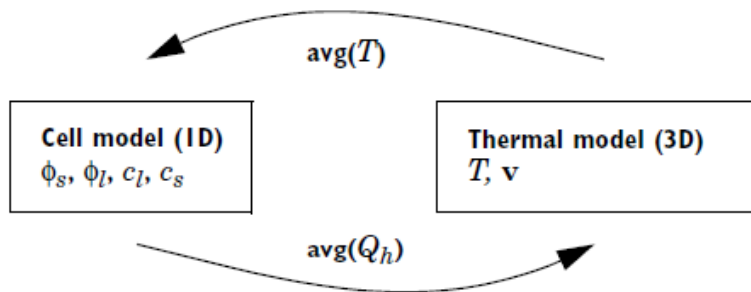
batterie lithium-ion cylindrique refroidie par air



Température (K) et
écoulement (m/s)

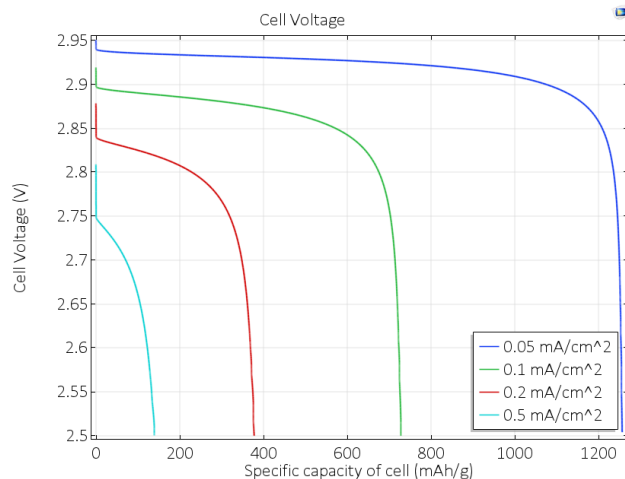
Spécificités de ce modèle

- Couplage électrochimie 1D et écoulement non isotherme 3D
- Source de chaleur : réactions électrochimiques
 - Modèle 1D de la batterie lithium-ion avec variable Q_h
- Modélisation homogène de la partie active de la batterie 3D
- Analyse temporelle avec initialisations partielles

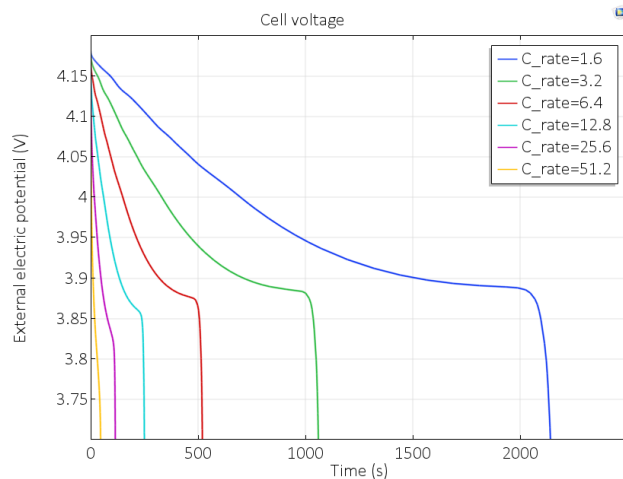


D'autres chimies

- NiMH, plomb-acide, lithium-air, lithium-ion à électrolyte solide, zinc-oxyde d'argent, et d'autres



Profil de décharge d'une batterie lithium-ion



Profil de décharge d'une batterie lithium-ion à électrolyte solide

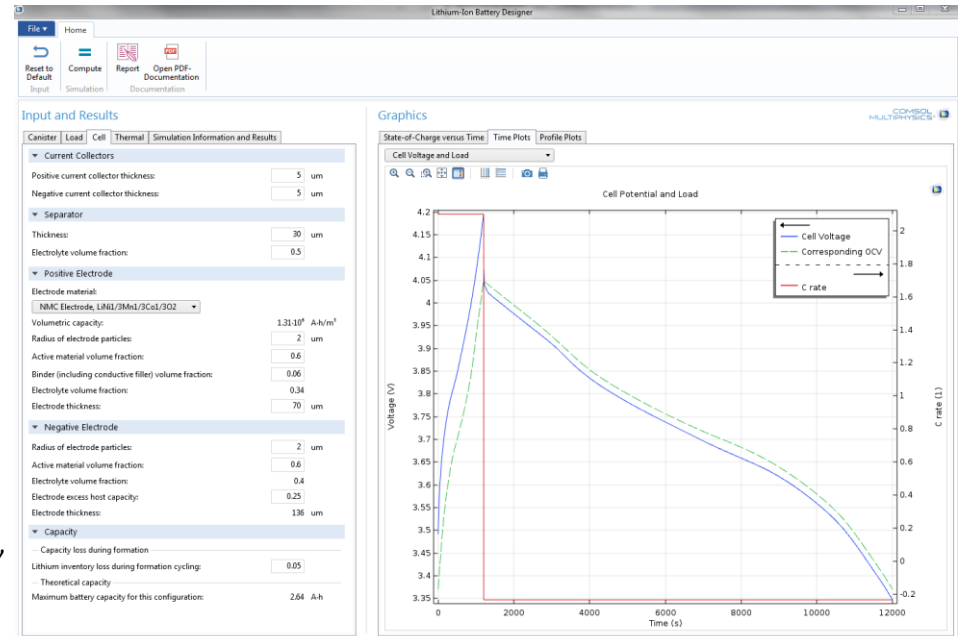
Bibliothèque matériaux

- Bibliothèque des matériaux communs pour les électrodes et les électrolytes des batteries lithium-ion, NiMH, et plomb-acide.
 - Conductivités des électrolytes
 - Potentiels d'équilibre
 - Coefficients de diffusion
 - Coefficients d'activité
 - Nombres associés au transport
 - Densités
 - Capacités calorifiques

- ▲ Batteries and Fuel Cells
 - ▲ Electrodes
 - Graphite Electrode, LixC6 MCMB (Negative, Li-ion Battery)
 - Hard Carbon (Negative, Li-ion Battery)
 - HxLiN5 Electrode (Negative, NiMH Battery)
 - LCO Electrode, LiCoO2 (Positive, Li-ion Battery)
 - LFP Electrode, LiFePO4 (Positive, Li-ion Battery)
 - LMO Electrode, LiMn2O4 Spinel (Positive, Li-ion Battery)
 - LTO Electrode, Li4Ti5O12 (Negative, Li-ion Battery)
 - LiNiO2 Electrode (Positive, Li-ion Battery)
 - NCA Electrode, LiNi0.8Co0.15Al0.05O2 (Positive, Li-ion Battery)
 - NMC Electrode, LiNi1/3Mn1/3Co1/3O2 (Positive, Li-ion Battery)
 - NiOH-Ox Electrode (Positive discharge, NiMH Battery)
 - NiOH-Ox Electrode (Positive charge, NiMH Battery)
 - Pb Electrode (Negative, Lead-Acid Battery)
 - PbO2 Electrode (Positive, Lead-Acid Battery)
 - Silicon electrode, LixSi (Negative, Li-ion Battery)
 - ▲ Electrolytes
 - KOH (Liquid binary electrolyte)
 - LiPF6 in 1:1 EC:DEC (Liquid electrolyte, Li-ion Battery)
 - LiPF6 in 1:2 EC:DMC and p(VdF-HFP) (Polymer electrolyte, Li-ion Battery)
 - LiPF6 in 2:1 EC:DMC and p(VdF-HFP) (Polymer electrolyte, Li-ion Battery)
 - LiPF6 in 3:7 EC:EMC (Liquid electrolyte, Li-ion Battery)
 - LiPF6 in PC:EC:EMC (Liquid electrolyte, Li-ion Battery)
 - Sulphuric Acid (Electrolyte, Lead-Acid Battery)

Applications (Apps)

- L'application Lithium-Ion Battery Designer permet d'optimiser la configuration d'une batterie lithium-ion
- Cette application analyse la capacité, l'efficacité énergétique, la génération de chaleur et les pertes de capacités liées aux réactions parasites pour un cycle de chargement spécifique
- Cette application permet une étude rapide de l'impact des paramètres design les plus courants, comme le choix des matériaux des électrodes, des épaisseurs et des bilans matériaux



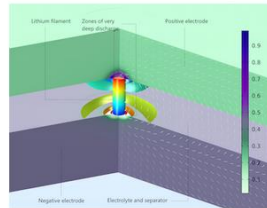
Ressources

- <https://www.comsol.fr/blogs/advancing-vanadium-redox-flow-batteries-with-modeling/>
- <https://www.comsol.fr/blogs/how-to-model-short-circuits-in-lithium-ion-batteries/>
- <https://www.comsol.fr/blogs/why-car-batteries-perform-poorly-in-cold-weather/>
- ...

How to Model Short Circuits in Lithium-Ion Batteries



Edmund Dickinson October 25, 2016

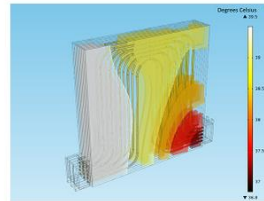


A short circuit in a battery is bad news: the chemical energy stored in the battery is lost as heat, rather than being used to power a device. Short circuits create intense heat, which can degrade battery materials or lead to fires or

Why Car Batteries Perform Poorly in Cold Weather



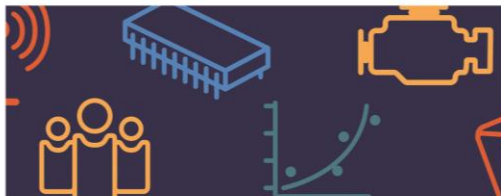
Ed Fontes February 5, 2015



Starting the car on a cold winter morning can be unpleasant if you have not been proactive the night before. When you are unable to start an engine, it is often the battery's fault. Why is a battery more sensitive than other processes in a car? The answer lies in the battery's ability

Further Resources for Inspiration

comsol.fr



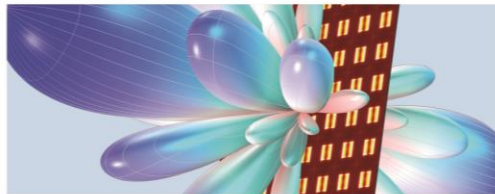
BLOG POSTS



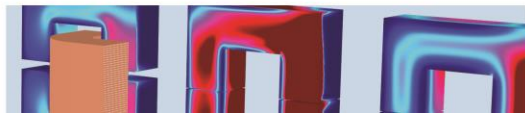
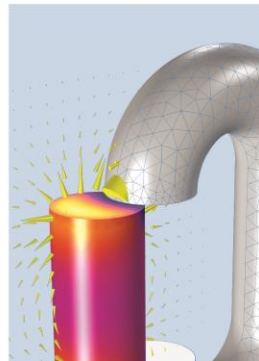
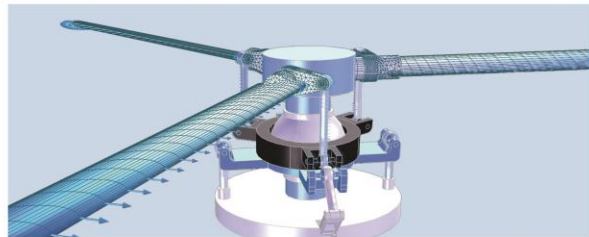
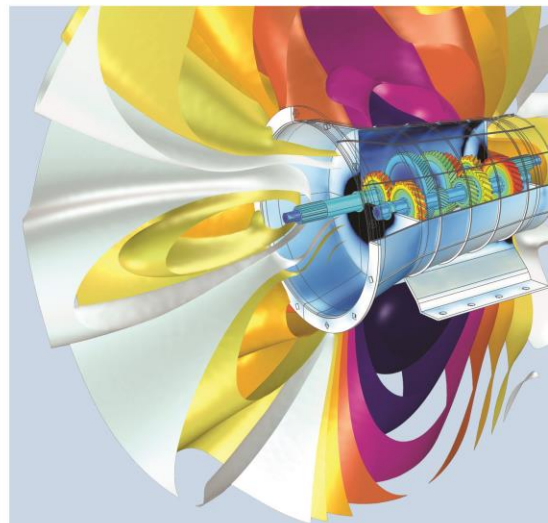
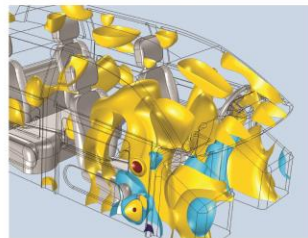
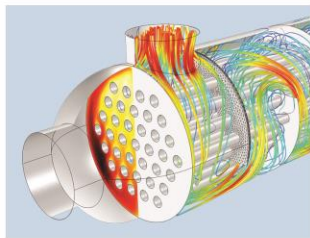
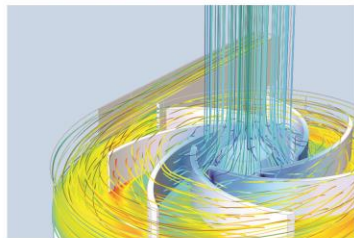
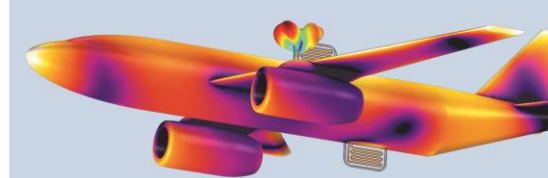
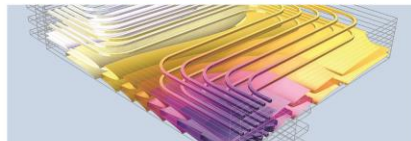
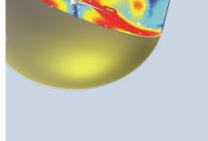
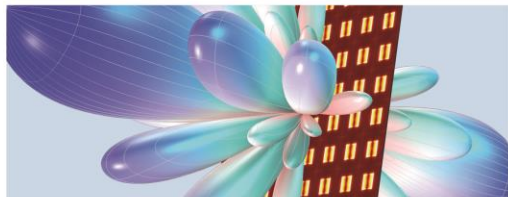
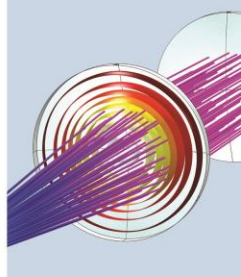
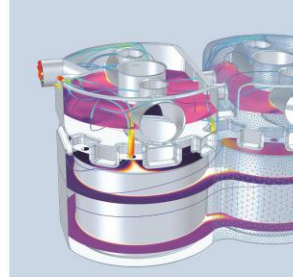
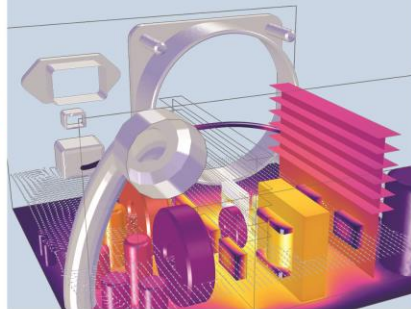
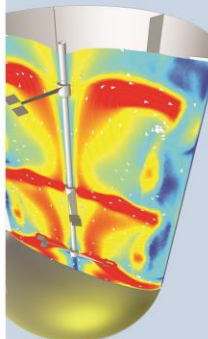
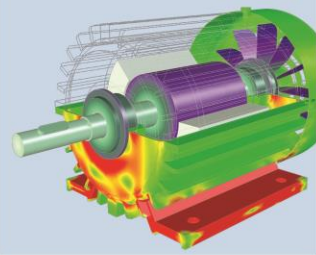
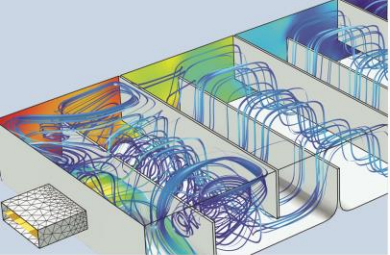
VIDEOS



USER STORIES



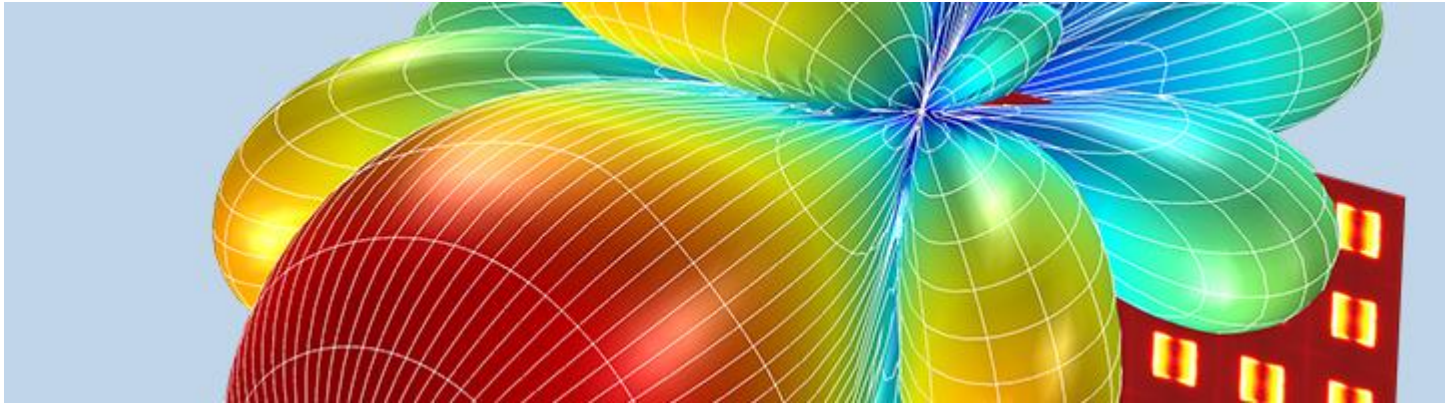
MODELS & APPLICATIONS



Contact Us

comsol.fr/contact

Prochain Webinar



Jeudi 7 novembre 2019

Simuler un Tag RFID