



UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
ESCUELA DE POSTGRADO Y EDUCACIÓN CONTINUA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA ELÉCTRICA

OPTIMIZACIÓN DE MODELO TÉRMICO PARAMÉTRICO DE BATERÍAS DE LITIO MEDIANTE ALGORITMOS EVOLUTIVOS

TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE MAGÍSTER EN CIENCIA DE DATOS

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL ELÉCTRICO

RAFAEL IGNACIO DE LA SOTTA VARGAS

PROFESOR GUÍA:
PABLO ESTÉVEZ VALENCIA

PROFESOR CO-GUÍA:
JORGE VERGARA QUEZADA

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:
WILLIAMS CALDERÓN MUÑOZ
MARCOS ORCHARD CONCHA

SANTIAGO DE CHILE

2023

RESUMEN DE LA TESIS PARA OPTAR AL
GRADO DE MAGÍSTER EN CIENCIA DE DATOS
Y MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE
INGENIERO CIVIL ELÉCTRICO
POR: RAFAEL IGNACIO DE LA SOTTA VARGAS
FECHA: 2023
PROF. GUÍA: PABLO ESTÉVEZ VALENCIA

OPTIMIZACIÓN DE MODELO TÉRMICO PARAMÉTRICO DE BATERÍAS DE LITIO MEDIANTE ALGORITMOS EVOLUTIVOS

Los packs de baterías de litio se utilizan habitualmente en los campos de la electromovilidad y el almacenamiento de energía distribuida. Sin embargo, su sensibilidad a altas temperaturas de funcionamiento y a grandes diferencias de temperatura entre las celdas provoca una notable caída de su rendimiento. Por esta razón, el modelamiento del comportamiento térmico de los packs de baterías en diferentes condiciones de funcionamiento es crucial tanto para el diseño como para su uso práctico.

En esta tesis se propone un modelo térmico paramétrico de un pack de baterías de litio que se ajusta a simulaciones de dinámica de fluidos computacional (CFD) por medio de algoritmos evolutivos (EA). Esto permite obtener expresiones matemáticas sencillas y físicamente interpretables para el coeficiente de arrastre, el factor de fricción y el número de Nusselt. El modelo propuesto obtiene un error medio porcentual absoluto del 2,39 % en la estimación del estado térmico estacionario de las celdas del pack, en comparación con las simulaciones CFD. Además, una extensión del modelo obtiene un error porcentual absoluto medio del 1,26 % en la estimación del equilibrio dinámico de temperatura para cada columna de celdas en el proceso de enfriamiento, en comparación con datos experimentales.

*“People are usually afraid of change because they fear the unknown.
But the single greatest constant of history is that everything changes.”*

Yuval Noah Harari

Agradecimientos

A mi familia, por brindar todo lo necesario para mi desarrollo.

A Fernanda, por siempre apoyarme en todo, incluidos mis estudios y metas.

A los amigos que hice en la universidad: Nicolás Grágeda, Matías Alfero, Andrés Fuenzalida, Matías Godoy, Matías Sepúlveda, Diego González y Diego Herrera. Muchas gracias por el apoyo y los buenos momentos.

A los profesores que participaron en esta investigación, por guiarme en el transcurso de ésta.

Tabla de Contenido

1. Introducción	1
1.1. Motivación	1
1.2. Hipótesis	2
1.3. Objetivos	2
1.3.1. Objetivo general	2
1.3.2. Objetivos específicos	2
1.4. Estructura de la tesis	2
2. Marco teórico y estado del arte	3
2.1. Estado del arte	3
2.1.1. Optimización de baterías de litio	3
2.1.2. Trabajos anteriores	4
2.2. Marco teórico	5
2.2.1. Conceptos de mecánica de fluidos	5
2.2.1.1. Expresiones de interés	5
2.2.1.1.1 Número de Reynolds	5
2.2.1.1.2 Número de Prandtl	5
2.2.1.1.3 Coeficiente de arrastre	5
2.2.1.1.4 Factor de fricción	6
2.2.1.1.5 Número de Nusselt	6
2.2.1.2. Ecuaciones de interés	6
2.2.1.2.1 Fuerza de fricción	6
2.2.1.2.2 Caída de presión	6
2.2.1.2.3 Conservación del momento lineal	7
2.2.1.2.4 Conservación del momento para fluidos	7
2.2.1.2.5 Conservación de la energía	8
2.2.1.2.6 Transferencia de calor	8
2.2.2. Batería de ion-litio	8
2.2.2.1. Reacciones químicas	9
2.2.2.2. Comportamiento eléctrico	9
2.2.2.3. Comportamiento térmico	10
2.2.2.3.1 Balance de energía	10
2.2.2.3.2 Circuito equivalente	11
2.2.2.4. Empaquetamiento de baterías de litio	12
2.2.3. Modelo térmico paramétrico	13
2.2.3.1. Estructura y variables	13
2.2.3.2. Cálculo de propiedades del fluido y de las celdas	14

2.2.3.2.1	Caída de presión del fluido	15
2.2.3.2.2	Velocidad del fluido	15
2.2.3.2.3	Temperatura del fluido	15
2.2.3.2.4	Temperatura de la celda	15
2.2.3.3.	Algoritmo general para el cálculo de propiedades	16
2.2.4.	Algoritmos evolutivos (EA)	17
2.2.4.1.	Definiciones generales	17
2.2.4.2.	Familias de algoritmos evolutivos	18
2.2.4.3.	<i>Grammatical Evolution</i> y sus variaciones	19
2.2.4.3.1	<i>Notación de Backus-Naur</i>	19
2.2.4.3.2	<i>Grammatical Evolution</i> (GE)	20
2.2.4.3.3	<i>Structured Grammatical Evolution</i> (SGE)	22
2.2.4.3.4	<i>Dynamic Structured Grammatical Evolution</i> (DSGE)	24
2.2.4.3.5	<i>Probabilistic Grammatical Evolution</i> (PGE)	24
3.	Metodología	25
3.1.	Herramientas	25
3.2.	Datos	25
3.2.1.	Simulaciones mediante CFD	25
3.2.1.1.	Variables simuladas	25
3.2.1.2.	Procesamiento para estimar los valores de interés	26
3.2.1.3.	Separación de los datos para el ajuste del modelo paramétrico	27
3.2.1.4.	Selección de características	28
3.2.2.	Mediciones experimentales	28
3.3.	Optimización de modelo térmico paramétrico de baterías de litio mediante algoritmos evolutivos	29
3.3.1.	Formulación del problema y solución propuesta	29
3.3.2.	Aplicación y adaptación de SGE al problema propuesto	30
3.3.2.1.	Modificaciones realizadas	30
3.3.2.2.	Parámetros	30
3.3.2.3.	Individuos	31
3.3.2.4.	Gramáticas	31
3.4.	Evaluación de modelo paramétrico	32
3.4.1.	Ajuste de las expresiones obtenidas con respecto a CFD	32
3.4.2.	Ajuste del modelo con respecto a CFD	33
3.4.3.	Sentido físico del modelo ajustado	33
3.5.	Extensión del modelo paramétrico y su evaluación	34
3.5.1.	Inclusión de dinámica para la temperatura	34
3.5.2.	Adaptación de resultados para otras estructuras	35
4.	Resultados y análisis	36
4.1.	Expresiones obtenidas	36
4.1.1.	Coefficiente de arrastre	36
4.1.2.	Factor de fricción	37
4.1.3.	Número de Nusselt	38
4.1.4.	Error de las expresiones	39
4.2.	Modelo térmico paramétrico	40

4.2.1.	Ajuste general	40
4.2.2.	Ajuste por columna	40
4.2.3.	Sentido físico	42
4.3.	Extensión del modelo térmico paramétrico	43
5.	Conclusión	45
	Bibliografía	46
	Anexos	51
A.	Modelo térmico paramétrico	51
A.1.	Funcionamiento general	51
A.2.	Funcionamiento específico	51
B.	Estimar expresiones de interés en base a los resultados de simulaciones mediante CFD	54
C.	Evaluación de Modelo paramétrico	55
C.1.	Sentido físico	55
C.1.1.	Corriente	55
C.1.2.	Factor de separación	56
C.1.3.	Flujo de entrada	56
C.1.4.	Diámetro	57
C.1.5.	Temperatura de entrada del fluido	57

Índice de Tablas

2.1.	Lista de variables del modelo térmico paramétrico. $E[a,b,c]$ corresponde a un arreglo de c números entre a y b (incluyendo ambos).	14
2.2.	<i>Mapping</i> de gramática utilizando genotipo para obtener fenotipo.	22
2.3.	<i>Mapping</i> de gramática utilizando genotipo para obtener fenotipo.	23
3.1.	Correlación de Pearson entre los parámetros de entrada y las expresiones estimadas a partir de los datos CFD.	28
3.2.	Lista de variables de las mediciones experimentales [43]. $E[a,b,c]$ es un arreglo de c números, entre a y b (incluyendo a ambos).	29
3.3.	Ajuste de los parámetros utilizados para evolucionar el SGE con el fin de obtener expresiones para optimizar el modelo fenomenológico.	31
3.4.	Resistencias térmicas y calor específico de baterías de litio para convección natural [60].	35
4.1.	Desempeño de las expresiones encontradas en comparación con la estimación de sus valores para simulaciones es CFD.	39
4.2.	Métricas globales del modelo paramétrico.	40
4.3.	MAPE de la extensión del modelo propuesto comparado con las mediciones experimentales, para packs de baterías de tres a diez columnas.	44
A.1.	Definición de parámetros. $E[a,b,c]$ corresponde a un arreglo de c números entre a y b (incluyendo ambos).	52

Índice de Ilustraciones

2.1.	Volumen de control dentro de un tubo que transporta un fluido.	7
2.2.	Variaciones en el comportamiento de una batería de litio (extraídas de [40]). .	10
2.3.	Temperatura superficial de una celda en proceso de descarga, en función del tiempo (extraída de [40]).	10
2.4.	Circuito equivalente para comportamiento térmico de una batería de litio (extraída de [40]).	11
2.5.	Ejemplo de banco de baterías de litio (extraída de [25]).	12
2.6.	Esquema de diseño de bancos de baterías (extraída de [22]).	12
2.7.	Estructura de un pack de baterías de 25 celdas utilizado para la simulación, mostrando las áreas donde se calculan las propiedades de las celdas (naranja) y las áreas donde se calculan las propiedades del fluido (azul). Las variables V_f , P_f , T_f y T_c corresponden a la velocidad del fluido, la caída de presión del fluido, la temperatura del fluido y la temperatura de la celda, respectivamente.	14
2.8.	Algoritmo utilizado por el modelo paramétrico para el cálculo de las salidas del modelo por columna (Fuente [21]).	16
2.9.	Ejemplo de iteración para obtener las salidas del modelo en una batería de tres columnas.	17
2.10.	Diagrama general de algoritmos evolutivos. Cada círculo representa a un individuo, y su color representa el fitness obtenido con este individuo.	18
2.11.	Ejemplo de gramática con notación de Backus-Naur.	20
2.12.	Ejemplo de genotipo utilizado en <i>Grammatical Evolution</i>	20
2.13.	Ejemplo de funcionamiento de <i>Grammatical Evolution</i>	21
2.14.	Ejemplo de funcionamiento de <i>Structured Grammatical Evolution</i>	22
2.15.	Ejemplo de funcionamiento de <i>Probabilistic Grammatical Evolution</i>	24
3.1.	Distribución de variables simuladas para un pack de 53 celdas.	26
3.2.	Estructura utilizada y mediciones obtenidas en los experimentos (extraídas de [43]).	29
3.3.	Temperatura de celda en función de la corriente, calculado mediante CFD para un pack de 53 celdas ($S=1.2$, $F= 50.75$ [CFM], $T_{in}=21.25$ [°C], $D=25.5$ [mm]).	33
3.4.	Temperatura de celda en función del factor de separación, calculado mediante CFD para un pack de 53 celdas ($I=3.75$ [A], $F= 50.75$ [CFM], $T_{in}=13.75$ [°C], $D=20.5$ [mm]).	34
3.5.	Estructuras utilizadas en este trabajo, el color naranja corresponde a celdas donde se calcula la temperatura.	35
4.1.	Visualización del coeficiente de arrastre en función del número de Reynolds y el factor de separación. a) Valores estimados en base a las simulaciones de CFD. b) Curvas resultantes al evaluar la expresión obtenida.	37

4.2.	Visualización del factor de separación en función del número de Reynolds y el factor de separación. a) Valores estimados en base a las simulaciones de CFD. b) Curvas resultantes al evaluar la expresión obtenida.	38
4.3.	Visualización del factor de separación en función del número de Reynolds y el factor de separación. El círculo rojo indica la zona de mayor variación.	38
4.4.	Visualización del número de Nusselt en función del número de Reynolds y el factor de separación. a) Valores estimados en base a las simulaciones de CFD. b) Curvas resultantes al evaluar la expresión obtenida.	39
4.5.	Error absoluto medio (MAE) en cálculo de variables del modelo para cada columna del pack.	41
4.6.	Error porcentual absoluto medio (MAPE) en cálculo de temperatura de celda por columna.	41
4.7.	Temperatura de celda en función de la corriente, calculado mediante CFD para un pack de 53 celdas ($S=1.2$, $F= 50.75$ [CFM], $T_{in}=21.25$ [°C], $D=25.5$ [mm]).	42
4.8.	Temperatura de celda en función del factor de separación, calculado mediante CFD para un pack de 53 celdas ($I=3.75$ [A], $F= 50.75$ [CFM], $T_{in}=13.75$ [°C], $D=20.5$ [mm]).	43
4.9.	Comparación entre las mediciones experimentales y el modelo propuesto en relación con el proceso de enfriamiento de un módulo de batería de tres columnas.	44
C.1.	Temperatura de celda en función de la corriente, calculado mediante CFD para un pack de 53 celdas ($S=1.2$, $F= 50.75$ [CFM], $T_{in}=21.25$ [°C], $D=25.5$ [mm]).	55
C.2.	Temperatura de celda en función del factor de separación, calculado mediante CFD para un pack de 53 celdas ($I=3.75$ [A], $F= 50.75$ [CFM], $T_{in}=13.75$ [°C], $D=20.5$ [mm]).	56
C.3.	Temperatura de celda en función del flujo de entrada, calculado mediante CFD para un pack de 53 celdas ($I=11.25$ [A], $S= 1.2$, $T_{in}=13.75$ [°C], $D=20.5$ [mm]).	56
C.4.	Temperatura de celda en función del diámetro, calculado mediante CFD para un pack de 53 celdas ($I=11.25$ [A], $S= 1.2$, $F= 50.75$ [CFM], $T_{in}=21.25$ [°C]). .	57
C.5.	Temperatura de celda en función de la temperatura de entrada del fluido, calculado mediante CFD para un pack de 53 celdas ($I=3.75$ [A], $S= 0.6$, $F= 50.75$ [CFM], $D=20.5$ [mm]).	57

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación

Desde su debut en la industria, las baterías de litio han destacado por su alta energía específica y densidad energética [1, 2]. Este tipo de baterías han sido ampliamente utilizadas en dispositivos eléctricos portátiles. Adicionalmente, hoy en día su uso también es común en la electromovilidad [2] y el almacenamiento de energía distribuida [3].

En el diseño de un pack de baterías, uno de los requisitos es la estabilidad térmica [4]. Se recomienda mantener los packs de baterías de litio dentro de los rangos de funcionamiento, tanto para la temperatura de la celda como para la diferencia de temperatura entre celdas, de lo contrario, su rendimiento y vida útil se ven reducidos [5, 6]. Las temperaturas por debajo del rango operativo provocan una caída del voltaje, debido a una disminución de las reacciones químicas [6]. Por otro lado, las temperaturas por encima del rango de funcionamiento aceleran las reacciones secundarias y la degradación [7], y pueden dar lugar a un *runaway* térmico, que es el problema más perjudicial para las baterías de litio [8].

Actualmente, el problema de asegurar la estabilidad térmica es abordado de distintas formas. Existe una variedad de investigaciones que buscan optimizar packs de baterías de litio, tanto en su estructura como en su sistema de ventilación. La distancia entre celdas es uno de los parámetros estructurales críticos estudiados en el diseño de packs de baterías. Varias investigaciones han estudiado el efecto de la distancia entre celdas en la distribución de temperatura [9–11].

En los últimos años, se han utilizado herramientas de inteligencia computacional para mejorar tanto la simulación como el diseño de packs de baterías de litio [4, 12–14]. En estas investigaciones se ha demostrado que es factible mejorar modelos de baterías de litio ajustando el cálculo de distintas variables, como el estado de carga, estado de salud, vida útil y capacitancia, entre otras [15]. Si bien estas herramientas son utilizadas para obtener valores óptimos, no se ha explotado la capacidad de estas para obtener expresiones matemáticas que se ajusten a un modelo y expliquen en cierta manera relaciones físicas.

El principal aporte de esta tesis es la propuesta de un modelo térmico paramétrico de un pack de baterías de litio que se ajusta mediante algoritmos evolutivos, utilizando resultados de simulaciones de CFD como referencia.

Producto de la optimización se obtienen expresiones matemáticas sencillas y físicamente

interpretables para el coeficiente de arrastre, el factor de fricción y el número de Nusselt. Estas expresiones incluyen como factor la distancia entre celdas, dando así una explicación de su impacto en el comportamiento del pack de baterías. Además, se desarrolla una extensión del modelo para la estimación del equilibrio dinámico de temperatura en el proceso de enfriamiento por convección forzada.

1.2. Hipótesis

Para este trabajo se tiene la hipótesis de que es posible ajustar un modelo térmico paramétrico de un pack de baterías mediante algoritmos evolutivos, encontrando expresiones simples que tengan sentido físico.

1.3. Objetivos

1.3.1. Objetivo general

Se desea ajustar un modelo térmico paramétrico de pack de baterías de litio utilizando algoritmos evolutivos con el fin obtener expresiones matemáticas para el coeficiente de arrastre, factor de fricción y número de Nusselt.

1.3.2. Objetivos específicos

Los objetivos específicos se exponen a continuación.

- Aplicar y adaptar un algoritmo evolutivo con el fin de encontrar expresiones para coeficiente de arrastre, factor de fricción y número de Nusselt, de manera que estas se ajusten a resultados de simulaciones por dinámica de fluidos computacional.
- Evaluar el modelo paramétrico ajustado comparando su comportamiento con el obtenido con dinámica de fluidos computacional, calculando el ajuste general y visualizando curvas físicas producidas por ambos.
- Extender el modelo paramétrico al cálculo de balance de temperatura en el tiempo y validar esta extensión con datos del enfriamiento de packs de baterías.

1.4. Estructura de la tesis

El desarrollo del presente trabajo de tesis está dividido en tres capítulos: *Marco teórico, Metodología y Resultados y análisis*. En el capítulo 2 *Marco teórico* se presentan definiciones utilizadas en el resto del desarrollo. Se definen conceptos de mecánica de fluidos, baterías de litio, el modelo paramétrico utilizado y algoritmos evolutivos. En el capítulo 3 *Metodología* se describen los pasos realizados para llegar a los resultados finales. Se mencionan las herramientas y datos utilizados. Luego, se describe el ajuste del modelo paramétrico por medio de Structured grammatical evolution. En el capítulo 4 *Resultados y análisis* se muestran las expresiones obtenidas y el comportamiento del modelo utilizando estas.

Finalmente, en el capítulo 5 *Conclusiones* se hace un breve resumen de los resultados y el impacto de estos. Además, se discuten posibles opciones de trabajos futuros, los cuales podrían mejorar el presente trabajo o bien utilizarlo como una herramienta.

Capítulo 2

Marco teórico y estado del arte

2.1. Estado del arte

2.1.1. Optimización de baterías de litio

Actualmente, el problema de asegurar la estabilidad térmica de packs de baterías de litio es abordado de distintas formas. Existen diversos estudios que buscan optimizar packs de baterías de litio, tanto en su estructura como en su sistema de ventilación.

En [7], se presenta una revisión de los últimos avances y retos de los sistemas de gestión térmica de baterías (BTMS). Existen dos criterios principales para evaluar el rendimiento de un BTMS: la temperatura máxima del pack de baterías y la diferencia de temperatura máxima de las celdas. En [16] se realiza una revisión de los avances en la convección forzada por aire en los BTMSs. Para la optimización de la convección forzada por aire se han adoptado cuatro enfoques técnicos:

- i Ubicación de las entradas y salidas.
- ii Canales de flujo (e.g. distancia entre celdas y disposición de las celdas de la batería).
- iii Estrategia de control del flujo (e.g. control activo de la temperatura y flujos de refrigeración bidireccionales).
- iv Control del estado del flujo (e.g. inserción de generadores de vórtice entre las celdas de la batería).

La distancia entre celdas, abarcada por el ítem *ii*, es uno de los parámetros estructurales críticos. Varios trabajos han estudiado el efecto de la distancia entre celdas en la distribución de la temperatura, mediante simulaciones CFD de módulos de baterías de hasta 24 celdas [9–11].

En los últimos años se han utilizado herramientas de inteligencia computacional para mejorar tanto la simulación como el diseño de baterías de litio, como redes neuronales (NN) [4], algoritmos evolutivos (EA) [12, 13] y combinaciones de ambas [14]. Entre los alcances de estas herramientas se encuentra el ajuste de modelos fenomenológicos de baterías para la mejora de su rendimiento, tanto para modelos de celda [17, 18] como para modelos de packs de baterías [19, 20]. Se ha demostrado que es factible mejorar modelos de baterías de litio ajustando el cálculo de distintas variables, como el estado de carga, estado de salud, vida útil

y capacitancia, entre otras [15].

Si bien estas herramientas son utilizadas para obtener valores óptimos, no se ha explotado la capacidad de estas para obtener expresiones matemáticas que se ajusten a un modelo y expliquen en cierta manera relaciones físicas.

2.1.2. Trabajos anteriores

El problema de obtener un modelo paramétrico óptimo de packs de baterías de litio ha sido trabajado anteriormente por distintos estudiantes de la Universidad de Chile. Jorge Reyes presentó un modelo fenomenológico a partir principios físicos aplicados a un esquema simplificado [21], el cual dio una base para siguientes trabajos.

El modelo presentado tiene como salidas propiedades de fluido (velocidad, presión y temperatura) y de celdas (temperatura). Dado que el modelo fenomenológico está hecho a partir de fórmulas simples, este tiene error en las salidas con respecto a modelos más complejos. Para mejorar el desempeño del modelo se propone ajustar sus cálculos, tomando en cuenta salidas de simulaciones más complejas. Se escogen tres variables físicas para ser ajustadas y de esta forma ajustar el modelo: coeficiente de arrastre, factor de fricción y número de Nusselt.

Francisco Villa propuso la optimización del modelo mediante algoritmos evolutivos, específicamente con programación genética [22]. De esta forma, se obtienen expresiones matemáticas óptimas para el coeficiente de arrastre, factor de fricción y número de Nusselt. Este trabajo dio paso a investigaciones que utilizan programación genética para optimizar el modelo, tales como el reporte de Germán García y Nicolás Tapia [23], y la memoria de Nicolás Aguilar [24].

Gracias a estos trabajos se demuestra el buen desempeño de algoritmos evolutivos para ajustar el modelo, pero las expresiones obtenidas no logran tener la simplicidad deseada.

El último trabajo sobre el tema es realizado por Francisco Born, quien utiliza otro algoritmo evolutivo llamado evolución gramatical, con la cual se puede tener un mayor control sobre la estructura de la solución [25]. Los resultados de Francisco Born son aún mejores que los anteriores, ajustando mejor el modelo a los datos de referencia para las salidas. Al igual que los trabajos anteriores, la simplicidad deseada para las expresiones matemáticas no es alcanzada.

2.2. Marco teórico

2.2.1. Conceptos de mecánica de fluidos

En la presente sección se definen ecuaciones utilizadas en mecánica de fluidos, que son relevantes para el trabajo realizado.

2.2.1.1. Expresiones de interés

2.2.1.1.1. Número de Reynolds

El número de Reynolds es un valor adimensional utilizado en mecánica de fluidos para indicar que tan turbulento es el movimiento de un fluido. Cuando este número tiene un valor menor a 2000 se dice que tiene un desplazamiento laminar, y a medida que el valor aumenta se dice que es turbulento [26].

En la ecuación 2.1 se muestra que el cálculo de este número, es igual al producto entre la densidad (ρ), la velocidad (u) y el diámetro de la tubería (d), dividido por la viscosidad dinámica del fluido (μ) [27, 28].

$$Re = \frac{\rho \cdot u \cdot d}{\mu} \quad (2.1)$$

2.2.1.1.2. Número de Prandtl

El número de Prandtl es un valor adimensional que contrapone la difusividad térmica (ν) y la viscosidad cinemática (α) para un fluido en movimiento, tal como se puede apreciar en la ecuación 2.2.

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} \quad (2.2)$$

2.2.1.1.3. Coeficiente de arrastre

El coeficiente de arrastre (c_d) es utilizado para calcular la fuerza de fricción entre un objeto y un fluido. Este coeficiente se relaciona tanto con la forma del objeto como con el fluido. En la ecuación 2.3 se puede apreciar como la fuerza de fricción (F_D) se calcula en función de coeficiente de arrastre (c_d), la densidad de fluido (ρ), velocidad (u) y el área de referencia (A).

$$F_d = \frac{c_d \cdot \rho \cdot u^2 \cdot A}{2} \quad (2.3)$$

Diferentes investigaciones han relacionado a este coeficiente con el número de Reynolds (Re). A modo de ejemplo, la ecuación 2.4 muestra una expresión del coeficiente de arrastre para fluido laminar, la cual es ampliamente aceptada [29]. Otra expresión comúnmente aceptada corresponde a la ecuación 2.5 [30].

$$c_d = \frac{24}{Re} \quad \text{para} \quad Re < 0.4 \quad (2.4)$$

$$c_d = \frac{24}{Re} + \frac{6}{1 + \sqrt{Re}} + 0.4 \quad \text{para} \quad Re < 5 \cdot 10^5 \quad (2.5)$$

2.2.1.1.4. Factor de fricción

El factor de fricción (f_D) es un número adimensional utilizado para cálculo de presión en fluidos. Su valor indica la pérdida de carga en una tubería debido a la fricción de ésta. Comúnmente, de forma empírica, se relaciona este coeficiente con el número de Reynolds. La ecuación 2.6 muestra una relación entre el factor de fricción y el número de Reynolds (Re) comúnmente utilizada para flujo laminar [31]. Para flujo turbulento se han propuesto gran variedad de expresiones, dependiendo del caso de uso y de rangos del número de Reynolds [31].

$$f_D = \frac{64}{Re} \quad \text{para } Re < 2 \cdot 10^3 \quad (2.6)$$

2.2.1.1.5. Número de Nusselt

El número de Nusselt (Nu) corresponde a la razón de la transferencia de calor por convección (h) y la transferencia de calor por conducción (k). La razón entre los coeficientes de transferencia es ponderada por un largo característico (L), el cual representa una distancia del problema en cuestión, tal como el diámetro de una tubería por donde fluye un fluido. En la ecuación 2.7 se muestra la expresión para obtener este coeficiente [32].

$$Nu = \frac{h \cdot L}{k} \quad (2.7)$$

De acuerdo con la literatura, el número de Nusselt es función del número de Reynolds y el número de Prandtl, estando ambas expresiones ponderadas por una constante. Ejemplo de esto es la ecuación 2.8, donde C , n y m corresponden a constantes [33].

$$Nu = C \cdot Re^n \cdot Pr^m \quad (2.8)$$

2.2.1.2. Ecuaciones de interés

2.2.1.2.1. Fuerza de fricción

La resistencia o Fuerza de fricción corresponde a una fuerza contraria al movimiento que experimenta un cuerpo transportándose por medio de un fluido. Esta fuerza puede ocurrir entre un objeto y un fluido, o bien entre dos fluidos.

En la ecuación 2.30 se muestra que esta fuerza es calculada en función de la densidad del fluido (ρ), velocidad relativa entre los cuerpos (v), el coeficiente de arrastre (c_{drag}) y el área de la sección donde ocurre la interacción entre los cuerpos ($A_{sección}$).

$$F_{Drag} = \frac{1}{2} \cdot \rho \cdot v^2 \cdot c_d \cdot A_{sección} \quad (2.9)$$

2.2.1.2.2. Caída de presión

La caída de presión corresponde a la diferencia de presión entre dos puntos pertenecientes a un medio por donde se desplaza un fluido.

En la ecuación 2.10 se muestra la ecuación de Darcy-Weisbach para una tubería de diámetro constante. Tal como se puede ver, la razón entre la diferencia de presión (Δp) y la distancia entre los puntos (L) se calcula en función del factor de fricción (f_D), la densidad del fluido (ρ), la velocidad relativa entre los cuerpos (v) y el diámetro de la tubería (D_H) [34].

$$\frac{\Delta p}{L} = f_D \cdot \frac{\rho}{2} \frac{v^2}{D_H} \quad (2.10)$$

2.2.1.2.3. Conservación del momento lineal

La derivada del momento es igual la suma de las fuerzas que interactúan con el cuerpo en cuestión, tal como se puede apreciar en la ecuación 2.11 [35].

La conservación del momento indica que, de no haber fuerzas externas, la derivada del momento debe ser igual a cero, es decir, el momento se conserva [35].

$$\frac{dM}{dt} = \sum F \quad (2.11)$$

Ahora bien, asumiendo que existe aceleración (a) y variación de masa, se obtiene la ecuación 2.12 [36].

$$\frac{dM}{dt} = \frac{dm}{dt} \cdot v + m \cdot \frac{dv}{dt} = \frac{dm}{dt} \cdot v + m \cdot a \quad (2.12)$$

2.2.1.2.4. Conservación del momento para fluidos

Es posible hacer ciertas simplificaciones para el caso específico de fluidos que se transportan por un tubo en una sola dirección. En este caso se puede definir un volumen de control y analizar las propiedades del fluido antes y después de pasar por este volumen. La Figura 2.1 muestra gráficamente este escenario.

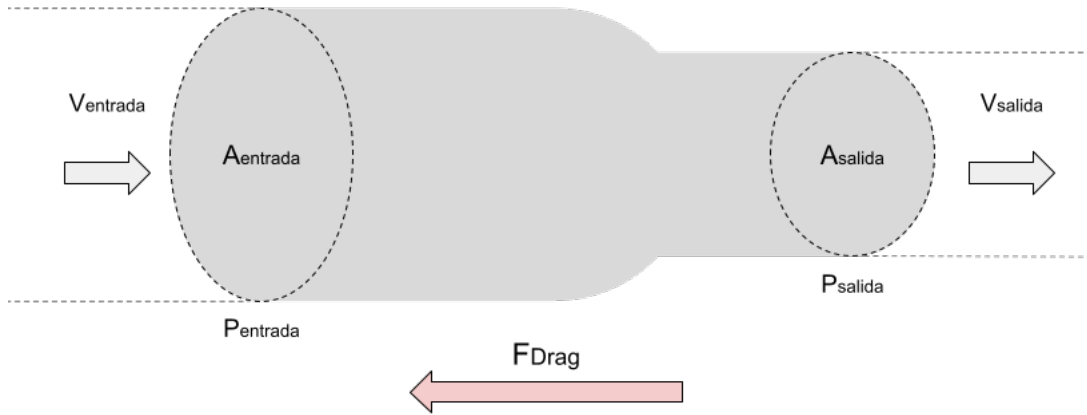


Figura 2.1: Volumen de control dentro de un tubo que transporta un fluido.

Suponiendo que la única fuerza externa es la de fricción (F_{Drag}) se obtiene la ecuación 2.13.

$$\sum F_{entrada} = \sum F_{salida} + F_{Drag} \quad (2.13)$$

Se reemplaza cada sumatoria de fuerzas tal como se hace en la ecuación 2.12, y se sustituye la fuerza ejercida por el fluido por la fuerza de la presión de este ($m \cdot a = P \cdot A$). Como resultado se obtiene la ecuación 2.14.

$$V_{entrada} \cdot \frac{dm_{entrada}}{dt} + P_{entrada} \cdot A_{entrada} = V_{salida} \cdot \frac{dm_{salida}}{dt} + P_{salida} \cdot A_{salida} + F_{Drag} \quad (2.14)$$

2.2.1.2.5. Conservación de la energía

La ley de conservación de la energía dicta de manera general que la energía no se crea ni se destruye, sino que se transforma. La primera ley de la termodinámica es una extensión de esta ley, con expresiones aplicables a sistemas determinados. En la ecuación 2.15 se expresa la primera ley de la termodinámica, la cual dice que la variación de energía interna en un sistema (ΔE) es igual a la transferencia de calor al sistema (Q) más el trabajo hecho por el sistema (W) [37].

$$\Delta E = Q + W \quad (2.15)$$

Esta expresión puede ser modificada para el caso específico de dinámica de fluidos, donde se tiene un volumen de control, flujo entrando y flujo saliendo. Reemplazando la energía por la entalpía específica ($H = m \cdot h$), energía cinética ($\frac{m \cdot V^2}{2}$) y energía potencial ($m \cdot g \cdot z$), se obtiene la ecuación 2.16.

$$m \cdot (\Delta h + \frac{\Delta V^2}{2} + \Delta g z) = Q_{fluido} + W_{eje} \quad (2.16)$$

Para el caso de fluidos, se reemplaza la masa (m) por el flujo másico (\dot{m}), el cual varía en el tiempo. Para este caso la fórmula queda tal como se muestra en la ecuación 2.17.

$$\dot{m} \cdot (\Delta h + \frac{\Delta V^2}{2} + \Delta g z) = Q_{fluido} + W_{eje} \quad (2.17)$$

2.2.1.2.6. Transferencia de calor

Existen distintos mecanismos por los cuales se transfiere el calor, a continuación se describen la convección y conducción.

La convección corresponde a la transferencia de calor por medio de un fluido en movimiento. El movimiento de este fluido puede ser natural o forzado por un sistema externo [38]. Este mecanismo ocurre mayormente entre un objeto sólido y un fluido, transfiriéndose el calor por medio del área superficial del sólido. El calor transferido por convección se calcula como muestra la ecuación 2.18, donde el calor transferido por unidad de área (\dot{q}) es igual al producto del coeficiente de convección del fluido (h) por la diferencia de temperatura entre los cuerpos (ΔT) [38].

$$\dot{q} = h \cdot \Delta T \quad (2.18)$$

La conducción corresponde a la transferencia de energía por medio de colisiones a nivel molecular [39]. El calor transferido por conducción se calcula como muestra la ecuación 2.19, donde el calor transferido por unidad de área (\dot{q}) es igual al negativo del producto del coeficiente de conducción del material (k) por la diferencia de temperatura entre puntos a medir (ΔT) [39].

$$\dot{q} = -k \cdot \Delta T \quad (2.19)$$

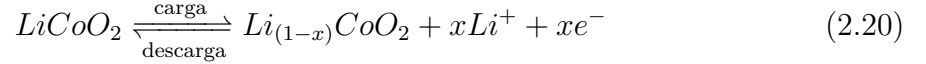
2.2.2. Batería de ion-litio

2.2.2.1. Reacciones químicas

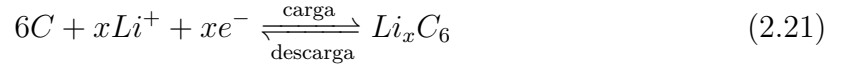
En las baterías de litio el electrolito contiene iones de litio (Li^+), los cuales fluyen a través del separador. El sentido en que se desplazan los iones de litio depende del proceso por el que está pasando la batería, carga o descarga. En carga los iones de litio se desplazan desde el ánodo al cátodo, mientras que en descarga se desplazan de cátodo a ánodo.

Los electrodos de las baterías de litio pueden estar conformados de distintos materiales. A modo de ejemplo, en una batería el ánodo puede estar compuesto de grafito y el cátodo de $LiCoO_2$. Esta batería toma el nombre de $LiCoO_2$ /grafito. Para esta batería se tienen las siguientes ecuaciones de carga y descarga [8]. En estas ecuaciones se utiliza x como nomenclatura para indicar que estas reacciones ocurren múltiples veces.

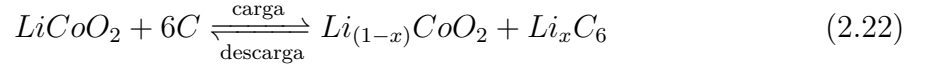
- Cátodo



- Ánodo



- Reacciones



2.2.2.2. Comportamiento eléctrico

Debido a las reacciones químicas en descarga se producen corrientes de electrones, lo cual corresponde a una corriente eléctrica. Esta corriente permite alimentar sistemas eléctricos como celulares, computadores o incluso autos.

Las celdas tienen una corriente nominal, que corresponde a la corriente estimada a producir en el proceso de descarga. Debido a que la corriente es producida por reacciones químicas, podemos asumir que no existirá un valor constante de corriente, esto se puede apreciar mejor en la Figura 2.2.a. El comportamiento de las baterías de litio varía según la temperatura a la que ésta se encuentre y la carga que ésta tenga. Prueba de cómo influyen estos dos factores en el funcionamiento de la batería es su efecto en la resistencia eléctrica de ésta, lo cual se puede ver en la Figura 2.2.b.

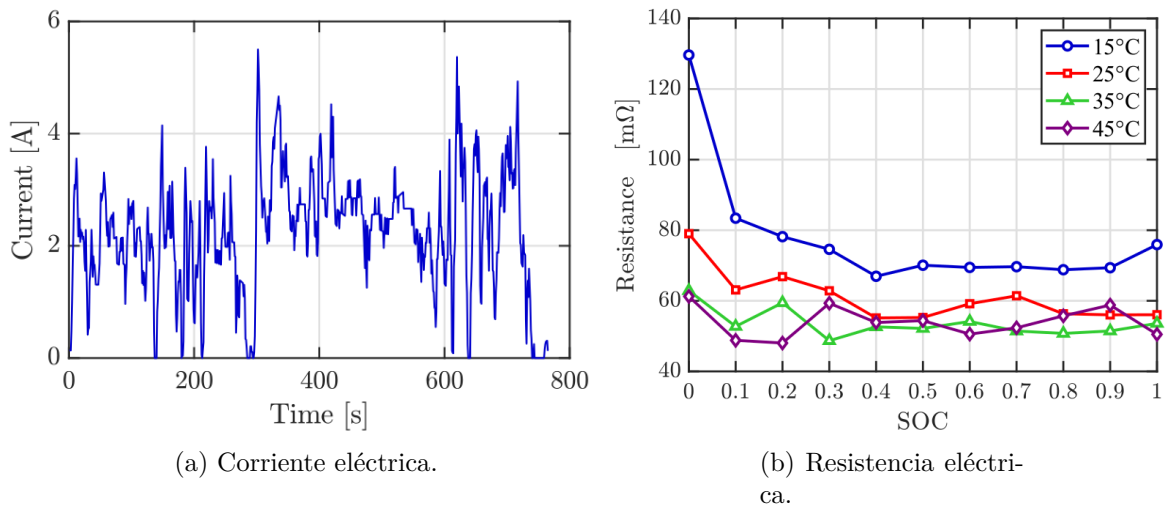


Figura 2.2: Variaciones en el comportamiento de una batería de litio (extraídas de [40]).

2.2.2.3. Comportamiento térmico

Las celdas, tanto en carga como descarga, generan una importante cantidad de calor, el cual es generado por el efecto joule y por la energía de reacciones químicas [41]. En la Figura 2.3 se puede ver como varía la temperatura de celda en comparación de la temperatura ambiente. El comportamiento mostrado en la figura corresponde a una celda en descarga con un proceso de convección natural, es decir, sin ventilación para reducir la temperatura generada.

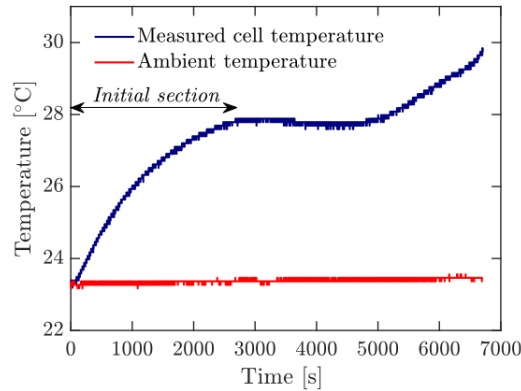


Figura 2.3: Temperatura superficial de una celda en proceso de descarga, en función del tiempo (extraída de [40]).

2.2.2.3.1. Balance de energía

El balance térmico de una batería depende del calor generado por ésta y el calor transferido al medio. Una forma de representar el balance de calor de una celda está dado por la ecuación 2.23. En ésta se puede apreciar como la variación de temperatura superficial $\frac{dT_s}{dt}$ ponderada por la capacidad térmica C_p es igual a la suma de energía, Q_{conv} , Q_{rad} y Q_{gen} . El término Q_{conv} corresponde a la convección, Q_{rad} corresponde a la radiación, y por último, Q_{gen} corresponde al calor generado al interior de la celda [40].

$$C_p \cdot \frac{dT_s}{dt} = Q_{conv} + Q_{rad} + Q_{gen} \quad (2.23)$$

La generación de calor es el calor total producido por la celda. Por otro lado, el calor de convección y radiación es calor transmitido al medio.

La ecuación 2.24 muestra una forma de calcular el calor generado por la celda, donde I y R corresponden a la corriente y resistencia eléctrica, T_{in} corresponde a la temperatura interna de la celda y V_{oc} el voltaje de circuito abierto.

La ecuación 2.25 muestra como calcular el calor por convección, donde h_{conv} es el coeficiente de transferencia de calor por convección y A_s es el área superficial de la celda.

La ecuación 2.26 muestra como calcular el calor por radiación, donde ϵ es la emisividad de la celda, σ la constante de *Steffan-Boltzmann* ($5.67 \times 10^{-8} [Wm^{-2}K^{-4}]$) y T_{sur} la temperatura en torno a la celda.

$$Q_{gen} = I^2 \cdot R - I \cdot (T_{in} \cdot \frac{dV_{oc}}{dT_{in}}) \quad (2.24)$$

$$Q_{conv} = -A_s \cdot h_{conv} \cdot (T_s - T_{amb}) \quad (2.25)$$

$$Q_{rad} = -A_s \cdot \epsilon \cdot \sigma \cdot (T_s^4 - T_{sur}^4) \quad (2.26)$$

2.2.2.3.2. Circuito equivalente

Los circuitos equivalentes simplifican el comportamiento de un sistema, en este caso el comportamiento térmico de una celda. En la Figura 2.4 se muestra el circuito equivalente utilizado en este trabajo [42].

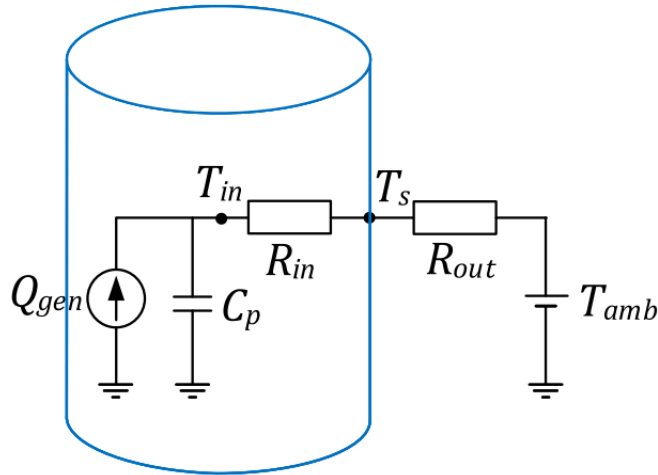


Figura 2.4: Circuito equivalente para comportamiento térmico de una batería de litio (extraída de [40]).

En este modelo las temperaturas interna, superficial y externa de la celda (T_{in}, T_s, T_{amb}) son calculadas como voltajes, mientras que el calor es representado por la corriente. Además, se incluyen las resistencias térmicas interna y externa de la celda (R_{in} y R_{out}). Por último, la capacidad térmica es representada como una capacitancia.

Del circuito equivalente se obtiene una nueva expresión para el balance de calor de la celda,

la cual corresponde a la variación en la temperatura superficial de ésta. Esta nueva expresión corresponde a la ecuación 2.27.

$$\frac{dT_s}{dt} = \frac{T_{amb} - T_s}{C_p \cdot (R_{in} + R_{out})} + \frac{Q_{gen} \cdot R_{out}}{C_p \cdot (R_{in} + R_{out})} \quad (2.27)$$

2.2.2.4. Empaquetamiento de baterías de litio

Individualmente, las baterías tienen limitaciones en cuanto a potencia y durabilidad. El conjunto de baterías permite superar estas limitaciones, lo cual aumenta consigo el número de aplicaciones en las que éstas son útiles.

Las baterías son ordenadas en bancos de baterías con el fin de proporcionar un determinado valor de voltaje por cierto tiempo [43].

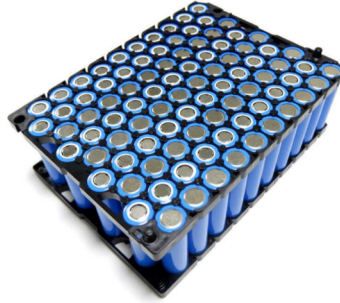


Figura 2.5: Ejemplo de banco de baterías de litio (extraída de [25]).

La celda corresponde a la unidad básica de los bancos de baterías, éstas pueden ser organizadas de acuerdo a distinto número y distribución espacial. Un conjunto de celdas forma un módulo, y un conjunto de módulos conforma a un pack.

Adicionalmente, un banco de baterías requiere herramientas para asegurar su correcto funcionamiento, como ventiladores, computadores y sensores, tal como se muestra en la Figura 2.6. Estos componentes se encargan de medir y regular variables internas, en especial la temperatura.

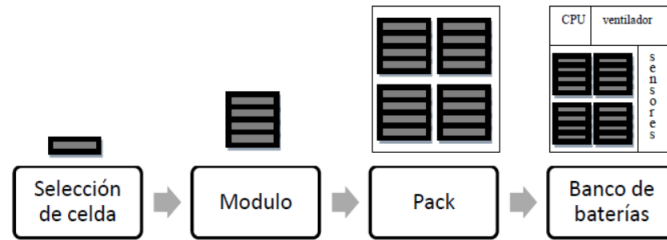


Figura 2.6: Esquema de diseño de bancos de baterías (extraída de [22]).

Al diseñar un banco se debe tener especial cuidado con el manejo de la temperatura, ya que, tal como se ha mencionado anteriormente, elevadas temperaturas o diferencias de temperaturas provocan problemas en el funcionamiento de éstas [44].

Con el fin de evitar problemas se recurre a simulaciones de funcionamiento para cada sistema

y optimización para decidir cuál de los sistemas simulados cumple de mejor manera con el funcionamiento esperado.

2.2.3. Modelo térmico paramétrico

El modelo térmico paramétrico (PTM) propuesto relaciona las temperaturas de las celdas en el módulo de la batería con las condiciones del flujo de aire de refrigeración. Se calcula la temperatura de las celdas, mientras que para el flujo de aire de refrigeración se calculan la temperatura, la velocidad y la caída de presión. Para su desarrollo se toma como base el modelo desarrollado por Jorge Reyes el año 2014 [21], el cual incluye información tanto de la celda como del fluido utilizado para su enfriamiento. Este modelo, a su vez, está inspirado en los bancos de tubos, donde ocurre convección forzada [45].

2.2.3.1. Estructura y variables

La Figura 2.7 muestra un ejemplo de un pack de baterías de 25 celdas con siete columnas, y las áreas donde se calculan las propiedades. La figura muestra también las condiciones de borde del modelo. En la primera columna del pack de baterías, que es la entrada del flujo, hay dos condiciones de borde, la velocidad inicial ($V_{f,in}$) y la temperatura inicial ($T_{f,in}$) del flujo. Por otro lado, en la última columna, la presión atmosférica (P_{atm}) es una condición de borde. Para este trabajo se asigna un valor de cero a esta presión ($P_{atm} = 0$), por lo tanto, se calcula una caída de presión con referencia a la salida del pack.

El volumen de control, mostrado en la Figura 2.7, es la unidad básica del modelo paramétrico, que recorre iterativamente de izquierda a derecha el canal central del pack para calcular las variables. Los cálculos se realizan de tal forma que para determinadas columnas se obtienen propiedades de celda, mientras que para otras se obtienen propiedades del fluido. Debido a esto, las columnas se dividen en columnas de celdas y columnas de fluidos. En la estructura utilizada, el número de columnas de fluido (n_f) es siempre uno más que las columnas de celdas (n_c). La estructura mostrada en la Figura 2.7 tiene cuatro columnas de fluido ($n_f = 4$) y tres columnas de celda ($n_c = 3$). Cabe notar que, en este trabajo, un pack de baterías de N columnas corresponde a $7 \cdot ((N - 1)/2) + 4$ celdas. Por ejemplo, $N=7$ implica 25 celdas.

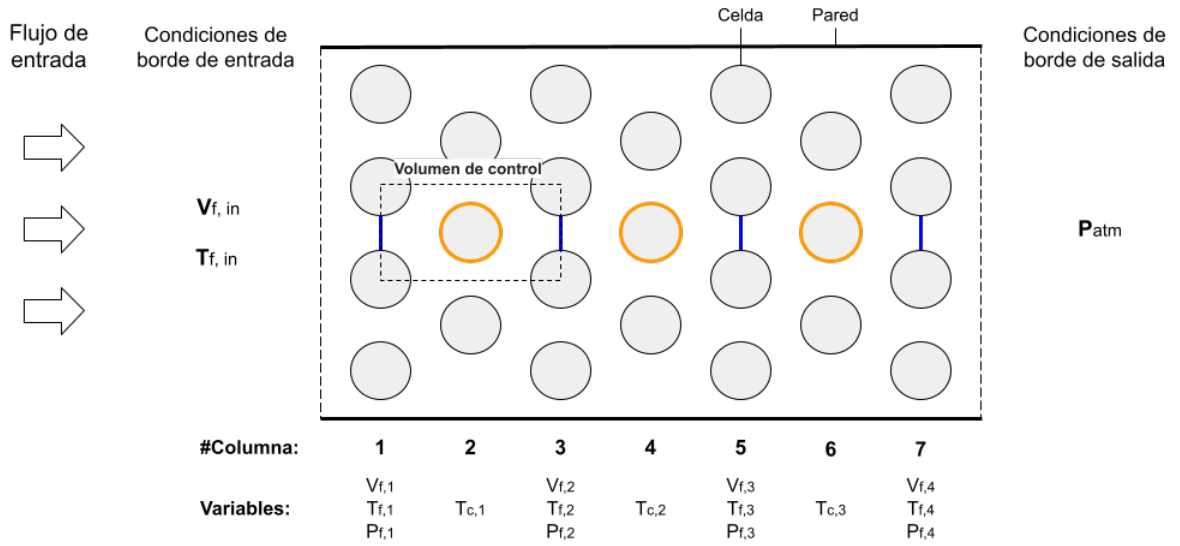


Figura 2.7: Estructura de un pack de baterías de 25 celdas utilizado para la simulación, mostrando las áreas donde se calculan las propiedades de las celdas (naranja) y las áreas donde se calculan las propiedades del fluido (azul). Las variables V_f , P_f , T_f y T_c corresponden a la velocidad del fluido, la caída de presión del fluido, la temperatura del fluido y la temperatura de la celda, respectivamente.

La Tabla 2.1 muestra las variables de entrada y salida utilizadas en este modelo térmico paramétrico. Los rangos de valores de cada variable se indican en la última columna. Estos son los utilizados en las simulaciones de datos CFD a los que se ajusta el modelo.

Tabla 2.1: Lista de variables del modelo térmico paramétrico. E[a,b,c] corresponde a un arreglo de c números entre a y b (incluyendo ambos).

Tipo	Símbolo	Variable	Unidades	Valores
Input	I	Corriente que pasa por cada celda	A	E[0,15,52]
	D	Diámetro de cada celda	mm	E[18,28,52]
	S	Factor de separación de celdas	-	E[0.3, 1.5,52]
	F	Flujo de entrada de fluido	CFM	E[1, 200,52]
	$T_{f,in}$	Temperatura de entrada del fluido	°C	E[10, 25,52]
	n	Número de columnas del pack	-	{7,15,21,25}
	ϵ	Umbral de error para el ajuste	-	1e-3
Output	$T_{c,i}$	Temperatura de la celda	°C	-
	$P_{f,i}$	Caída de presión del fluido	Pa	-
	$T_{f,i}$	Temperatura del fluido	°C	-
	$V_{f,i}$	Velocidad del fluido	ms^{-1}	-

2.2.3.2. Cálculo de propiedades del fluido y de las celdas

Para obtener las propiedades del fluido y de la celda para cada columna es necesario aplicar las ecuaciones físicas, que se describen a continuación.

En este trabajo, el objetivo es encontrar nuevas expresiones para el coeficiente de arrastre, el factor de fricción y el número de Nusselt, con el fin de mejorar el rendimiento en el cálculo de la velocidad del fluido, la caída de presión del fluido y la temperatura de la celda, respectivamente.

2.2.3.2.1. Caída de presión del fluido

El cálculo de la presión del fluido se basa en la fórmula de Darcy-Weisbach, explicada en la sección 2.2.1.2.2, donde se utiliza el factor de fricción (f_D), la densidad del fluido (ρ) y la velocidad del fluido (V_f). Este cálculo se utiliza para cada i -ésima columna de fluido, tal como se muestra en la ecuación 2.28. A la última columna se le asigna la condición de borde (P_{atm}), por lo tanto, la presión calculada tiene como referencia la última columna.

$$P_{f,i} = \begin{cases} \frac{f_D \cdot \rho_i \cdot V_{f,i}^2}{2} + P_{f,i+1}, & i < n_f \\ P_{atm}, & i = n_f \end{cases} \quad (2.28)$$

2.2.3.2.2. Velocidad del fluido

El cálculo de la velocidad del fluido se basa en la conservación del momento, explicada en la sección 2.2.1.2.4, donde se utiliza el flujo másico (\dot{m}), el área de entrada del volumen de control (A), y la caída de presión del fluido (P_f). Además, se supone que la fuerza externa es la fuerza de arrastre (F_{Drag}). Este cálculo se utiliza para cada columna de fluido, tal como se muestra en la ecuación 2.29. A la primera columna de fluido se le asigna la condición de borde ($V_{f,in}$), la cual se obtiene a partir del flujo de entrada al pack (F).

$$V_{f,i+1} = \begin{cases} V_{f,in}, & i = 1 \\ V_{f,i} + \frac{A \cdot (P_{f,i} - P_{f,i+1}) - F_{Drag,i}}{\dot{m}}, & i > 1 \end{cases} \quad (2.29)$$

Para el cálculo de la fuerza de arrastre, explicada en la sección 2.2.1.2.1, se utiliza el coeficiente de arrastre (c_d), tal como se muestra en la ecuación 2.30.

$$F_{Drag,i} = \frac{1}{2} \cdot \rho_i \cdot V_{f,i}^2 \cdot c_d \cdot A \quad (2.30)$$

2.2.3.2.3. Temperatura del fluido

El cálculo de la temperatura del fluido se basa en la conservación de la energía, la cual se describe en la sección 2.2.1.2.5, donde se utiliza la capacidad calorífica específica (c_p), la masa (m), la velocidad del fluido (V_f), y el calor generado (Q_{gen}). Este cálculo se utiliza para cada columna de fluido, tal como se muestra en la ecuación 2.31. A la primera columna de fluido se le asigna la condición de borde ($T_{f,in}$).

$$T_{f,i+1} = \begin{cases} T_{f,in}, & i = 1 \\ T_{f,i} + \frac{1}{c_{p,i}} \cdot \left(\frac{Q_{gen}}{m} - \frac{\Delta V_{f,i}^2}{2} \right), & i > 1 \end{cases} \quad (2.31)$$

2.2.3.2.4. Temperatura de la celda

El cálculo de la temperatura de la celda se basa en la ecuación de transferencia de calor por convección, la cual es descrita en la sección 2.2.1.2.6, donde se utiliza el coeficiente de transferencia de calor (h), la superficie (A_s) y la temperatura de fluido (T_f). Este cálculo se utiliza para cada columna de celda, tal como se muestra en la ecuación 2.34.

$$T_{c,i} = \frac{Q_{gen}}{h_i \cdot A_s} + T_{f,i} \quad (2.32)$$

El coeficiente de transferencia de calor (h) puede obtenerse en función de la transferencia de calor por conducción (k), el número de Nusselt y una longitud característica que en este caso es el diámetro de las celdas (D), tal como se muestra en la ecuación 2.34.

$$h_i = \frac{Nu_i \cdot k_i}{D} \quad (2.33)$$

$$T_{c,i} = \frac{Q_{gen} \cdot D}{Nu_i \cdot k_i \cdot A_s} + T_{f,i} \quad (2.34)$$

2.2.3.3. Algoritmo general para el cálculo de propiedades

Para la obtención de las variables de salida del modelo se realiza un cálculo iterativo, el cual consiste en calcular todas las variables repetidamente hasta converger a determinados valores. De este modo, se obtiene un equilibrio en el que se satisfacen todas las ecuaciones físicas del modelo. En la Figura 2.8 se muestra el algoritmo utilizado para obtener los valores de las variables de salida.

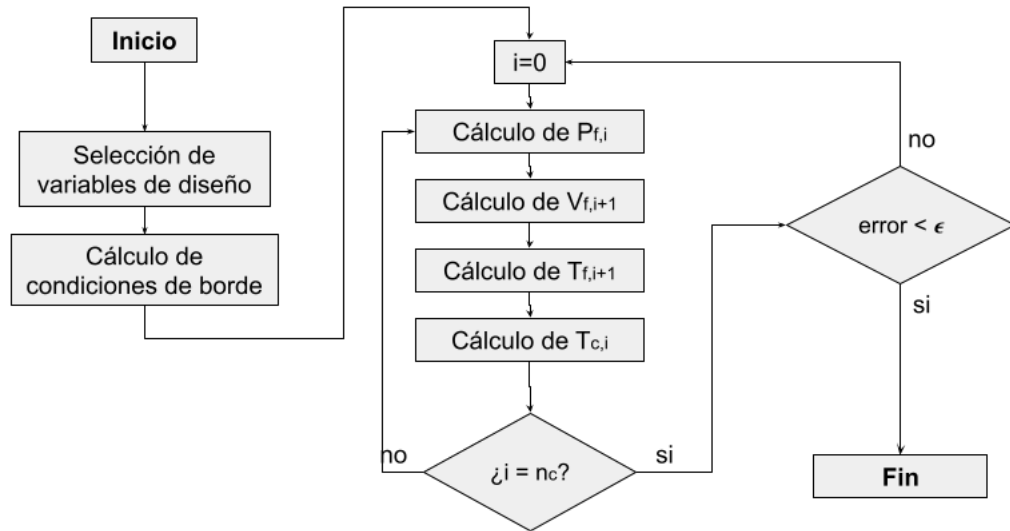


Figura 2.8: Algoritmo utilizado por el modelo paramétrico para el cálculo de las salidas del modelo por columna (Fuente [21]).

Las variables de diseño corresponden a las variables de entrada de la Tabla 2.1. El cálculo de condiciones de borde se refiere a las condiciones de borde de la velocidad, temperatura y presión de fluido, mostradas en la Figura 2.7. Luego, se realizan los cálculos de las propiedades, mostrados en la sección 2.2.3.2. Estos cálculos son realizados para todas las columnas, exceptuando las condiciones de borde, y es por esto que se realizan n_c cálculos para cada propiedad. En cada iteración se calcula cada una de las propiedades y se revisa el error entre la propiedad calculada y el valor anterior, por ejemplo, para la velocidad en la segunda columna de fluido, suponiendo que se está en la iteración número 10, se tendría: $error_{V_{f,2}} = |V_{f,2}^{10} - V_{f,2}^9|$, donde $V_{f,2}^j$ corresponde al valor de $V_{f,2}$ en la iteración número j . Para que el algoritmo converja los errores de todas las propiedades deben ser menores al

umbral (ϵ). Una vez alcanzada esta convergencia se asume que todas las ecuaciones físicas se satisfacen y se está en un estado estacionario. En la Figura 2.9 se puede ver como se calculan las propiedades tomando en cuenta las condiciones de borde para un ejemplo de tres columnas.

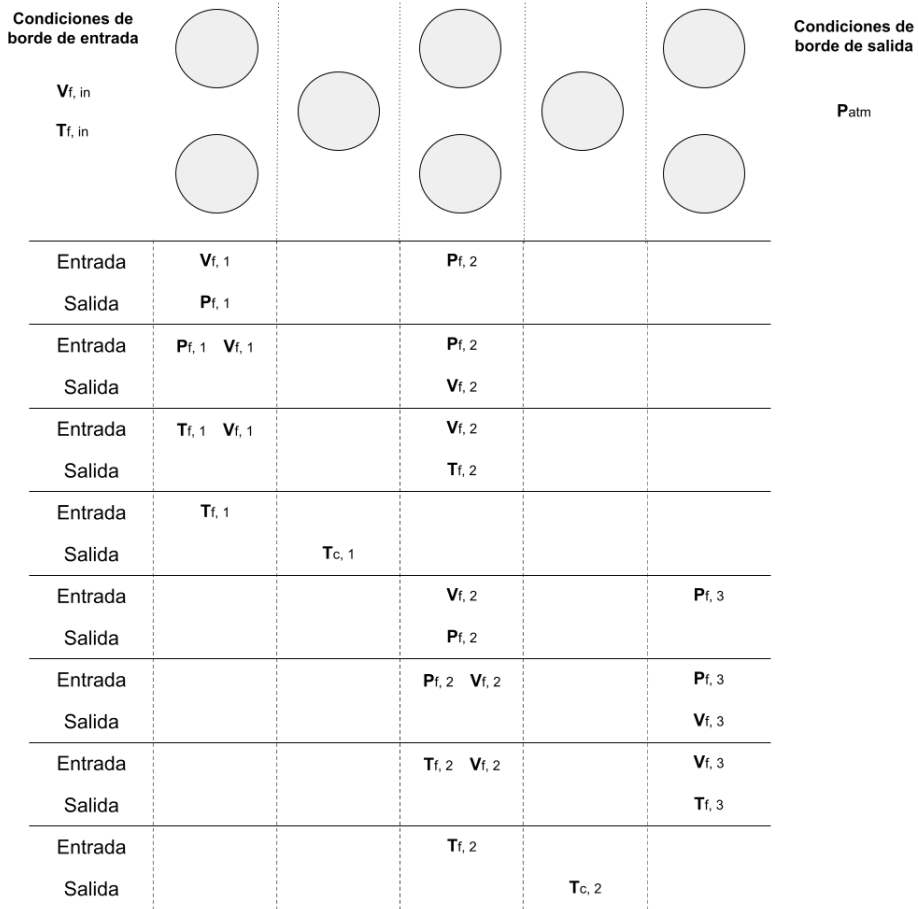


Figura 2.9: Ejemplo de iteración para obtener las salidas del modelo en una batería de tres columnas.

2.2.4. Algoritmos evolutivos (EA)

La presente sección se divide en dos partes. En la primera parte se realizan breves definiciones sobre algoritmos evolutivos. En la segunda parte se describe un algoritmo evolutivo en específico y sus variantes. Este algoritmo se llama *Grammatical Evolution* (GE), y una de sus variaciones es la utilizada en este trabajo, cuyo nombre es Structured Grammatical Evolution (SGE).

2.2.4.1. Definiciones generales

Los algoritmos evolutivos (EA) son métodos de inteligencia computacional inspirados en la selección natural y la genética. En estos algoritmos se trabaja con múltiples posibles soluciones a un problema dado, a las cuales se les denomina individuos. Este conjunto de posibles soluciones, denominado población, pasa por etapas llamadas generaciones, en donde sufren cambios motivados por la biología, tales como selección, recombinación y mutación. Esto se puede apreciar mejor en la Figura 2.10.

A continuación se definen los conceptos anteriormente mencionados:

- **Fitness:** Función que evalúa fenotipo de un individuo para así obtener su rendimiento.
- **Selección:** Subgrupo de la población que pasa a la siguiente generación.
- **Mutación:** Modificación aleatoria de un individuo.
- **Recombinación:** Combinación de individuos a nivel de genotipos, lo cual resulta en un nuevo individuo.

Los individuos de una generación son variaciones de los mejores individuos de la generación anterior, y de esta forma se quiere obtener individuos que superen el desempeño de la mejor solución actual.

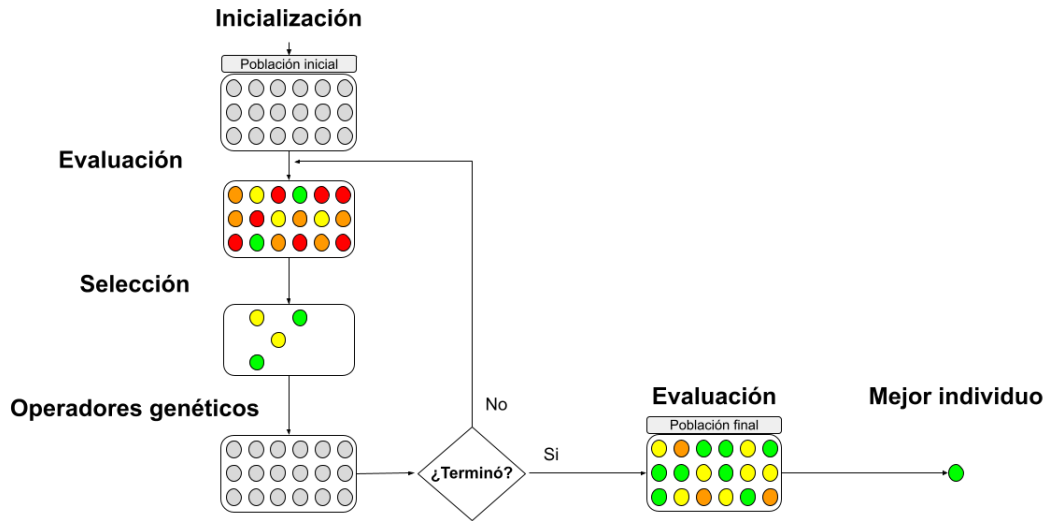


Figura 2.10: Diagrama general de algoritmos evolutivos. Cada círculo representa a un individuo, y su color representa el fitness obtenido con este individuo.

2.2.4.2. Familias de algoritmos evolutivos

Existen diferentes familias de algoritmos evolutivos, tal como Algoritmos Genéticos (GA), Programación Genética (GP), Evolución Diferencial (DE), Estrategias Evolutivas (ES), Programación Evolutiva (EP), entre otras [46]. A continuación, se describen de manera breve las dos primeras nombradas, Algoritmos Genéticos (GA) [47] y Programación Genética (GP) [48].

Los GA son utilizados mayormente en optimización y problemas de búsqueda. En estos algoritmos los individuos comúnmente representan valores de conjuntos de parámetros (e.g., árboles de decisión y la optimización de hiperparámetros) [47]. En GP los individuos representan comúnmente programas ejecutables, estos pueden ser expresiones matemáticas, funciones, un algoritmo, entre otras. Uno de los principales tipos de problemas en que se ocupan estos algoritmos son los de regresión simbólica (SR), en los cuales se busca obtener una expresión matemática que explique la relación entrada-salida de ciertos datos (e.g., *Grammatical Evolution* (GE) y *Gene Expression Programming*) [48].

En trabajos anteriores se ha comprobado que *Grammatical Evolution*, el cual es de tipo GP, obtiene mejores resultados para el ajuste de modelos fenomenológicos de baterías de litio que otros enfoques [25]. Debido a esto se decide trabajar con este método y variaciones del mismo.

2.2.4.3. *Grammatical Evolution* y sus variaciones

Grammatical Evolution (GE) es un algoritmo perteneciente a la familia de programación genética (GP), en el cual se utiliza una gramática para la decodificación de individuos. En esta sección se muestra la notación utilizada en la gramática de GE, el método mismo y algunas de sus variaciones.

2.2.4.3.1. *Notación de Backus-Naur*

La notación de Backus-Naur (BNF) permite representar la gramática de un lenguaje mediante reglas de producción [49]. En esta notación las variables son indicadas dentro *brackets* ($\langle \rangle$), el símbolo “ $::=$ ” es utilizado para indicar una regla y “ $|$ ” es utilizado para separar las distintas opciones de ésta [50].

A continuación se muestran ejemplos de la utilización de este método para obtener expresiones conocidas.

- **Dígito**

La variable $\langle digit \rangle$ puede tomar cualquier valor entero entre 0 y 9, tal como se espera para un dígito.

```
1  $\langle digit \rangle ::= 0 \mid 1 \mid 2 \mid 3 \mid 4 \mid 5 \mid 6 \mid 7 \mid 8 \mid 9$ 
```

- **Número entero**

La variable $\langle integer \rangle$ contiene un signo y una serie de dígitos ($\langle digit \rangle$), cuya cantidad será igual o mayor a uno, pues se elige de forma recursiva.

```
1  $\langle integer \rangle ::= \langle sign \rangle \langle unsigned integer \rangle$ 
2  $\langle unsigned integer \rangle ::= \langle digit \rangle \mid \langle unsigned integer \rangle \langle digit \rangle$ 
3  $\langle sign \rangle ::= + \mid -$ 
4  $\langle digit \rangle ::= 0 \mid 1 \mid 2 \mid 3 \mid 4 \mid 5 \mid 6 \mid 7 \mid 8 \mid 9$ 
```

Cada gramática de esta notación puede ser representada mediante la tupla N, T, S, P.

La letra T corresponde a los elementos terminales, pues corresponden a opciones para la expresión final. Para el ejemplo del dígito, el conjunto terminal corresponde a $\{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9\}$, mientras que en el ejemplo del número entero el conjunto terminal corresponde a $\{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, -, +\}$.

La letra N corresponde a los elementos no-terminales, estos son utilizados como variables. Para el ejemplo del dígito el conjunto no-terminal corresponde a $\{\langle digit \rangle\}$, mientras que en el ejemplo del número entero el conjunto no-terminal corresponde a $\{\langle integer \rangle, \langle unsigned integer \rangle, \langle digit \rangle\}$.

S corresponde a la expresión inicial del lenguaje en cuestión. Para los ejemplos de dígito y número entero, S corresponde a $\langle digit \rangle$ y $\langle integer \rangle$, respectivamente.

Finalmente, P corresponde al conjunto de reglas de la gramática en cuestión. En el ejemplo

del dígito corresponde a la regla para obtener a este, mientras que en el ejemplo del número entero corresponde a las cuatro reglas mostradas, con las cuales es posible obtener un número entero.

La Figura 2.11 muestra un ejemplo de gramática BNF. En ésta se pueden ver los terminales (T), no-terminales (N), punto de partida (S) y las reglas (P).

N = {expr, op, pre_op}	
T = {sin, +, -, /, *, X, 1, 0}	
S = <expr>	
P	<expr> ::= <expr><op><expr> (0)
	(<expr><op><expr>) (1)
	<pre_op><expr> (2)
	<var> (3)
	<op> ::= + (0)
	- (1)
	/ (2)
	* (3)
	<pre_op> ::= sin (0)
	<var> ::= X (0)
	1.0 (1)

Figura 2.11: Ejemplo de gramática con notación de Backus-Naur.

2.2.4.3.2. *Grammatical Evolution* (GE)

Grammatical Evolution es un algoritmo evolutivo que utiliza una gramática para la decodificación de individuos, la cual está en notación de Backus-Naur. En este algoritmo los individuos están conformados de un genotipo y un fenotipo. El genotipo corresponde a la codificación del individuo, mientras que el fenotipo es la solución propuesta, la cual se obtiene al decodificar el genotipo utilizando la gramática [49].

En *Grammatical Evolution* el genotipo corresponde a un arreglo de números enteros, donde cada elemento tiene el nombre de “codon”. Cada genotipo, al ser evaluado en la gramática del problema, obtiene una expresión. En la Figura 2.12 se puede ver un ejemplo de un genotipo, donde cada número entero corresponde a un codón.

[84, 63, 320, 37, 34, 43, 39, 64, 32, 154, 52]

Figura 2.12: Ejemplo de genotipo utilizado en *Grammatical Evolution*.

En la Figura 2.13 se ejemplifica como ocurre el proceso de transcripción del genotipo por medio de la gramática, lo cual termina en un fenotipo aplicable al problema en cuestión.

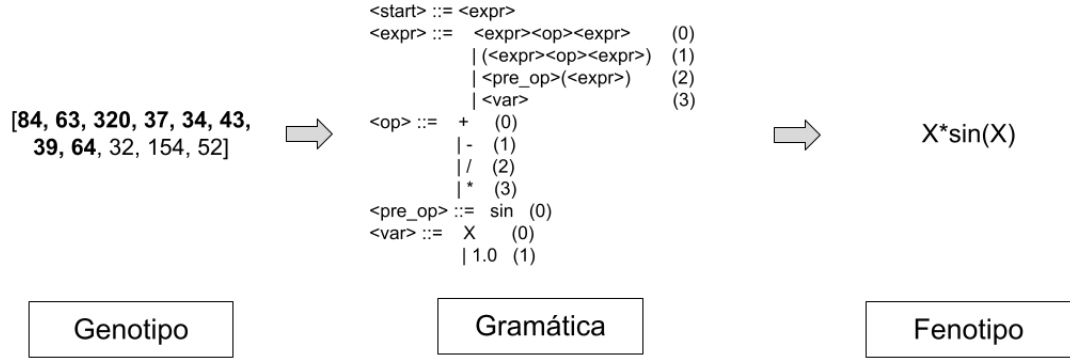


Figura 2.13: Ejemplo de funcionamiento de *Grammatical Evolution*.

Los codones son utilizados como reglas, pero para ser aplicables se debe pasar de un número entero a un índice entre las opciones. Por ejemplo, en la Figura 2.13 se muestra que el primer codón es 84, y también se puede apreciar que la expresión de inicio de la gramática corresponde a $\langle expr \rangle$. La expresión $\langle expr \rangle$ tiene cuatro opciones, tal como muestra la gramática, entonces cada número que sea utilizado para obtener una opción de expresión deberá ser reducido a una de las opciones.

La solución a este problema viene dada por la función MOD , la cual entrega el resto de la división entre dos números. Entonces, dado el valor de un codón, este es dividido por la cantidad de opciones del no-terminal evaluado. En la ecuación 2.35 se puede ver como debe ser utilizada la función MOD en el caso del primer codón, resultando la regla 0, es decir, $\langle expr \rangle \langle op \rangle \langle expr \rangle$.

$$MOD(84, 4) = 0 \quad (2.35)$$

En la Tabla 2.2 se detalla cada paso de la lectura de la gramática mediante el genotipo (*Mapping*) visualizado en la Figura 2.13. En esta tabla se indica el índice del genotipo (*Índice*), el valor del codón (*Codón*), la regla seleccionada (*Regla*) luego de la función MOD y el cambio en la expresión gracias al codón (*Expresión antes* y *Expresión después*). De acuerdo a la regla del punto de partida (S), para este caso, el comienzo de la transcripción comienza con la variable $\langle expr \rangle$ ($\langle start \rangle ::= \langle expr \rangle$).

Tabla 2.2: *Mapping* de gramática utilizando genotipo para obtener fenotipo.

Índice	Codón	Regla	Expresión antes	Expresión después
-	-	-	$\langle \text{start} \rangle$	$\langle \text{expr} \rangle$
0	84	0	$\langle \text{expr} \rangle$	$\langle \text{expr} \rangle \langle \text{op} \rangle \langle \text{expr} \rangle$
1	63	3	$\langle \text{expr} \rangle \langle \text{op} \rangle \langle \text{expr} \rangle$	$\langle \text{var} \rangle \langle \text{op} \rangle \langle \text{expr} \rangle$
2	320	0	$\langle \text{var} \rangle \langle \text{op} \rangle \langle \text{expr} \rangle$	$\mathbf{X} \langle \text{op} \rangle \langle \text{expr} \rangle$
3	37	3	$\mathbf{X} \langle \text{op} \rangle \langle \text{expr} \rangle$	$\mathbf{X} * \langle \text{expr} \rangle$
4	34	2	$\mathbf{X} * \langle \text{expr} \rangle$	$\mathbf{X} * \langle \text{pre_op} \rangle (\langle \text{expr} \rangle)$
5	43	0	$\mathbf{X} * \langle \text{pre_op} \rangle (\langle \text{expr} \rangle)$	$\mathbf{X} * \sin(\langle \text{expr} \rangle)$
6	39	3	$\mathbf{X} * \sin(\langle \text{expr} \rangle)$	$\mathbf{X} * \sin(\langle \text{var} \rangle)$
7	64	0	$\mathbf{X} * \sin(\langle \text{var} \rangle)$	$\mathbf{X} * \sin(\mathbf{X})$

2.2.4.3.3. *Structured Grammatical Evolution* (SGE)

Structured Grammatical Evolution (SGE) es una variación de GE que asegura una relación *uno-a-uno* entre genes y elementos de la gramática. En esta variación, el genotipo es dividido por no-terminales, es decir, existe una lista de codones para cada no terminal de la gramática [51]. Este cambio permite que la modificación de valores en los codones (producto de mutación y recombinación) tenga un menor efecto en la estructura. SGE ha demostrado tener un mejor desempeño que GE en la mayoría de problemas que han sido comparados. En particular, SGE tiene mejores resultados en problemas de regresión simbólica (SR) [52].

En la Figura 2.14 se ejemplifica como ocurre el proceso de transcripción del genotipo por medio de la gramática. Tal como se puede apreciar en la figura, cada codón del genotipo está asignado a un determinado no-terminal.

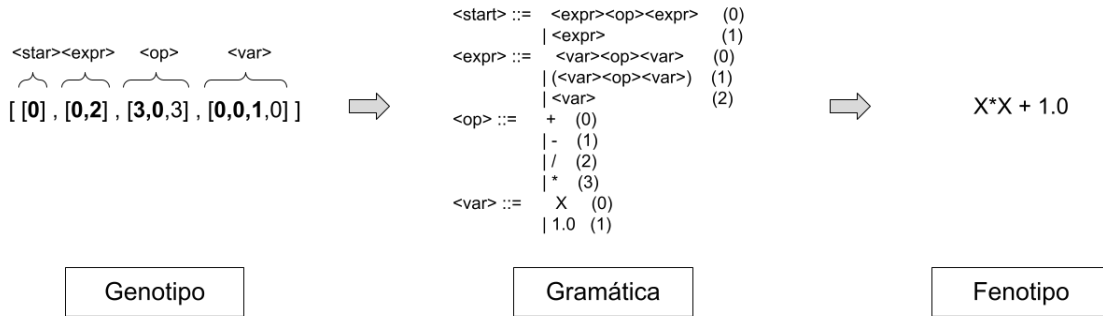


Figura 2.14: Ejemplo de funcionamiento de *Structured Grammatical Evolution*.

En la Tabla 2.3 se detalla cada paso de la lectura de la gramática mediante el genotipo (*Mapping*) visualizado en la Figura 2.14. En esta tabla se indica el índice de la lista en el genotipo (i_l), el índice del codón en la lista (i_c), la regla seleccionada (*Regla*) luego de la función *MOD* y el cambio en la expresión gracias al codón (*Expresión antes* y *Expresión después*).

Tabla 2.3: *Mapping* de gramática utilizando genotipo para obtener fenotipo.

i_l	i_c	Regla	Expresión antes	Expresión después
0	0	0	<start>	<expr><op><expr>
1	0	0	<expr><op><expr>	<var><op><var><op><expr>
3	0	0	<var><op><var><op><expr>	X<op><var><op><expr>
2	0	3	X<op><var><op><expr>	X*<var><op><expr>
3	1	0	X*<var><op><expr>	X*X<op><expr>
2	1	0	X*X<op><expr>	X*X+<expr>
1	1	2	X*X+<expr>	X*X+<var>
3	2	1	X*X+<var>	X*X+1.0

Preprocesamiento

El algoritmo SGE requiere obtener el máximo posible de ocurrencias para cada no-terminal. Para este cálculo solo se necesita la gramática, pues esta es la que dicta las restricciones. En el genotipo, cada lista representa a un no-terminal, y el largo de esta lista corresponde al máximo de ocurrencias posible de esta variable, según la gramática. Esto se puede visualizar en la Figura 2.14.

Para que sea posible obtener la forma del genotipo se requiere que existan ocurrencias máximas determinadas, es decir, no infinitas, y para que esto ocurra la gramática debe ser no recursiva [51].

Recursividad en gramática

La siguiente corresponde a una gramática recursiva, pues es posible generar repetidamente el mismo no-terminal a partir de este mismo, lo cual tiene la capacidad de obtener individuos de largo infinito.

```

1 <start> ::= <expr>
2 <expr> ::= (<expr><op><expr>) | <pre_op>(<expr>)| <var>
3 <op> ::= + | - | / | *
4 <pre_op> ::= sin
5 <var> ::= X | 1.0

```

La siguiente corresponde a una gramática no recursiva, pues un terminal no puede ser remplazado por sí mismo, lo que evita la posibilidad se genera expresiones infinitas.

```

1
2 <start> ::= <expr>
3 <expr> ::= (<expr_1><op><expr_1>) | <pre_op>(<expr_1>)| <var>
4 <expr_1> ::= (<expr_2><op><expr_2>) | <pre_op>(<expr_2>)| <var>
5 <expr_2> ::= (<var><op><var>) | <pre_op>(<var>)| <var>
6 <op> ::= + | - | / | *
7 <pre_op> ::= sin
8 <var> ::= X | 1.0

```

2.2.4.3.4. *Dynamic Structured Grammatical Evolution (DSGE)*

Dynamic Structured Grammatical Evolution (DSGE) corresponde a una mejora de *Structured Grammatical Evolution*, donde el principal cambio ocurre en el manejo del largo del genotipo [53]. DSGE calcula un largo de genotipo dependiendo en cada individuo, de esta forma se guardan solo los codones utilizados para cada no-terminal. Se modifican los algoritmos de mutación y recombinación para no tener problemas con genotipos de distinto largo. Como consecuencia de los cambios efectuados, es posible utilizar gramáticas recursivas en este algoritmo.

Para efectos de este trabajo, DSGE es considerado como una actualización de SGE, por lo que ocupa la modificación efectuada por este, pero se le sigue llamando SGE al algoritmo.

2.2.4.3.5. *Probabilistic Grammatical Evolution (PGE)*

Probabilistic Grammatical Evolution (PGE) corresponde a una variación de GE enfocada en ajustar la evolución en cuanto a determinar probabilidades de ocurrencia para cada regla. En este algoritmo, a diferencia de GE, el genotipo es una lista de probabilidades, las cuales indican cuál regla de la gramática se debe escoger [54]. La gramática indica la probabilidad de cada regla, la cual comienza siendo equiprobable para cada caso, pero en cada generación se modifica la probabilidad según la regla sea o no utilizada por el mejor individuo de la generación.

En la Figura 2.15 es posible apreciar un ejemplo de como funciona el proceso de *Mapping* de la gramática mediante un genotipo.

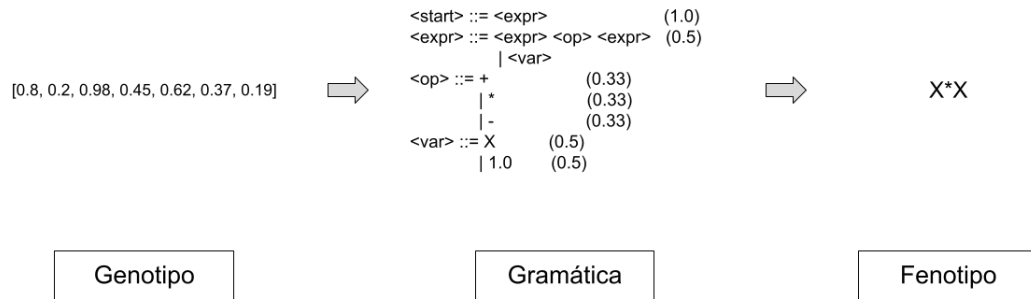


Figura 2.15: Ejemplo de funcionamiento de *Probabilistic Grammatical Evolution*.

Capítulo 3

Metodología

3.1. Herramientas

El modelo térmico paramétrico, que está basado en el de Jorge Reyes [21], fue desarrollado en el lenguaje de programación *Python*.

Para la optimización del modelo paramétrico se utiliza como base el repositorio de *Structured Grammatical Evolution* (SGE), el cual está escrito en *Python* y corresponde a la última actualización de este hasta la fecha [52].

3.2. Datos

Este trabajo utiliza dos fuentes, simulaciones mediante CFD [25] y mediciones experimentales previamente reportadas [43]. A continuación se describen ambos datasets.

3.2.1. Simulaciones mediante CFD

Las simulaciones mediante CFD calculan el estado estacionario de un pack de baterías, que tiene una refrigeración por convección forzada mediante aire. Estas simulaciones se realizan por medio del software ANSYS [55], utilizando la misma estructura y variables que el modelo paramétrico, mostradas en la Figura 2.7 y la Tabla 2.1, respectivamente.

Se dispone de simulaciones con cuatro tamaños de estructuras: 25, 53, 74 y 102 celdas, y de 1250 simulaciones para cada tamaño de batería, en donde se varían los parámetros de entrada según los rangos mostrados en la Tabla 2.1.

3.2.1.1. Variables simuladas

Las simulaciones mediante CFD calculan valores de temperatura, velocidad y caída de presión, tal como el modelo paramétrico. En la Figura 3.1 se muestran las distribuciones de las variables de salida para las distintas simulaciones.

En la Figura 3.1.a se puede apreciar que la velocidad del fluido decrece continuamente al pasar a través del pack, lo que se explica por roces que interactúan con el fluido. En la Figura 3.1.b se distingue cómo la caída de presión disminuye a medida que avanzan las columnas del pack. En la Figura 3.1.c y Figura 3.1.d es posible apreciar como la temperatura aumenta a medida que se avanza por el pack de baterías.

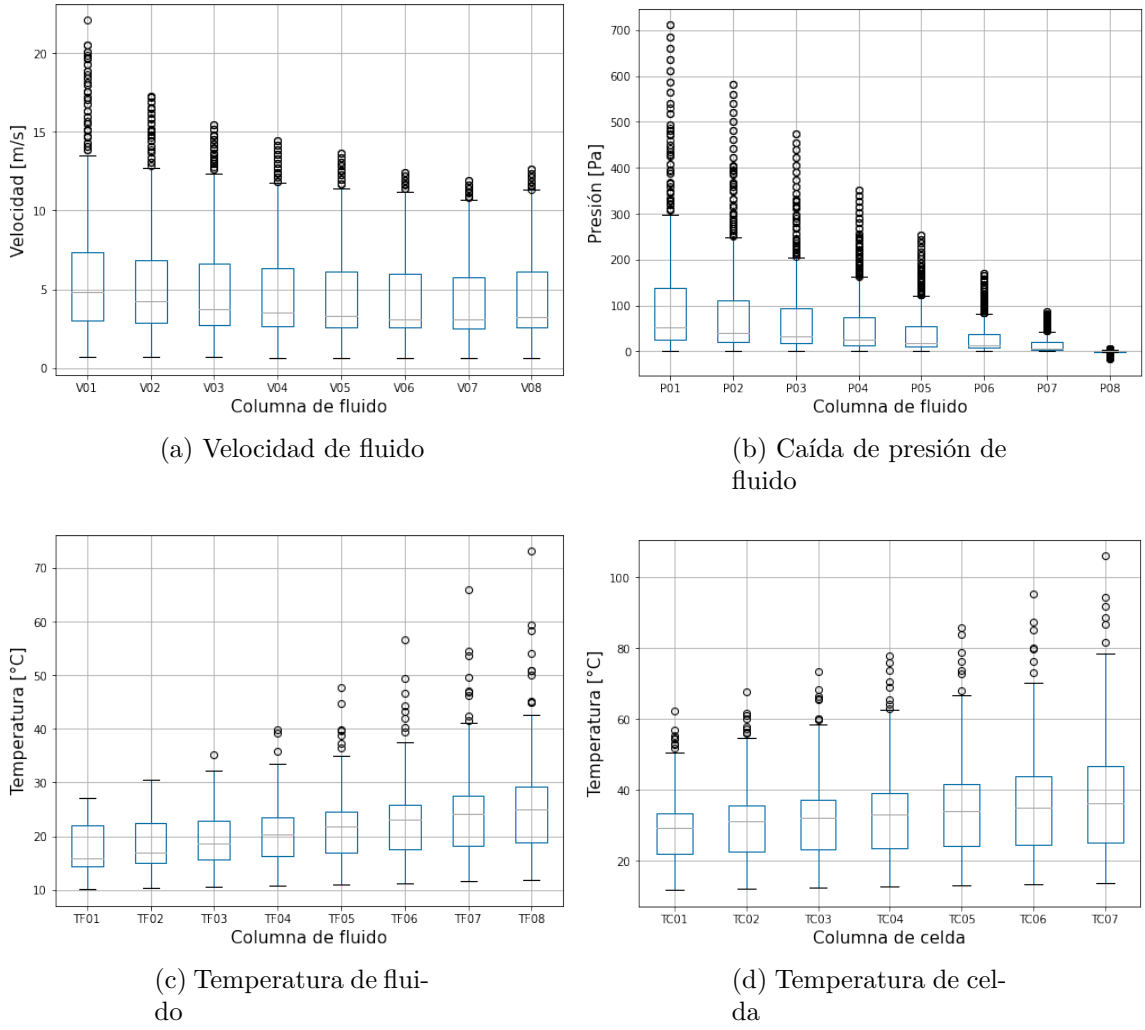


Figura 3.1: Distribución de variables simuladas para un pack de 53 celdas.

3.2.1.2. Procesamiento para estimar los valores de interés

Se desea comparar directamente los valores de las expresiones de interés del modelo paramétrico con las obtenidas mediante CFD. Como no se cuenta con estas expresiones en las simulaciones, se realiza una estimación de estos mediante ingeniería inversa. De esta forma, se obtiene un dataset por separado para cada una de las expresiones de interés; coeficiente de arrastre, factor de fricción y número de Nusselt.

Coeficiente de arrastre

La ecuación 3.1 muestra cómo obtener la fuerza de fricción (F_{Drag}) en base al cálculo de la velocidad explicado en la sección 2.2.3.2.2.

$$F_{Drag,i} = \dot{m} \cdot (V_{f,i} - V_{f,i+1}) + A \cdot (P_{f,i} - P_{f,i+1}) \quad (3.1)$$

Teniendo la fuerza de fricción estimada en base a los resultados de simulaciones por CFD se puede obtener el coeficiente de arrastre (c_d) a partir de la ecuación 3.2, ver detalles en la sección 2.2.1.2.1.

$$c_{d,i} = \frac{F_{Drag,i}}{\frac{1}{2} \cdot \rho \cdot V_{f,i}^2 \cdot A} \quad (3.2)$$

$$c_{d,i} = \frac{\dot{m} \cdot (V_{f,i} - V_{f,i+1}) + A \cdot (P_{f,i} - P_{f,i+1})}{\frac{1}{2} \cdot \rho \cdot V_{f,i}^2 \cdot A} \quad (3.3)$$

Factor de fricción

En la sección 2.2.3.2.1 se muestra cómo el modelo paramétrico calcula la caída de presión de fluido en cada columna. A partir de la ecuación 2.28, se obtiene la ecuación 3.5, con la cual es posible estimar el valor del factor de fricción (f_D) en base a las variables calculadas mediante CFD.

$$f_{D,i} = \frac{2 \cdot \Delta P_{f,i}}{\rho \cdot V_{f,i}^2} \quad (3.4)$$

$$f_{D,i} = \frac{2 \cdot (P_{f,i} - P_{f,i+1})}{\rho \cdot V_{f,i}^2} \quad (3.5)$$

Número de Nusselt

En la sección 2.2.3.2.4 se muestra el cálculo de temperatura de celda efectuado por el modelo paramétrico. En base a la ecuación 2.34 se puede obtener una expresión para el coeficiente de transferencia de calor por convección (h), tal como se muestra en la ecuación 3.6.

Habiendo calculado el coeficiente de transferencia de calor por convección (h) en función de las variables computadas mediante CFD es posible estimar el número de Nusselt (Nu) mediante la ecuación 3.7, la cual relaciona h y Nu .

$$h_i = \frac{\dot{q}}{T_{c,i} - T_{f,i}} \quad (3.6)$$

$$Nu_i = \frac{h_i \cdot L}{k_i} \quad (3.7)$$

$$Nu_i = \frac{Q_{gen}}{T_{c,i} - T_{f,i}} \cdot \frac{D}{k_i \cdot A_{surf}} \quad (3.8)$$

3.2.1.3. Separación de los datos para el ajuste del modelo paramétrico

En la sección 3.2.1.2 se explica como se obtienen estimaciones de las expresiones de interés en base a los datos de CFD. Esta estimación se realiza con los datasets disponibles, es decir, simulaciones para 25, 53, 74 y 102 celdas.

Se dividen los datasets disponibles en conjuntos de entrenamiento, validación y prueba. Los datos de entrenamientos se utilizan para evolucionar el algoritmo evolutivo y de esta forma filtrar los individuos y optimizar las constantes. El conjunto de validación es utilizado para seleccionar el individuo final, a partir de la selección final obtenida mediante el conjunto de entrenamiento. Finalmente, el conjunto de prueba es utilizado para estimar el error de las expresiones con datos externos, es decir, datos no utilizados en este trabajo.

Para el conjunto de entrenamiento se eligen las simulaciones de 25 y 74 celdas, mientras que para el conjunto de validación se escogen las simulaciones con el pack de 102 celdas.

Finalmente, las simulaciones del pack de 53 celdas son utilizadas como conjunto de prueba.

3.2.1.4. Selección de características

Se estudia la posibilidad de incluir variables de entrada del modelo térmico paramétrico en las expresiones buscadas, además de las variables utilizadas habitualmente: número de Reynolds (Re) y número de Prandtl (Pr). Para ello, se realiza un análisis de correlación y se discute la aplicabilidad de las variables.

En base a la correlación calculada y en el debate sobre la aplicabilidad, se decide incluir el factor de separación entre celdas (S) como variable para las expresiones buscadas, además de las variables utilizadas habitualmente.

Correlación en dataset procesado

Se realiza un análisis exploratorio del conjunto de datos preprocesados resultante de la sección 3.2.1.2. En este análisis, se estudia la relación entre las entradas del modelo paramétrico y los valores estimados para el coeficiente de arrastre, el factor de fricción y el número de Nusselt. El método utilizado para ello es el coeficiente de correlación de Pearson, mostrado en la ecuación 3.9, donde Cov es la covarianza y σ es la desviación estándar.

$$\rho_{X,Y} = \frac{Cov(X,Y)}{\sigma_X \cdot \sigma_Y} \quad (3.9)$$

La tabla 3.1 muestra la correlación de Pearson entre las variables de entrada (I, D, S, F , $T_{f,in}$) y las expresiones estimadas obtenidas a partir de los datos CFD. Se puede observar que el factor de separación entre celdas (S) muestra una fuerte correlación con el coeficiente de arrastre y el factor de fricción estimados. A su vez, el flujo de entrada de fluido (F) muestra una fuerte correlación con el número de Nusselt.

Tabla 3.1: Correlación de Pearson entre los parámetros de entrada y las expresiones estimadas a partir de los datos CFD.

	I	D	S	$F_{f,in}$	$T_{f,in}$
Coefficiente de arrastre	-0.188	-0.325	-0.88	-0.412	-0.212
Factor de fricción	-0.184	-0.325	-0.868	-0.412	-0.188
Número de Nusselt	0.084	0.214	0.008	0.951	0.207

Aplicabilidad de las características

Existen otros factores determinantes para la selección de variables, como la aplicabilidad. El factor de separación entre celdas (S) es fácil de aplicar, ya que se trata de un factor estructural del pack y es una cantidad adimensional. Por otro lado, el flujo de entrada de fluido (F) no es fácil de aplicar, ya que depende del caso de uso, además, estas expresiones (coeficiente de arrastre, factor de fricción y número de Nusselt) utilizan el número de Reynolds (Re), que da una información más precisa sobre la dinámica del fluido para cada columna.

3.2.2. Mediciones experimentales

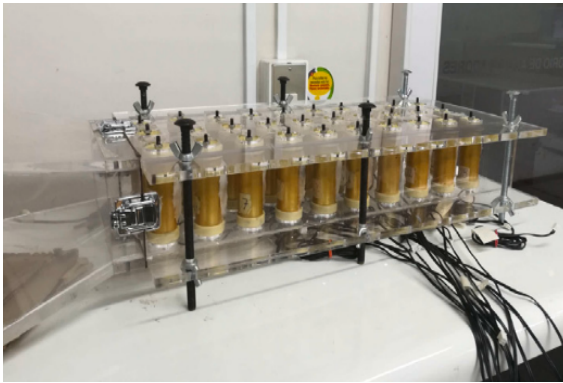
Las mediciones experimentales corresponden a la temperatura medida en el tiempo para cada celda de un pack durante descarga y enfriamiento. Las celdas utilizadas son 26650 $LiCoO_2$, las cuales tienen parámetros que están dentro de los rangos cubiertos por el modelo

propuesto. El experimento se repite cambiando el número de columnas, el flujo de velocidad del aire, y la tasa de descarga, como se muestra en la Tabla 3.2.

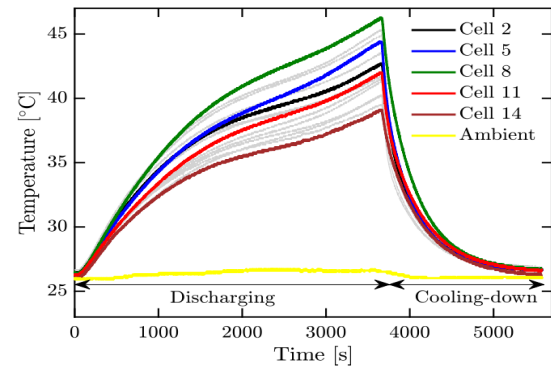
Tabla 3.2: Lista de variables de las mediciones experimentales [43]. $E[a,b,c]$ es un arreglo de c números, entre a y b (incluyendo a ambos).

Tipo	Símbolo	Descripción	Unidades	Valores
Entrada	dr	Tasa de descarga	C-rate	$\{0.25, 0.5, 1\}$
	$V_{f,in}$	Velocidad inicial de fluido	$m.s^{-1}$	$\{2.3, 2.6, 2.9\}$
	n	Número de columnas	-	$E[1, 10, 1]$
Salida	$T_{c,i}(t)$	Temperatura de celda por columna, a través del tiempo	$^{\circ}C$	-

En la Figura 3.2.a se muestra la estructura utilizada para obtener los datos experimentales, la cual tiene columnas alineadas y varía la cantidad de columnas. En la Figura 3.2.b es posible apreciar el proceso de descarga y enfriamiento para celdas en un mismo pack, dependiendo de su ubicación en el pack.



(a) Setup



(b) Mediciones

Figura 3.2: Estructura utilizada y mediciones obtenidas en los experimentos (extraídas de [43]).

3.3. Optimización de modelo térmico paramétrico de baterías de litio mediante algoritmos evolutivos

3.3.1. Formulación del problema y solución propuesta

La optimización del modelo paramétrico se aborda como un problema de regresión simbólica, que consiste en obtener expresiones matemáticas para el coeficiente de arrastre, el factor de fricción y el número de Nusselt, con el fin de minimizar el error del modelo paramétrico en comparación con las simulaciones CFD.

Tal como se vio en la sección 2.2.4, SGE es una variante de GE que garantiza una mejor y más estable evolución del algoritmo y, en consecuencia, mejores resultados. Debido a estas razones, en este trabajo se utiliza SGE para ajustar el modelo paramétrico.

3.3.2. Aplicación y adaptación de SGE al problema propuesto

Se utiliza el código utilizado para la última actualización de SGE [53], a la cual se le realizan ciertas modificaciones, explicadas en la sección 3.3.2.1. Para utilizar SGE en el problema propuesto es necesario adaptar el código de SGE, realizando modificaciones y ajustando hiperparámetros.

3.3.2.1. Modificaciones realizadas

Se realizan modificaciones al algoritmo SGE con el fin de mejorar el rendimiento de este para el problema en cuestión, ajustando cada solución propuesta mediante optimización de contantes y reduciendo la cantidad de soluciones inválidas por medio repetir modificaciones como mutación y recombinación. Por último, se desarrolla un algoritmo para simplificar las expresiones obtenidas mediante *trade-off* entre el desempeño de la expresión y la cantidad de decimales utilizados por ésta en sus constantes.

Optimización de contantes

Para la optimización de constantes se utiliza el algoritmo *Sequential Least Squares Programming* (SLSQP). Si se compara SLSQP con otros métodos utilizados en algoritmos evolutivos, como *Levenberg-Marquardt* (L-M), se puede notar que SLSQP tiene una mayor robustez en cuanto a la variación de expresiones a optimizar y funciones de pérdida [56].

Modificación reiterada

En algoritmos evolutivos, tal como se explica en la sección 2.2.4, para aumentar la variedad se obtienen nuevos individuos mediante mutación y crossover. Como consecuencia de estas modificaciones es posible obtener individuos inválidos, es decir, que su fenotipo evaluado resulte en valores indeterminados o errores. En este trabajo se repiten estas operaciones cuando se tienen individuos inválidos, hasta obtener individuos válidos.

Simplificación de expresiones

Cada estructura final se simplifica en términos de la estructura y sus constantes. La estructura se simplifica mediante *symbolic computing* [57]. Para las constantes, se realiza un *trade-off* entre el número de decimales y el ajuste del modelo a los datos de entrenamiento. Como resultado, se obtiene la expresión más sencilla que se ajusta a los datos de entrenamiento.

3.3.2.2. Parámetros

Para utilizar SGE ciertos parámetros deben ser ajustados, los cuales dependen del problema en cuestión. La tabla 3.3 muestra los principales parámetros de ajuste utilizados para evolucionar SGE, donde los valores de las tasas de recombinación y mutación se obtuvieron mediante *grid search*. Para tener un mejor ajuste de las expresiones, se añade a SGE un algoritmo de optimización de constantes. La función de pérdida utilizada corresponde a *Root Mean Square Error* (RMSE). Se escoge esta métrica por su penalización a grandes errores, su conservación de las mismas unidades y su simple computo [58].

Tabla 3.3: Ajuste de los parámetros utilizados para evolucionar el SGE con el fin de obtener expresiones para optimizar el modelo fenomenológico.

Parámetro	SGE
Población inicial	200
Elitismo	20
Generaciones	200
Tasa de recombinación	0,8
Tasa de mutación	0.1
Selección	Torneo de tamaño 3
Operador de recombinación	Uniform Crossover
Operador de mutación	Integer Flip Mutation
Optimización de constantes ^a	SLSQP [59]

^a Modificación al modelo.

3.3.2.3. Individuos

Al trabajar con SGE, se utilizan individuos con genotipo y fenotipo. Para tratar de mejor forma con las constantes se distingue entre el fenotipo base (*original_phenotype*) y el fenotipo (*phenotype*), siendo el primero la estructura y el último la estructura con valores en las constantes. Las constantes pueden ser añadidas de forma aleatoria y mediante métodos de optimización, lo cual es indicado en el valor booleano *optimized*. La función de fitness, correspondiente a la evaluación del individuo, es calculada para los datos de CFD para entrenamiento y validación (*fitness* y *fitness_val*).

```

1 {
2   "genotype": [[0], [0], [0, 4], [2, 3, 1, 3], [0, 2, 3, 0, 2, 2]],
3   "original_phenotype": "x[0]+Constant*x[2]",
4   "phenotype": "x[0]+2.34743*x[2]",
5   "fitness": 0.0214,
6   "fitness_val": 0.0423,
7   "optimized": TRUE
8 }
```

3.3.2.4. Gramáticas

Tal como se mencionó en la sección 2.2.4.3, tanto en GE como en sus variaciones, la gramática permite incluir conocimiento a priori en la solución deseada. Estos conocimientos incluyen las variables, funciones y operaciones deseadas. Además, es posible incluir estructuras deseadas, tanto al comienzo del algoritmo, asegurando que se cumplan, como en el resto de la gramática, dándoles oportunidad de utilizarse.

Para cada uno de los valores de interés existen expresiones de uso común en la literatura. Estas expresiones se tienen en cuenta para el diseño de la gramática, tanto en la estructura como en las variables utilizadas. Además, como resultado del análisis mostrado en la sección 3.2.1.4, se decide incluir el factor de separación (S) como una variable en cada una de las gramáticas.

Coefficiente de arrastre

Tal como se mencionó en la sección 2.2.1.1.3, experimentalmente se ha relacionado a este coeficiente con el número de Reynolds (Re). La gramática utilizada para obtener la expresión del coeficiente de arrastre es la siguiente:

```
1 <start> ::= <expr>
2 <expr> ::= (<expr><op><expr>) | (<expr>**Constant) | <value>
3 <op> ::= +|-|*|/
4 <value> ::= <variable> | Constant
5 <variable> ::= Re | S
```

Factor de fricción

Como se establece en la sección 2.2.1.1.4, al igual que el coeficiente de arrastre, el factor de fricción se ha relacionado con el número de Reynolds (Re). La gramática utilizada para obtener la expresión del factor de fricción es la siguiente:

```
1 <start> ::= <expr>
2 <expr> ::= (<expr><op><expr>) | (<expr>**Constant) | <value>
3 <op> ::= +|-|*|/
4 <value> ::= <variable> | Constant
5 <variable> ::= Re | S
```

Número de Nusselt

De acuerdo a lo descrito en la sección 2.2.1.1.5, el número de Nusselt se relaciona con el número de Reynolds (Re) y el número de Prandtl (Pr). Se decide que la expresión utilizada debe tener tanto el número de Reynolds como el número de Prandtl elevados a constantes, tal como la expresión mostrada en la ecuación 4.3. La gramática utilizada para obtener la expresión del número de Nusselt es la siguiente:

```
1 <start> ::= <expr> * (Re**Constant) * (Pr)
2 <expr> ::= (<expr><op><expr>) | (<expr>**Constant) | <value>
3 <op> ::= +|-|*|/
4 <value> ::= <variable> | Constant
5 <variable> ::= Re | Pr | S
```

3.4. Evaluación de modelo paramétrico

Se desea que las expresiones encontradas tengan un bajo error con respecto a los resultados de simulaciones disponibles, que sean simples y que tengan un sentido físico. A continuación se describe la evaluación de las expresiones y del modelo ajustado por éstas.

3.4.1. Ajuste de las expresiones obtenidas con respecto a CFD

Se desea que las expresiones obtenidas minimicen el error con respecto a la estimación de las soluciones simuladas mediante CFD mostrada en la sección 3.2.1.2. Con el fin de medir el ajuste de las expresiones obtenidas, se utiliza el error medio absoluto (MAE) y el error medio porcentual absoluto (MAPE), mostrados en las ecuaciones 3.10 y 3.11, respectivamente.

$$MAE = \frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^N |x_i - \hat{x}_i| \quad (3.10)$$

$$MAPE = \frac{100\%}{N} \cdot \sum_{i=1}^N \left| \frac{x_i - \hat{x}_i}{x} \right| \quad (3.11)$$

También, a modo de robustecer el análisis, se compara de forma visual el ajuste de las expresiones con respecto a la estimación de éstas a partir de los resultados de simulaciones por CFD.

3.4.2. Ajuste del modelo con respecto a CFD

Utilizando las expresiones obtenidas por SGE se evalúa el desempeño global del modelo paramétrico, comparando sus variables de salida con las variables de salida obtenidas por simulaciones mediante CFD. Se obtienen errores promedios para cada una de las variables; velocidad de fluido, caída de presión de fluido, temperatura de fluido y temperatura de celda. En este trabajo la salida principal corresponde a la temperatura de celda, y se desea que este valor en específico sea mínimo.

3.4.3. Sentido físico del modelo ajustado

Con el fin de evaluar el sentido físico del modelo resultante, se comparan las temperaturas de celda estimadas por el modelo propuesto y por CFD. Para esto, se realizan múltiples simulaciones variando solo una de las entradas del modelo. De esta forma, se comparan las curvas resultantes, las cuales muestran parte del comportamiento físico del modelo. Ejemplo de estos son las Figuras 3.3 y 3.4, donde se grafica la temperatura versus la corriente y el factor de separación, respectivamente. Estos gráficos corresponden a las curvas obtenidas de las simulaciones de CFD, con las cuales se comparará el modelo propuesto.

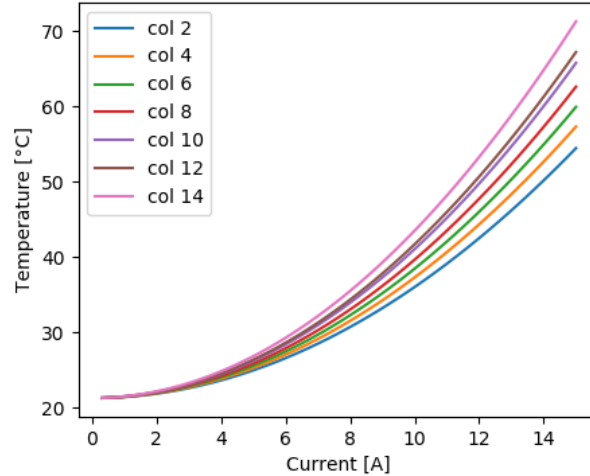


Figura 3.3: Temperatura de celda en función de la corriente, calculado mediante CFD para un pack de 53 celdas ($S=1.2$, $F= 50.75$ [CFM], $T_{in}=21.25$ [°C], $D=25.5$ [mm]).

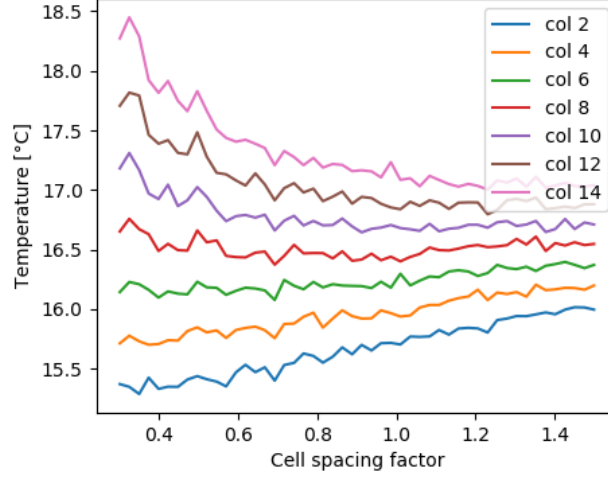


Figura 3.4: Temperatura de celda en función del factor de separación, calculado mediante CFD para un pack de 53 celdas ($I=3.75$ [A], $F= 50.75$ [CFM], $T_{in}=13.75$ [°C], $D=20.5$ [mm]).

3.5. Extensión del modelo paramétrico y su evaluación

Tal como se describe en secciones anteriores, el modelo paramétrico propuesto en esta tesis tiene la capacidad de calcular el estado estacionario para un pack de baterías dadas ciertas condiciones.

En esta sección se muestra una extensión del modelo para estimar el comportamiento dinámico de la temperatura de celda en condiciones de enfriamiento por convección forzada.

3.5.1. Inclusión de dinámica para la temperatura

Para calcular la dinámica de la temperatura de celda (T_c) se utiliza la ecuación 2.27 explicada en la sección 2.2.2.3, la cual estima la variación de temperatura en base a la generación de energía de la celda y la temperatura ambiente. Adaptando dicha fórmula al caso de uso, donde la temperatura del fluido corresponde a la temperatura ambiente, se obtiene la ecuación 3.12.

$$\frac{dT_c}{dt} = \frac{T_{amb} - T_c}{C_p \cdot (R_{in} + R_{out})} + \frac{Q_{gen} \cdot R_{out}}{C_p \cdot (R_{in} + R_{out})} \quad (3.12)$$

La resistencia térmica en el exterior de la celda (R_{out}) puede estimarse utilizando el coeficiente de transferencia de calor (h) y la superficie de la celda (A_s), tal como se puede ver en la ecuación 3.13.

$$R_{out} = \frac{1}{h \cdot A_s} \quad (3.13)$$

Y el coeficiente de transferencia de calor (h) se estima utilizando el número de Nusselt obtenido a partir del modelo térmico paramétrico, como se muestra en la ecuación 2.33. Por otro lado, R_{in} y C_p no son ajustados en esta investigación, sino que se utilizan valores constantes calculados para convección natural, mostrados en la Tabla 3.4.

Tabla 3.4: Resistencias térmicas y calor específico de baterías de litio para convección natural [60].

$R_{in} (KW^{-1})$	$C_p (JK^{-1})$
1.8 ± 0.4	105 ± 3.8

3.5.2. Adaptación de resultados para otras estructuras

La estructura utilizada por el modelo paramétrico es distinta a la estructura con la que se obtuvieron las mediciones experimentales, por lo tanto, es necesario adaptar la estructura para que éstas coincidan. En la Figura 3.5.a se puede ver la estructura utilizada por el modelo paramétrico, en la cual es posible apreciar las zonas en donde la temperatura de celda es calculada. En la Figura 3.5.b se puede ver la estructura utilizada en [43] para realizar las mediciones experimentales. En estos experimentos se mide la temperatura para cada celda.

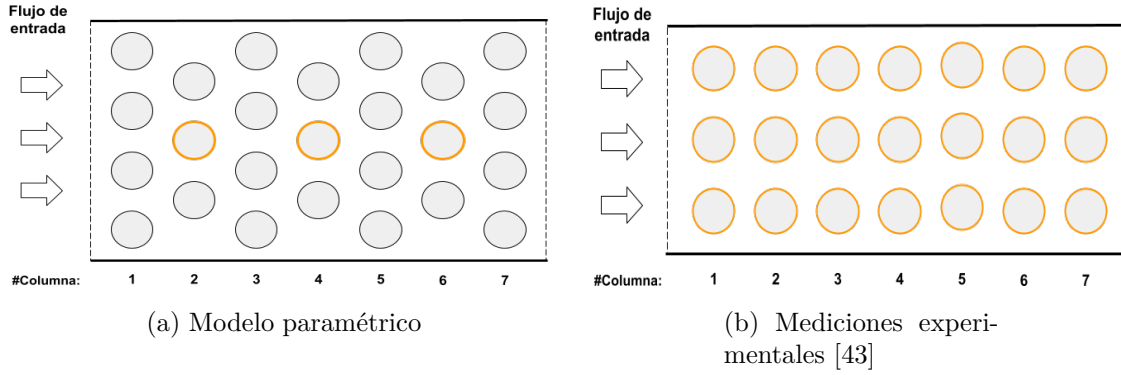


Figura 3.5: Estructuras utilizadas en este trabajo, el color naranja corresponde a celdas donde se calcula la temperatura.

Se desea que el modelo paramétrico obtenga temperatura de celda para todas las columnas. Para esto, se obtienen los valores faltantes mediante interpolación y extrapolación, dependiendo si la columna faltante es interna o está en un borde, respectivamente. Por otro lado, los datos experimentales se reducen a un valor por columna, correspondiente al promedio de las temperaturas.

De esta forma, tanto para el modelo paramétrico como para los datos experimentales se tiene un valor de temperatura de celda para cada columna.

Capítulo 4

Resultados y análisis

4.1. Expresiones obtenidas

En la siguiente sección se muestran las expresiones obtenidas para el coeficiente de arrastre, factor de fricción y número de Nusselt, las cuales ajustan el modelo térmico paramétrico. Para cada una de estas expresiones se analiza su ajuste con respecto a resultados de simulaciones mediante CFD. Este análisis viene dado por cálculo de errores y visualización de datos. Para las métricas calculadas se utiliza el conjunto de test, el cual corresponde a 1250 simulaciones para un pack de 53 celdas.

4.1.1. Coeficiente de arrastre

En la ecuación 4.1 se muestra la expresión obtenida por SGE para calcular el coeficiente de arrastre (c_d), la cual depende tanto del factor de separación (S) como del número de Reynolds (Re). Esta expresión obtiene un MAPE de $3.73 \pm 3.27 \%$ con respecto a los valores estimados a partir de simulaciones en CFD.

$$c_d = S^{-0.6} + 5 \cdot Re^{-0.23} \quad (4.1)$$

La expresión obtenida para el coeficiente de arrastre tiene una estructura de acuerdo a lo esperado. El número de Reynolds es utilizado de similar forma a las ecuaciones utilizadas en la literatura, mostradas en la sección 2.2.1.1.3. Por otro lado, el uso del factor de separación se condice con la correlación estudiada en la sección 3.2.1.4. Adicionalmente, cabe destacar la simplicidad de la expresión resultante, la cual pese a esto obtiene un bajo error.

En la Figura 4.1 se comparan visualmente los resultados obtenidos a partir de CFD con las curvas resultantes de aplicar la expresión obtenida en el mismo dominio. Es posible apreciar como las curvas obtenidas a partir de la expresión encontrada se ajustan a los resultados de simulaciones. Este ajuste ocurre tanto para el número de Reynolds como para el factor de separación.

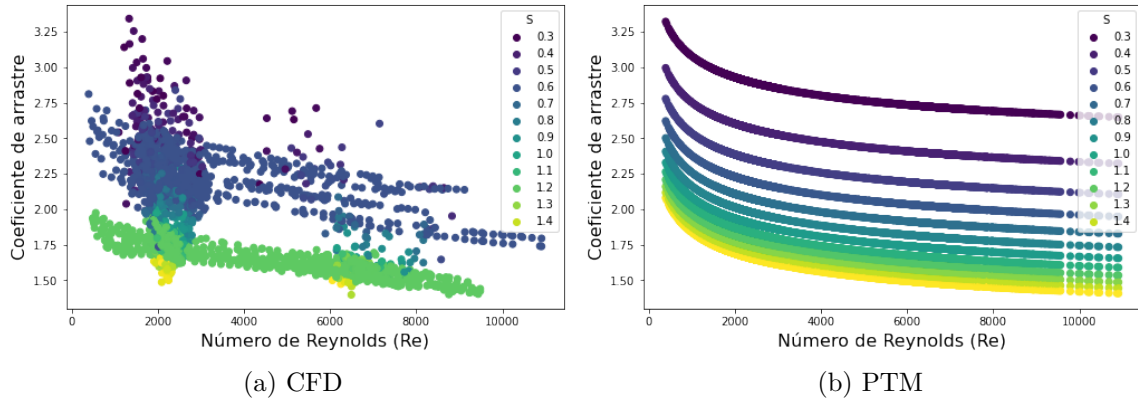


Figura 4.1: Visualización del coeficiente de arrastre en función del número de Reynolds y el factor de separación. a) Valores estimados en base a las simulaciones de CFD. b) Curvas resultantes al evaluar la expresión obtenida.

4.1.2. Factor de fricción

En la ecuación 4.2 se muestra la expresión obtenida por SGE para calcular el factor de fricción (f_D). La expresión resultante depende tanto del factor de separación (S) como del número de Reynolds (Re). Esta expresión obtiene un MAPE de $11.39 \pm 9.29\%$ con respecto a los valores estimados a partir de simulaciones en CFD.

$$f_D = 20 \cdot S^{-1.1} \cdot Re^{-0.22} \quad (4.2)$$

Para la expresión obtenida, el número de Reynolds (Re) es utilizado de forma similar a las expresiones de la literatura, mostradas en la sección 2.2.1.1.4. Por su parte, el uso del factor de separación se condice con la correlación estudiada en la sección 3.2.1.4.

En la Figura 4.2 se comparan visualmente los valores obtenidos a partir de CFD con las curvas resultantes de aplicar la expresión obtenida en el mismo dominio. En esta figura es posible apreciar como las curvas obtenidas a partir de la expresión encontrada para el factor de fricción se ajustan a los resultados de simulaciones. Este ajuste ocurre tanto para el número de Reynolds como para el factor de separación. No obstante, existen regiones donde el error es mayor.

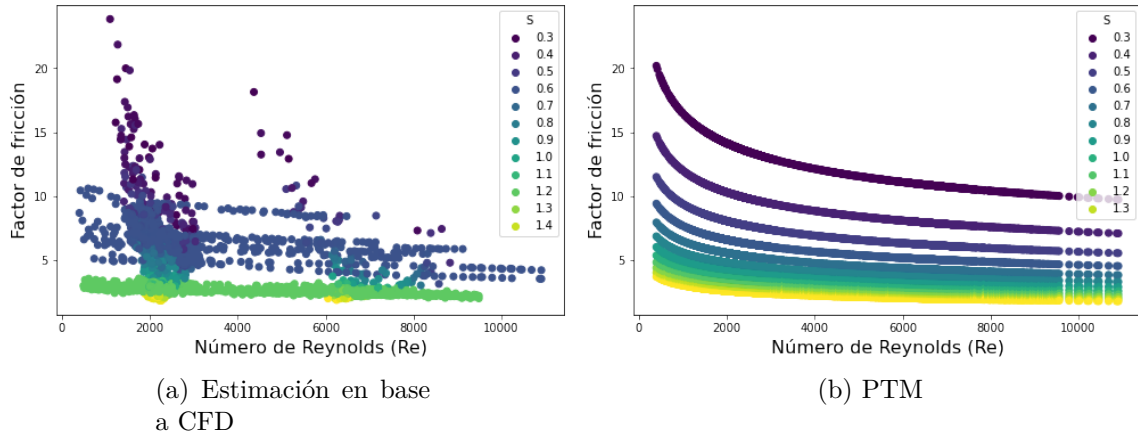


Figura 4.2: Visualización del factor de separación en función del número de Reynolds y el factor de separación. a) Valores estimados en base a las simulaciones de CFD. b) Curvas resultantes al evaluar la expresión obtenida.

En la Figura 4.3 se muestra la zona de mayor variación de los resultados de simulaciones mediante CFD. Esta zona se caracteriza por tener bajos valores de factor de separación y bajos valores del número de Reynolds, y pese a tener valores similares de estas dos variables, el coeficiente tiene una gran variación en su valor. Es posible que la variación en esta zona puede ser explicada de mejor manera por alguna otra variable, la cual no se encuentra dentro de los alcances del trabajo.

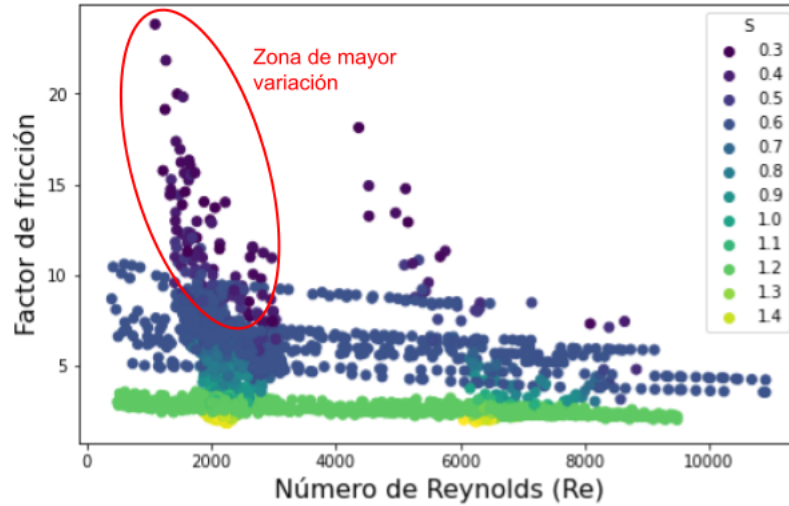


Figura 4.3: Visualización del factor de separación en función del número de Reynolds y el factor de separación. El círculo rojo indica la zona de mayor variación.

4.1.3. Número de Nusselt

En la ecuación 4.3 se muestra la expresión obtenida por SGE para calcular el número de Nusselt (Nu). La expresión resultante depende tanto del número de Reynolds (Re), el número de Prandtl (Pr) y el factor de separación de celda (S). Esta expresión obtiene un MAPE de $2.29 \pm 2.25\%$ con respecto a los valores estimados a partir de simulaciones en CFD.

$$Nu = 0.5 \cdot S^{-0.2} \cdot Re^{0.64} \cdot Pr \quad (4.3)$$

La expresión obtenida tiene la forma esperada de acuerdo a la literatura, tal como se explica en la sección 2.2.1.1.5. Además, dicha expresión cumple con la simplicidad y el desempeño deseados.

En la Figura 4.4 se comparan visualmente los valores obtenidos a partir de CFD con las curvas resultantes de aplicar la expresión obtenida en el mismo dominio. Es posible apreciar como las curvas obtenidas a partir de la expresión encontrada para el número de Nusselt se ajusta a los resultados de simulaciones. Este ajuste ocurre tanto para el número de Reynolds como para el factor de separación.

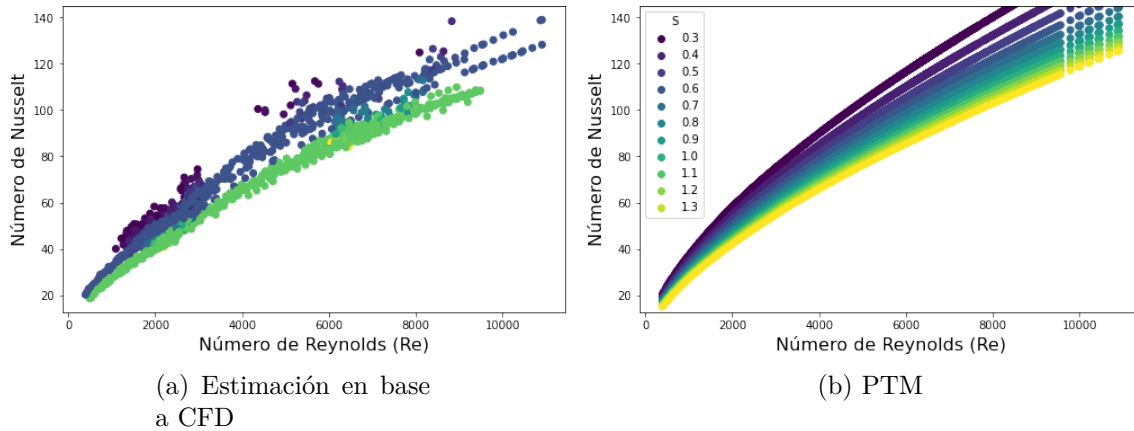


Figura 4.4: Visualización del número de Nusselt en función del número de Reynolds y el factor de separación. a) Valores estimados en base a las simulaciones de CFD. b) Curvas resultantes al evaluar la expresión obtenida.

No se incluye el valor del número de Prandtl en la visualización debido a que su valor no varía significativamente en las simulaciones ($Pr = 0.69$). Normalmente, el valor de este número depende del problema, el cual no cambia en este trabajo.

4.1.4. Error de las expresiones

En la Tabla 4.1 se resume el error de las expresiones obtenidas mediante SGE en comparación con la estimación de sus valores para simulaciones CFD. Para su evaluación se utiliza el error absoluto medio (MAE) y el error absoluto medio porcentual (MAPE).

Tabla 4.1: Desempeño de las expresiones encontradas en comparación con la estimación de sus valores para simulaciones es CFD.

Expresión	MAE	MAPE (%)
Coficiente de arrastre	0.08 ± 0.08	3.73 ± 3.27
Factor de fricción	0.52 ± 0.67	11.39 ± 9.29
Número de Nusselt	1.77 ± 1.68	2.29 ± 2.25

Las expresiones obtenidas se ajustan a los resultados de las simulaciones mediante CFD, no obstante, se puede notar que el error de factor de fricción es considerable, en especial

el MAPE. La magnitud de este error se debe en parte a cierta zona de mayor variación, mostrada en la Figura 4.3.

4.2. Modelo térmico paramétrico

4.2.1. Ajuste general

Se evalúa el desempeño del modelo paramétrico con respecto a las simulaciones del pack de 53 celdas, el cual corresponde al conjunto de prueba. Para esto se utilizan dos métricas, el error absoluto medio (MAE) y el error absoluto medio porcentual (MAPE). En la Tabla 4.2 se muestran las métricas globales del modelo paramétrico en comparación con el conjunto de prueba.

Tabla 4.2: Métricas globales del modelo paramétrico.

Variable	Símbolo	Unidades	MAE	MAPE (%)
Velocidad de fluido	V_f	ms^{-1}	0.37	11.03
Caída de presión de fluido	P_f	Pa	8.34	116.55
Temperatura de fluido	T_f	$^{\circ}C$	0.47	2.09
Temperatura de celda	T_c	$^{\circ}C$	0.86	2.39

Los errores mostrados en la tabla son relativamente bajos, de acuerdo a lo esperado. Además, se destaca el hecho de obtener un buen ajuste global pese a la alta variación presentada en los parámetros de las simulaciones, mostrados en la Tabla 2.1.

Para la presión de fluido se tiene un error considerable, especialmente en el MAPE. Gracias a la distribución de la caída de presión de fluido, mostrada en la Figura 3.1.b, es posible analizar mejor este caso. En el conjunto de test, correspondiente a 1250 simulaciones para un pack de 53 celdas, los valores de esta variable se encuentran en promedio por los 40 [Pa] y los errores de estos son del orden de 8 [Pa]. El MAPE, cuyo valor es 116 [%], es más grande de lo esperado, lo cual se explica por la condición de borde. En la última columna, se tiene una condición de borde de 0 [Pa], y el cálculo del error porcentual en dicha columna es de tal magnitud que impacta en el error global porcentual. Sin tomar en cuenta la última columna, se obtiene un MAPE de 39 [%], el cual es considerable, pero más representativo del rendimiento del modelo de acuerdo a la caída de presión de fluido. Por último, cabe destacar que se calcula la caída de presión, utilizando una presión de referencia de 0 [Pa], mientras que la presión atmosférica tiene un valor de 101325 [Pa]. Si se toma esta presión en cuenta, el error obtenido es despreciable.

4.2.2. Ajuste por columna

En la Figura 4.5 se muestra el MAE por columna de las variables estimadas por el modelo propuesto con respecto a los datos de CFD. En estos gráficos es posible apreciar el efecto de las condiciones de borde en la distribución de los errores. Las columnas más cercanas a las condiciones de borde obtienen valores de MAE menores. Por ejemplo, en la Figura 4.5.a el error de la velocidad es menor en las primeras columnas del pack, que es donde la velocidad es más cercana a la velocidad inicial de fluido ($V_{f,in}$). La temperatura no celda, mostrada en la Figura 4.5.d, no tiene una condición de borde, aun así, su error se ve influenciado por

las propiedades del fluido. Además, para obtener la temperatura de celda, el modelo realiza un cálculo secuencial, desde la primera a la última columna. De esta forma, el error de una columna influencia el cálculo en la siguiente.

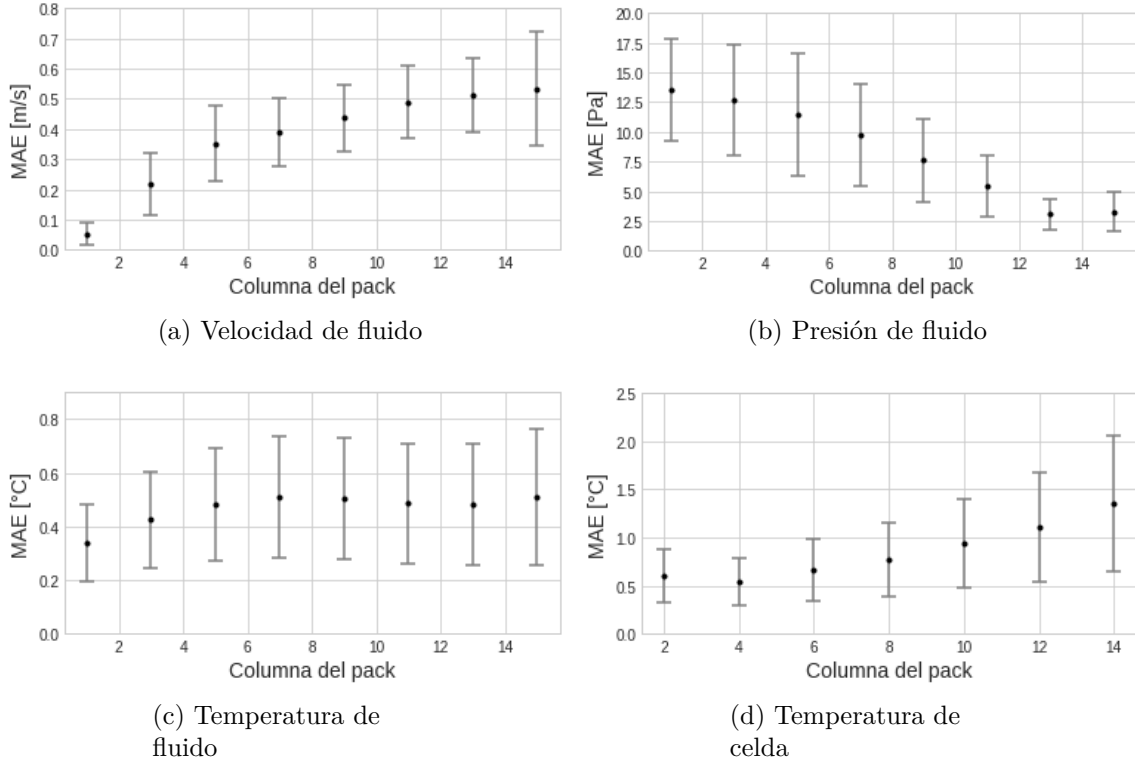


Figura 4.5: Error absoluto medio (MAE) en cálculo de variables del modelo para cada columna del pack.

En la Figura 4.6 se muestra el MAPE por columna para la temperatura de celda. Es posible apreciar que la distribución del error, pese a la amplia variación de los parámetros de las simulaciones, se mantiene en un margen acotado. Al igual que como ocurre con el MAE de la temperatura de celda, este error también aumenta a medida que aumenta el número de la columna.

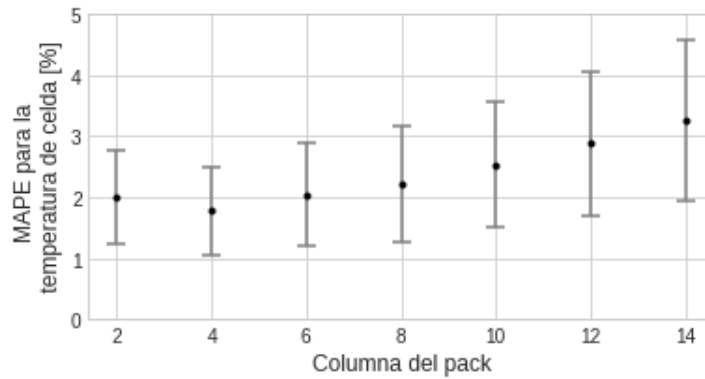


Figura 4.6: Error porcentual absoluto medio (MAPE) en cálculo de temperatura de celda por columna.

4.2.3. Sentido físico

Con el fin de evaluar el sentido físico del modelo térmico paramétrico ajustado, se comparan curvas físicas entre el modelo y los resultados de simulaciones mediante CFD. Se realizan múltiples simulaciones, variando solo una de las entradas del modelo y obteniendo las temperaturas de celda en estado estacionario para cada variación. De esta forma, se comparan las curvas resultantes, las cuales muestran parte del comportamiento físico del modelo.

A modo de ejemplo, en las Figuras 4.7 y 4.8 se varía solo un parámetro, la corriente (I) y el factor de separación (S), respectivamente. De esta forma se puede apreciar mejor el efecto de estos parámetros en la estimación del estado estacionario de la temperatura de celda. En la Figura 4.7 el modelo se comporta de manera similar a los resultados de simulaciones mediante CFD, independientemente de la variación de los parámetros y del número de columnas. Por otro lado, en la Figura 4.8, el modelo se comporta como una versión simplificada de los resultados mediante CFD, teniendo curvas más suaves.

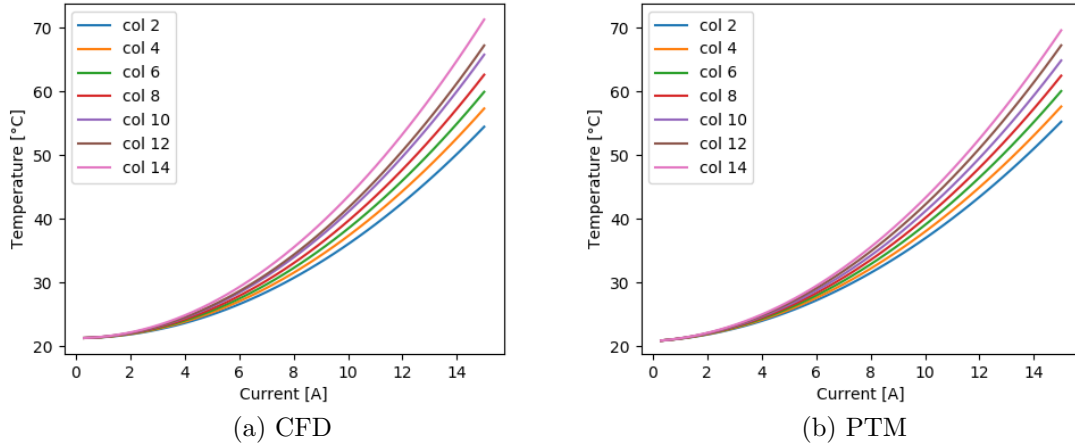


Figura 4.7: Temperatura de celda en función de la corriente, calculado mediante CFD para un pack de 53 celdas ($S=1.2$, $F= 50.75$ [CFM], $T_{in}=21.25$ [°C], $D=25.5$ [mm]).

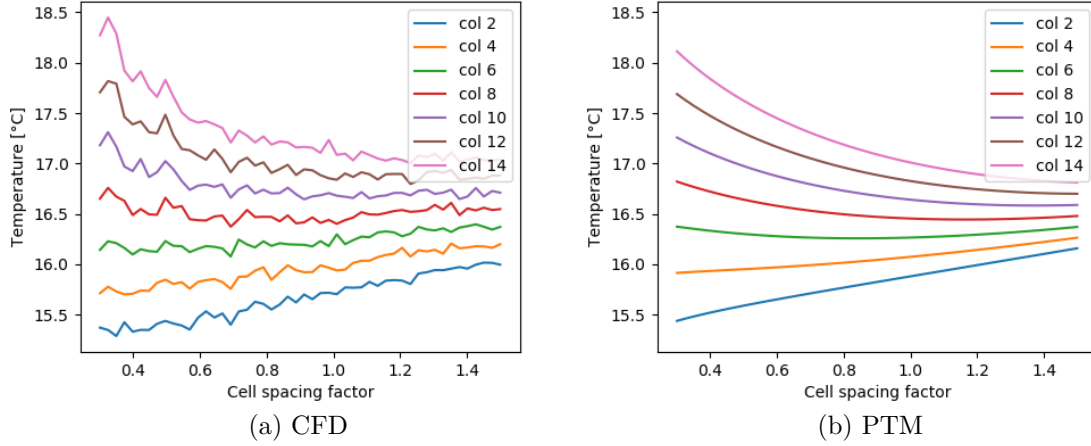


Figura 4.8: Temperatura de celda en función del factor de separación, calculado mediante CFD para un pack de 53 celdas ($I=3.75$ [A], $F= 50.75$ [CFM], $T_{in}=13.75$ [°C], $D=20.5$ [mm]).

4.3. Extensión del modelo térmico paramétrico

La extensión del modelo propuesto para el balance térmico dinámico, explicada en la sección 3.5, se valida con mediciones experimentales. El error se calcula para el proceso de enfriamiento, variando el tamaño del pack y la tasa de descarga de las celdas. El MAPE obtenido es de $1,26 \pm 0,74\%$ con respecto a las mediciones experimentales.

En la Figura 4.9 se muestra una comparación del enfriamiento entre las medidas experimentales y el modelo propuesto, en el que la condición inicial es la misma para ambos. Se puede observar que las curvas se comportan de forma similar, a pesar de que las mediciones experimentales no fueron utilizadas para ajustar el modelo.

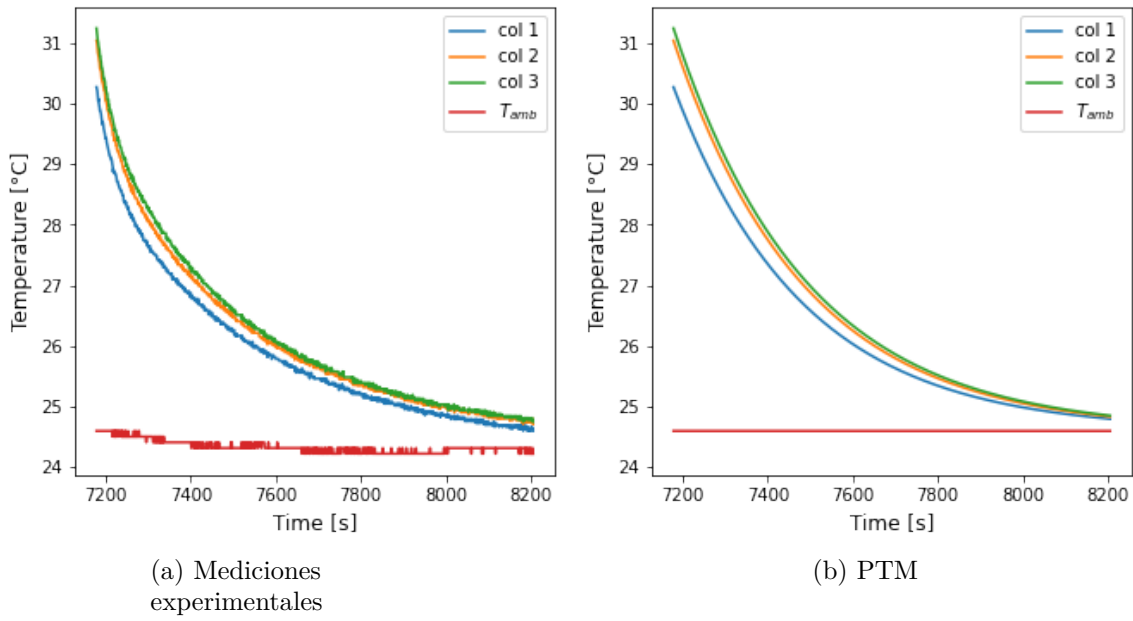


Figura 4.9: Comparación entre las mediciones experimentales y el modelo propuesto en relación con el proceso de enfriamiento de un módulo de batería de tres columnas.

La tabla 4.3 muestra el error del modelo propuesto, comparado con las mediciones experimentales, para baterías de tres a diez columnas. El error utilizado es MAPE, que varía en función de la tasa de descarga y el flujo de velocidad del aire de cada experimento. El MAPE máximo es de 1.93 %, lo que muestra un buen ajuste entre las curvas, independientemente del tamaño del pack.

Tabla 4.3: MAPE de la extensión del modelo propuesto comparado con las mediciones experimentales, para packs de baterías de tres a diez columnas.

Número de columnas	MAPE (%)
3	1.07 ± 0.24
4	1.42 ± 0.96
5	1.05 ± 0.69
6	1.03 ± 0.56
7	1.3 ± 0.93
8	1.15 ± 0.46
9	1.93 ± 0.82
10	1.08 ± 0.41

Capítulo 5

Conclusión

En este trabajo se logró ajustar un modelo paramétrico de pack de baterías de litio mediante el uso de *Structured Grammatical Evolution (SGE)*, usando simulaciones CFD como ground truth. Este ajuste se realiza encontrando expresiones matemáticas para el coeficiente de arrastre, el factor de fricción y el número de Nusselt, que resultan ser sencillas y aplicables en la práctica para la simulación de baterías para problemas similares. Tanto el modelo como las expresiones obtenidas pueden ser útiles para la simulación del comportamiento térmico de packs de baterías de iones de litio.

Para una mejora en la obtención de expresiones, se propone estudiar las zonas de mayor variación, las cuales ocurren con valores bajos de factor de separación. En particular, se muestra un ejemplo de esto para el factor de fricción en la Figura 4.3.

Para mejorar aún más el modelo térmico paramétrico podría ser útil ampliar el rango de operación de los parámetros de entrada mostrados en la Tabla 2.1, y de esta forma obtener un ajuste más robusto. Para la extensión del modelo dependiente del tiempo, podría ser útil obtener una expresión para la resistencia térmica interna, que ajuste el modelo en función del uso.

El algoritmo evolutivo utilizado para el ajuste del modelo térmico paramétrico puede, en un principio, ser empleado para mejorar otros modelos físicos mediante el ajuste de expresiones matemáticas.

Bibliografía

- [1] Blomgren, G., “The development and future of lithium ion batteries,” *Journal of The Electrochemical Society*, vol. 164, pp. A5019–A5025, 2017, [doi:10.1149/2.0251701jes](https://doi.org/10.1149/2.0251701jes).
- [2] Zubi, G., Dufo-López, R., Carvalho, M., y Pasaoglu, G., “The lithium-ion battery: State of the art and future perspectives,” *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 89, pp. 292–308, 2018, [doi:https://doi.org/10.1016/j.rser.2018.03.002](https://doi.org/10.1016/j.rser.2018.03.002).
- [3] Berrueta, A., San Martín, I., Sanchis, P., y Ursúa, A., “Chapter 6 - lithium-ion batteries as distributed energy storage systems for microgrids,” en *Distributed Energy Resources in Microgrids* (Chauhan, R. K. y Chauhan, K., eds.), pp. 143–183, Academic Press, 2019, [doi:https://doi.org/10.1016/B978-0-12-817774-7.00006-5](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-817774-7.00006-5).
- [4] Wu, B., Han, S., Shin, K. G., y Lu, W., “Application of artificial neural networks in design of lithium-ion batteries,” *Journal of Power Sources*, vol. 395, pp. 128–136, 2018, [doi:https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2018.05.040](https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2018.05.040).
- [5] Pesaran, A. A., “Battery thermal models for hybrid vehicle simulations,” *Journal of Power Sources*, vol. 110, no. 2, pp. 377–382, 2002, [doi:https://doi.org/10.1016/S0378-7753\(02\)00200-8](https://doi.org/10.1016/S0378-7753(02)00200-8).
- [6] Tourani, A., White, P., y Ivey, P., “Analysis of electric and thermal behaviour of lithium-ion cells in realistic driving cycles,” *Journal of Power Sources*, vol. 268, pp. 301–314, 2014, [doi:https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2014.06.010](https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2014.06.010).
- [7] Lin, J., Liu, X., Li, S., Zhang, C., y Yang, S., “A review on recent progress, challenges and perspective of battery thermal management system,” *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 167, p. 120834, 2021, [doi:https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.120834](https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.120834).
- [8] Chen, Y., Kang, Y., Zhao, Y., Wang, L., Liu, J., Li, Y., Liang, Z., He, X., Li, X., Tavajohi, N., y Li, B., “A review of lithium-ion battery safety concerns: The issues, strategies, and testing standards,” *Journal of Energy Chemistry*, vol. 59, pp. 83–99, 2021, [doi:https://doi.org/10.1016/j.jechem.2020.10.017](https://doi.org/10.1016/j.jechem.2020.10.017).
- [9] Chen, K., Chen, Y., Li, Z., Yuan, F., y Wang, S., “Design of the cell spacings of battery pack in parallel air-cooled battery thermal management system,” *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 127, pp. 393–401, 2018, [doi:https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.06.131](https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.06.131).
- [10] Fan, L., Khodadadi, J., y Pesaran, A., “A parametric study on thermal management of an air-cooled lithium-ion battery module for plug-in hybrid electric vehicles,” *Journal of Power Sources*, vol. 238, pp. 301–312, 2013, [doi:https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2013.03.050](https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2013.03.050).

- [11] Karatas, O. B. y Sokmen, K. F., “Thermal optimization of intercellular distance in lithium-ion batteries and numerical analysis of the original honeycomb metal integrated battery pack,” *Journal of Energy Storage*, vol. 55, p. 105705, 2022, doi:<https://doi.org/10.1016/j.est.2022.105705>.
- [12] Cui, X., Panda, B., Chin, C., Sakundarini, N., Wang, C.-T., y Pareek, K., “An application of evolutionary computation algorithm in multidisciplinary design optimization of battery packs for electric vehicle,” *Energy Storage*, vol. 2, 2020, doi:[10.1002/est2.158](https://doi.org/10.1002/est2.158).
- [13] Severino, B., Gana, F., Palma-Behnke, R., Estévez, P. A., Calderón-Muñoz, W. R., Orchard, M. E., Reyes, J., y Cortés, M., “Multi-objective optimal design of lithium-ion battery packs based on evolutionary algorithms,” *Journal of Power Sources*, vol. 267, pp. 288–299, 2014, doi:<https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2014.05.088>.
- [14] Zhao, X., Xuan, D., Zhao, K., y Li, Z., “Elman neural network using ant colony optimization algorithm for estimating of state of charge of lithium-ion battery,” *Journal of Energy Storage*, vol. 32, p. 101789, 2020, doi:<https://doi.org/10.1016/j.est.2020.101789>.
- [15] Tamilselvi, S., Selvaraj, G., Natarajan, K., Kaladgi, A. R., Saranathan, M., Nagarajan, V., Sathish, T., Shamim, M. Z., Saleel C, A., y Afzal, A., “A review on battery modelling techniques,” *Sustainability*, vol. 13, p. 10042, 2021, doi:[10.3390/su131810042](https://doi.org/10.3390/su131810042).
- [16] Qin, P., Sun, J., Yang, X., y Wang, Q., “Battery thermal management system based on the forced-air convection: A review,” *eTransportation*, vol. 7, p. 100097, 2021, doi:<https://doi.org/10.1016/j.etrans.2020.100097>.
- [17] Cui, X., Zeng, J., Zhang, H., Yang, J., Qiao, J., Li, J., y Li, W., “Optimization of the lumped parameter thermal model for hard-cased li-ion batteries,” *Journal of Energy Storage*, vol. 32, p. 101758, 2020, doi:<https://doi.org/10.1016/j.est.2020.101758>.
- [18] Lin, X., Perez, H. E., Mohan, S., Siegel, J. B., Stefanopoulou, A. G., Ding, Y., y Castanier, M. P., “A lumped-parameter electro-thermal model for cylindrical batteries,” *Journal of Power Sources*, vol. 257, pp. 1–11, 2014, doi:<https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2014.01.097>.
- [19] Astaneh, M., Andrić, J., Löfdahl, L., Maggiolo, D., Stopp, P., Moghaddam, M., Chapuis, M., y Ström, H., “Calibration optimization methodology for lithium-ion battery pack model for electric vehicles in mining applications,” *Energies*, vol. 13, p. 3532, 2020, doi:[10.3390/en13143532](https://doi.org/10.3390/en13143532).
- [20] Coman, P. T., Darcy, E. C., Strangways, B., y White, R. E., “A reduced-order lumped model for li-ion battery packs during operation,” *Journal of The Electrochemical Society*, vol. 168, p. 100525, 2021, doi:[10.1149/1945-7111/ac2dcb](https://doi.org/10.1149/1945-7111/ac2dcb).
- [21] Reyes, J., “Reporte del modelo paramétrico,” technical report, Universidad de Chile, 2014.
- [22] Villa, F., “Ajuste de modelo fenomenológico de celdas de batería usando algoritmos evolutivos,” memoria de título, Universidad de Chile, 2015.
- [23] García, G. y Tapia, N., “Evolución del modelo fenomenológico de bancos de baterías,” technical report, Universidad de Chile, 2018.
- [24] Aguilar, N., “Optimización multiobjetivo de un modelo fenomenológico para el empaquetamiento de baterías de litio mediante programación genética,” memoria de título, Universidad de Chile, 2019.

- [25] Born, F., “Ajuste y análisis de modelos de empaquetamiento de baterías basado en algoritmos evolutivos,” memoria de título, Universidad de Chile, 2020.
- [26] Boote, E. J., “Aapm/rsna physics tutorial for residents: Topics in us,” *RadioGraphics*, vol. 23, no. 5, pp. 1315–1327, 2003, doi:[10.1148/rg.235035080](https://doi.org/10.1148/rg.235035080). PMID: 12975518.
- [27] Reynolds, O., “Iii. an experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and of the law of resistance in parallel channels,” *Proceedings of the Royal Society of London*, vol. 35, no. 224-226, pp. 84–99, 1883, doi:[10.1098/rspl.1883.0018](https://doi.org/10.1098/rspl.1883.0018).
- [28] Rott, N., “Note on the history of the reynolds number,” *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 22, no. 1, pp. 1–12, 1990, doi:[10.1146/annurev.fl.22.010190.000245](https://doi.org/10.1146/annurev.fl.22.010190.000245).
- [29] Yang, H., Fan, M., Liu, A., y Dong, L., “General formulas for drag coefficient and settling velocity of sphere based on theoretical law,” *International Journal of Mining Science and Technology*, vol. 25, no. 2, pp. 219–223, 2015, doi:<https://doi.org/10.1016/j.ijmst.2015.02.009>.
- [30] Timmerman, P. y Weele, K., “On the rise and fall of a ball with linear or quadratic drag,” *American Journal of Physics - AMER J PHYS*, vol. 67, pp. 538–546, 1999, doi:[10.1119/1.19320](https://doi.org/10.1119/1.19320).
- [31] Zeghadnia, L., Robert, J. L., y Achour, B., “Explicit solutions for turbulent flow friction factor: A review, assessment and approaches classification,” *Ain Shams Engineering Journal*, vol. 10, no. 1, pp. 243–252, 2019, doi:<https://doi.org/10.1016/j.asej.2018.10.007>.
- [32] *Convective Heat Transfer Basics*, cap. 9, pp. 245–270. John Wiley Sons, Ltd, 2011, doi:<https://doi.org/10.1002/9780470909973.ch9>.
- [33] Roy, U. y Roy, P. K., “Chapter 7 - advances in heat intensification techniques in shell and tube heat exchanger,” en *Advanced Analytic and Control Techniques for Thermal Systems with Heat Exchangers* (Pekař, L., ed.), pp. 197–207, Academic Press, 2020, doi:<https://doi.org/10.1016/B978-0-12-819422-5.00007-4>.
- [34] Brown, G., “The history of the darcy-weisbach equation for pipe flow resistance,” *Proc. Environ. Water Resour. Hist.*, vol. 38, 2002, doi:[10.1061/40650\(2003\)4](https://doi.org/10.1061/40650(2003)4).
- [35] Viennot, L., “Newtons laws: A very persistent consistency,” *Physics Education*, vol. 47, pp. 595–598, 2012, doi:[10.1088/0031-9120/47/5/595](https://doi.org/10.1088/0031-9120/47/5/595).
- [36] Azimi, A. H., “16 - an introduction to hydraulic structures,” en *Water Engineering Modeling and Mathematic Tools* (Samui, P., Bonakdari, H., y Deo, R., eds.), pp. 297–342, Elsevier, 2021, doi:<https://doi.org/10.1016/B978-0-12-820644-7.00003-7>.
- [37] Zohuri, B. y Mcdaniel, P., *First Law of Thermodynamics*, pp. 99–148. 2019, doi:[10.1007/978-3-319-93919-3_5](https://doi.org/10.1007/978-3-319-93919-3_5).
- [38] Zohuri, B., *Forced Convection Heat Transfer*, pp. 323–345. 2017, doi:[10.1007/978-3-319-53829-7_9](https://doi.org/10.1007/978-3-319-53829-7_9).
- [39] Zohuri, B. y Fathi, N., *Conduction Heat Transfer*, pp. 253–265. 2015, doi:[10.1007/978-3-319-17434-1_8](https://doi.org/10.1007/978-3-319-17434-1_8).
- [40] Paccha-Herrera, E., Calderón-Muñoz, W. R., Orchard, M., Jaramillo, F., y Medjaher, K., “Thermal modeling approaches for a licoo2 lithium-ion battery—a comparative study with experimental validation,” *Batteries*, vol. 6, no. 3, 2020, doi:[10.3390/batteries603](https://doi.org/10.3390/batteries603)

- [41] Lu, W., Belharouak, I., Liu, J., y Amine, K., “Thermal properties of $\text{Li}_4/3\text{Ti}_5/3\text{O}_4/\text{LiMn}_2\text{O}_4$ cell,” *Journal of Power Sources*, vol. 174, no. 2, pp. 673–677, 2007, doi:<https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2007.06.199>. 13th International Meeting on Lithium Batteries.
- [42] Forgez, C., Vinh Do, D., Friedrich, G., Morcrette, M., y Delacourt, C., “Thermal modeling of a cylindrical $\text{LiFePO}_4/\text{graphite}$ lithium-ion battery,” *Journal of Power Sources*, vol. 195, no. 9, pp. 2961–2968, 2010, doi:<https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2009.10.105>.
- [43] Toledo-Quiroz, R. A., Calderón-Muñoz, W. R., y Paccha-Herrera, E., “Modular packaging effect on thermal performance of LiCoO_2 lithium-ion cells: An experimental study,” *Journal of Energy Storage*, vol. 44, p. 103394, 2021, doi:<https://doi.org/10.1016/j.est.2021.103394>.
- [44] Xie, Y., Guo, H., Li, W., Zhang, Y., Chen, B., y Zhang, K., “Improving battery thermal behavior and consistency by optimizing structure and working parameter,” *Applied Thermal Engineering*, vol. 196, p. 117281, 2021, doi:<https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2021.117281>.
- [45] Khan, W., Culham, J., y Yovanovich, M., “Analytical model for convection heat transfer from tube banks,” *Journal of Thermophysics and Heat Transfer - J THERMOPHYS HEAT TRANSFER*, vol. 20, pp. 720–727, 2006, doi:[10.2514/1.15453](https://doi.org/10.2514/1.15453).
- [46] Slowik, A. y Kwasnicka, H., “Evolutionary algorithms and their applications to engineering problems,” *Neural Computing and Applications*, vol. 32, pp. 12363–12379, 2020, doi:[10.1007/s00521-020-04832-8](https://doi.org/10.1007/s00521-020-04832-8).
- [47] Holland, J. H., *Adaptation in Natural and Artificial Systems: An Introductory Analysis with Applications to Biology, Control, and Artificial Intelligence*. The MIT Press, 1992, doi:[10.7551/mitpress/1090.001.0001](https://doi.org/10.7551/mitpress/1090.001.0001).
- [48] Koza, J. R., *Genetic Programming: On the Programming of Computers by Means of Natural Selection*. Cambridge, MA, USA: MIT Press, 1992.
- [49] O’Neill, M. y Ryan, C., “Grammatical evolution,” *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, vol. 5, no. 4, pp. 349–358, 2001, doi:[10.1109/4235.942529](https://doi.org/10.1109/4235.942529).
- [50] Backus, J. W., Bauer, F. L., Green, J., Katz, C., McCarthy, J., Naur, P., Perlis, A. J., Rutishauser, H., Samelson, K., Vauquois, B., Wegstein, J. H., van Wijngaarden, A., y Woodger, M., “Revised report on the algorithmic language $\text{algol } 60$,” *Comput. J.*, vol. 5, pp. 349–367, 1963.
- [51] Lourenço, N., Pereira, F., y Costa, E., “Sge: A structured representation for grammatical evolution,” 2015, doi:[10.1007/978-3-319-31471-6_11](https://doi.org/10.1007/978-3-319-31471-6_11).
- [52] Lourenço, N., Pereira, F., y Costa, E., “Unveiling the properties of structured grammatical evolution,” *Genetic Programming and Evolvable Machines*, vol. 17, 2016, doi:[10.1007/s10710-015-9262-4](https://doi.org/10.1007/s10710-015-9262-4).
- [53] Lourenço, N., Assunção, F., Pereira, F. B., Costa, E., y Machado, P., “Structured grammatical evolution: a dynamic approach,” en *Handbook of Grammatical Evolution*, pp. 137–161, Springer, 2018.
- [54] Mégane, J., Lourenço, N., y Machado, P., “Probabilistic grammatical evolution,” en

- Genetic Programming (Hu, T., Lourenço, N., y Medvet, E., eds.), (Cham), pp. 198–213, Springer International Publishing, 2021.
- [55] ANSYS Inc., ANSYS Fluent User’s Guide, Version 17.2, 2016.
 - [56] Rockett, P., “Constant optimization and feature standardization in multiobjective genetic programming,” *Genetic Programming and Evolvable Machines*, vol. 23, 2022, [doi:10.1007/s10710-021-09410-y](https://doi.org/10.1007/s10710-021-09410-y).
 - [57] Meurer, A., Smith, C. P., Paprocki, M., Čertík, O., Kirpichev, S. B., Rocklin, M., Kumar, A., Ivanov, S., Moore, J. K., Singh, S., Rathnayake, T., Vig, S., Granger, B. E., Muller, R. P., Bonazzi, F., Gupta, H., Vats, S., Johansson, F., Pedregosa, F., Curry, M. J., Terrel, A. R., Roučka, v., Saboo, A., Fernando, I., Kulal, S., Cimrman, R., y Scopatz, A., “SymPy: symbolic computing in python,” *PeerJ Computer Science*, vol. 3, p. e103, 2017, [doi:10.7717/peerj-cs.103](https://doi.org/10.7717/peerj-cs.103).
 - [58] Chai, T. y Draxler, R., “Root mean square error (rmse) or mean absolute error (mae)?—arguments against avoiding rmse in the literature,” *Geoscientific Model Development*, vol. 7, pp. 1247–1250, 2014, [doi:10.5194/gmd-7-1247-2014](https://doi.org/10.5194/gmd-7-1247-2014).
 - [59] Virtanen, P., Gommers, R., Oliphant, T. E., Haberland, M., Reddy, T., Cournapeau, D., Burovski, E., Peterson, P., Weckesser, W., Bright, J., van der Walt, S. J., Brett, M., Wilson, J., Millman, K. J., Mayorov, N., Nelson, A. R. J., Jones, E., Kern, R., Larson, E., Carey, C. J., Polat, İ., Feng, Y., Moore, E. W., VanderPlas, J., Laxalde, D., Perktold, J., Cimrman, R., Henriksen, I., Quintero, E. A., Harris, C. R., Archibald, A. M., Ribeiro, A. H., Pedregosa, F., van Mulbregt, P., y SciPy 1.0 Contributors, “SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python,” *Nature Methods*, vol. 17, pp. 261–272, 2020, [doi:10.1038/s41592-019-0686-2](https://doi.org/10.1038/s41592-019-0686-2).
 - [60] Paccha-Herrera, E., Calderón-Muñoz, W., Orchard, M., Jaramillo Montoya, F., y Medjaher, K., “Thermal modeling approaches for a LiCoO₂ lithium-ion battery—a comparative study with experimental validation,” *Batteries*, vol. 6, p. 40, 2020, [doi:10.3390/batteries6030040](https://doi.org/10.3390/batteries6030040).

Anexos

Anexo A. Modelo térmico paramétrico

A continuación se muestra el algoritmo utilizado para estimar las variables de salidas del modelo térmico paramétrico. Primero, se describe el algoritmo general, luego, se procede a describir partes de este.

A.1. Funcionamiento general

En el Algoritmo 1 se describe el proceso general, el cual se muestra en el diagrama de la Figura 2.8.

Algoritmo 1 Pseudocódigo del PTM.

```
procedure PTM( $I, D, S, F_{f,in}, T_{f,in}, n, \epsilon$ )  
   $n_f = \text{round}(n/2) + 1, n_c = n_f - 1$   $\triangleright$  Número de columnas de fluido y de celda  
   $V_f = \text{array}[1, n_f], P_f = \text{array}[1, n_f], T_f = \text{array}[1, n_f]$   $\triangleright$  Variables de columnas de fluido  
   $T_c = \text{array}[1, n_c]$   $\triangleright$  Variable de columnas de celda  
   $V_{f,in} = \text{getV}(F_{f,in})$   $\triangleright$  Estimación de velocidad de entrada  
   $T_{f,1} = T_{f,in}, V_{f,1} = V_{f,in}, P_{f,n_f} = P_{atm}$   $\triangleright$  Condición de borde  
  while error  $\geq \epsilon$  do  
    for  $i$  in range(1,  $n_c$ ) do  
      Cálculo de  $P_{f,i}$  (Ecuación 2.28)  $\triangleright$  Caída de presión en la columna  $i$   
      Cálculo de  $V_{f,i+1}$  (Ecuación 2.29)  $\triangleright$  Velocidad de fluido en la columna  $i+1$   
      Cálculo de  $T_{f,i+1}$  (Ecuación 2.31)  $\triangleright$  Temperatura de fluido en la columna  $i+1$   
      Cálculo de  $T_{c,i}$  (Ecuación 2.34)  $\triangleright$  Temperatura de celda en la columna  $i$   
    end for  
  end while  
  return  $V_f, P_f, T_f, T_c$   
end procedure
```

A.2. Funcionamiento específico

En la Tabla A.1 se tienen los parámetros utilizados en el algoritmo general. En los Algoritmos 2 y 3 se muestra la inicialización de las variables antes de comenzar la iteración. Finalmente, en los Algoritmos 4, 5, 6 y 7 se muestra el cálculo de las variables, el cual se realiza iterativamente tal como se muestra en el algoritmo general.

Tabla A.1: Definición de parámetros. E[a,b,c] corresponde a un arreglo de c números entre a y b (incluyendo ambos).

Tipo	Símbolo	Variable	Unidades	Valores
Parámetros de entrada	I	Corriente	A	E[0,15,52]
	D	Diámetro	mm	E[18,28,52]
	S	Factor de separación	-	E[0.3, 1.5,52]
	F	Flujo de entrada	CFM	E[1, 200,52]
	$T_{f,in}$	Temperatura de entrada	°C	E[10, 25,52]
	col_f	Número de columnas de fluido	-	-
	col_c	Número de columnas de celda	-	-
	n_f	Número de celdas por columna de fluido	-	-
	n_c	Número de celdas por columna de celda	-	-
Parámetros fijos	R	Resistencia interna de la celda	Ω	$32 \cdot 10^{-3}$
	L_{cell}	Largo de la celda	m	$65 \cdot 10^{-3}$
	e	Espacio entre pared y celda	m	$15 \cdot 10^{-3}$
	P_{ref}	Presión de referencia	Pa	0
Parámetros de salida	V	Velocidad de fluido	ms^{-1}	-
	P	Caída de presión de fluido	Pa	-
	T_f	Temperatura de fluido	°C	-
	T_c	Temperatura de celda	°C	-

Algoritmo 2 Inicialización.

Cambio de unidades

$$D = D/1000$$

▷ Diámetro, de [mm] a [m]

$$F = F * 0.00047$$

▷ Flujo inicial, de [CFM] a [m^3/s]**Cálculos estructurales**

$$Ancho_{banco} = 2 \cdot e + D \cdot (n_f + S \cdot n_c)$$

▷ Ancho del banco de baterías

$$A_{battery_in} = Ancho_{banco} \cdot L_{cell}$$

▷ Área de entrada a la batería

$$A_{vol_sec} = D \cdot (S + 1) \cdot L_{cell} \quad \triangleright \text{Área de sección de volumen de control, en dirección del fluido}$$

$$A_{vol_in} = D \cdot S \cdot L_{cell}$$

▷ Área de entrada al volumen de control

$$A_{cell_sec} = D \cdot L_{cell}$$

▷ Área de sección de la celda, en dirección del fluido

$$A_{cell_manto} = D \cdot \pi \cdot L_{cell}$$

▷ Área del manto de la celda

Cálculos térmicos

$$\dot{q}_{cell} = I^2 \cdot R$$

▷ Calor generado en una celda

$$\dot{q}_{vol} = f_{tf}(S) \cdot \dot{q}_{cell}$$

▷ Calor generado en el volumen de control

$$heatPerArea = \frac{\dot{q}_{vol}}{A_{cell_manto}}$$

▷ Calcular calor por unidad de área en el manto de la celda

$$fluidTempTerm = \frac{\dot{q}_{vol}}{\dot{m}}$$

▷ Terminó de temperatura

Condiciones de borde

$$V_{in} = F/A_{battery_in}$$

▷ Estimación de velocidad de entrada

$$V_1 = F_v(S) \cdot V_{in}$$

▷ Ajuste de velocidad de fluido en primera columna

$$T_1 = F_{tf}(D, V_{in}) \cdot T_{in}$$

▷ Ajuste de temperatura de fluido en primera columna

$$P_{col_f} = F_p(D, S, V_{in}) + P_{ref}$$

▷ Ajuste de presión de fluido en última columna

Algoritmo 3 Cálculos iniciales de iteración.

Cálculos de propiedades

$$Vm_{f_i} = \frac{S}{S+1} \cdot V_{f,i}$$

▷ Estimación de velocidad media en columna (i)

$$Tm_{f_i} = \frac{T_{f,i} + T_{f,i+1}}{2}$$

▷ Estimación de temperatura media en columna (i)

$$k_i = get_conductividad(Tm_{f_i})$$

▷ Estimación de conductividad de fluido en columna (i)

$$DF_i = get_densidad(Tm_{f_i})$$

▷ Estimación de densidad de fluido en columna (i)

$$ViscF_i = get_viscosidad(Tm_{f_i})$$

▷ Estimación de viscosidad de fluido en columna (i)

$$cp_i = get_cp(Tm_{f_i})$$

▷ Estimación de calor específico de fluido en columna (i)

Cálculos número de Reynolds

$$Re_i = \frac{DF_i \cdot Vm_{f_i} \cdot D}{ViscF_i}$$

▷ Cálculo de Número de Reynolds

Cálculo de número de Prandtl

$$Pr_i = \frac{ViscF_i \cdot cp_i}{k_i}$$

▷ Cálculo de Número de Prandtl

Algoritmo 4 Calcular caída de presión de fluido en columna (i).

$$Vm_{f_i} = \frac{S}{S+1} \cdot V_{f,i}$$

▷ Estimar velocidad media de fluido en volumen de control

$$F_D = get_frictionFactor(S, Re_i)$$

▷ Calcular factor de fricción

$$P_{f,i} = P_{f,i+1} + \frac{1}{2} \cdot DF_i \cdot F_D \cdot Vm_{f_i}^2$$

▷ Calcular caída de presión de fluido en columna (i)

Algoritmo 5 Calcular velocidad de fluido en columna (i+1).

$c_d = \text{get_cdrag}(S, Re_i)$ \triangleright Calcular coeficiente de arrastre
 $FF_cell_i = \frac{1}{2} \cdot A_cell_sec \cdot DF_i \cdot V_i^2 \cdot c_d$ \triangleright Calcular fuerza de fricción para una celda en columna (i)
 $FF_vol_i = 2 \cdot FF_cell_i$ \triangleright Calcular fuerza de fricción para el volumen de control en columna (i)
 $V_{f,i+1} = \frac{A_vol_in \cdot (P_{f,i} - P_{f,i+1}) - FF_vol_i}{\dot{m}} + V_{f,i}$ \triangleright Calcular velocidad de fluido en columna (i+1)

Algoritmo 6 Calcular temperatura de fluido en columna (i+1).

$cp_i = \text{get_cp}(T_{f,i})$ \triangleright Calcular el calor específico
 $T_{f,i+1} = T_{f,i} + \frac{fluidTempTerm - \frac{1}{2} \cdot (V_{i+1}^2 - V_i^2)}{cp_i}$ \triangleright Calcular temperatura de fluido en columna (i+1)

Algoritmo 7 Calcular temperatura de celda en columna (i).

$Tmf_i = \frac{T_{f,i} + T_{f,i+1}}{2}$ \triangleright Calcular la temperatura de fluido media en el volumen de control
 $Nu_i = \text{get_nusselt}(S, Re_i, Pr_i)$ \triangleright Calcular el número de Nusselt para columna (i)
 $k_i = \text{get_k}(T_{f,i})$ \triangleright Calcular conductividad térmica del aire
 $h_i = \frac{Nu_i \cdot k_i}{D}$ \triangleright Calcular el coeficiente de transferencia de calor
 $T_{c,i} = \frac{heatPerArea}{h_i} + Tmf_i$ \triangleright Calcular la temperatura de celda en la columna (i)

Anexo B. Estimar expresiones de interés en base a los resultados de simulaciones mediante CFD

En los Algoritmos 8, 9 y 10 se muestra la estimación de los valores del coeficiente de arrastre, factor de fricción y número de Nusselt, en base a los resultados de simulaciones mediante CFD. Estos cálculos son utilizados en la sección 3.2.1.2.

Algoritmo 8 Estimación del coeficiente de arrastre en columna (i).

$FF_vol_i = \dot{m} \cdot (V_{f,i} - V_{f,i+1}) + A_vol_in \cdot (P_{f,i} - P_{f,i+1})$ \triangleright fuerza de fricción para el volumen de control en columna (i)
 $FF_cell_i = \frac{FF_vol_i}{2}$ \triangleright fuerza de fricción para una celda en la columna (i)
 $c_d = \frac{FF_cell_i}{\frac{1}{2} \cdot DF_i \cdot Vmf_i^2 \cdot Cell_section_Area}$ \triangleright Estimar el coeficiente de arrastre en la columna (i)

Algoritmo 9 Estimación del factor de fricción en columna (i).

$f_D = \frac{2 \cdot (P_{f,i+1} - P_{f,i})}{DF_i \cdot Vmf_i^2}$ \triangleright Estimar factor de fricción para columna (i)

Algoritmo 10 Estimación del número de Nusselt en columna (i).

$Tmf_i = \frac{T_{f,i} + T_{f,i+1}}{2}$	▷ Estimar la temperatura de fluido media en el volumen de control
$h_i = \frac{heatPerArea}{T_{c,i} - Tmf_i}$	▷ Estimar el coeficiente de transferencia de calor para la columna (i)
$k_i = get_k(T_{f,i})$	▷ Estimar la conductividad térmica del aire
$Nu_i = \frac{h_i \cdot D}{k_i}$	▷ Estimar el número de Nusselt para columna (i)

Anexo C. Evaluación de Modelo paramétrico

C.1. Sentido físico

Con el fin de evaluar el sentido físico del modelo resultante, se comparan las temperaturas de celda estimadas por el modelo y por CFD. Para esto, se realizan múltiples simulaciones variando solo una de las entradas del modelo. De esta forma, se comparan las curvas resultantes, las cuales muestran parte del comportamiento físico del modelo. A continuación se muestran estas simulaciones, donde en cada caso se varía solo un parámetro, dejando el resto con valores constantes.

C.1.1. Corriente

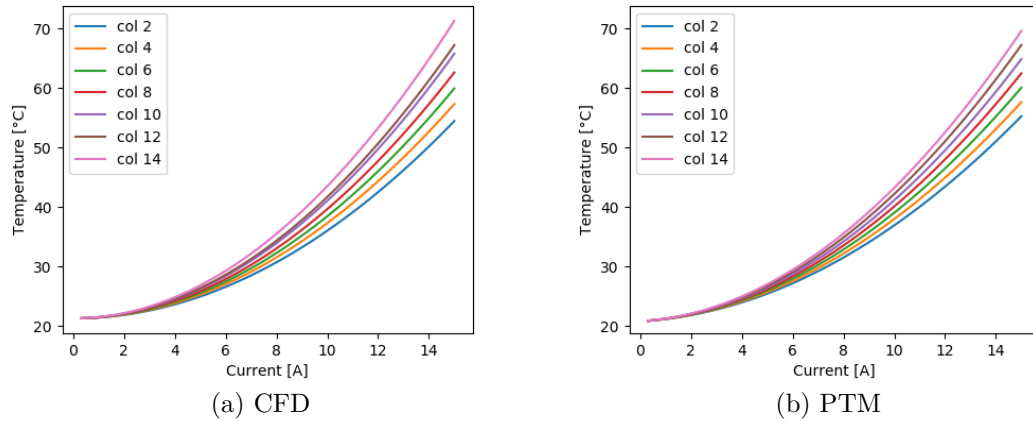


Figura C.1: Temperatura de celda en función de la corriente, calculado mediante CFD para un pack de 53 celdas ($S=1.2$, $F= 50.75$ [CFM], $T_{in}=21.25$ [°C], $D=25.5$ [mm]).

C.1.2. Factor de separación

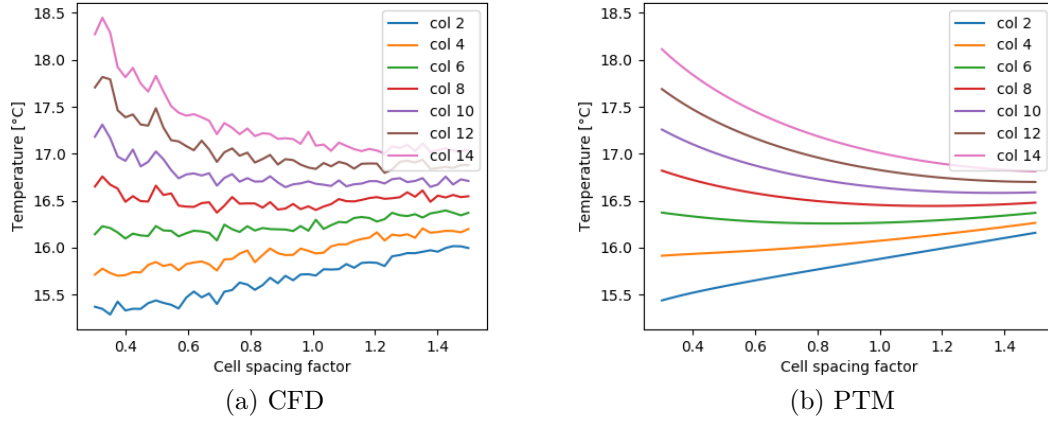


Figura C.2: Temperatura de celda en función del factor de separación, calculado mediante CFD para un pack de 53 celdas ($I=3.75$ [A], $F= 50.75$ [CFM], $T_{in}=13.75$ [°C], $D=20.5$ [mm]).

C.1.3. Flujo de entrada

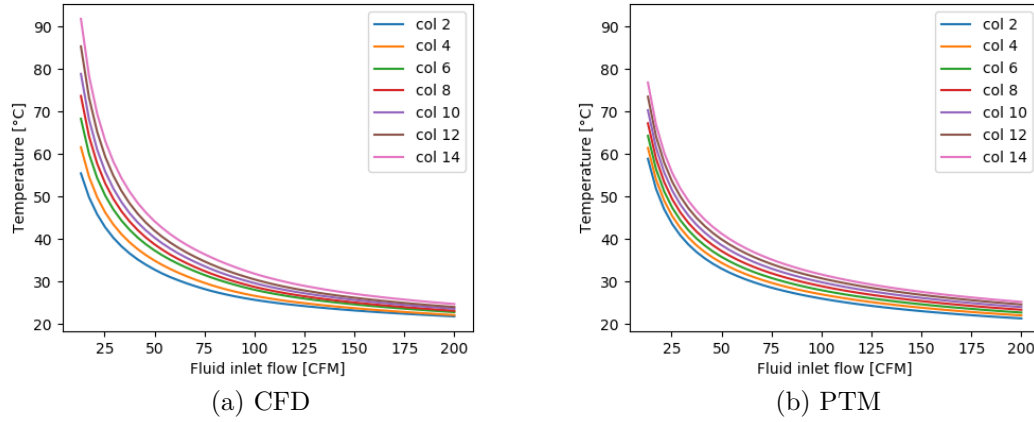


Figura C.3: Temperatura de celda en función del flujo de entrada, calculado mediante CFD para un pack de 53 celdas ($I=11.25$ [A], $S= 1.2$, $T_{in}=13.75$ [°C], $D=20.5$ [mm]).

C.1.4. Diámetro

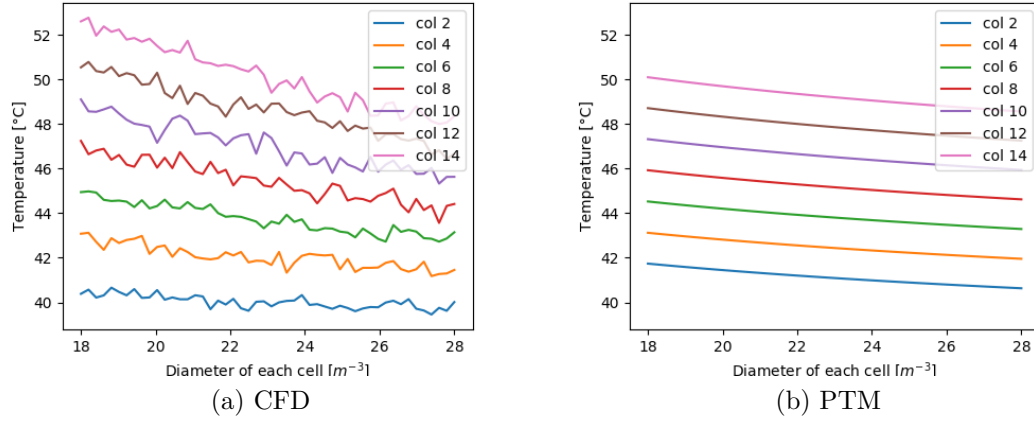


Figura C.4: Temperatura de celda en función del diámetro, calculado mediante CFD para un pack de 53 celdas ($I=11.25$ [A], $S=1.2$, $F=50.75$ [CFM], $T_{in}=21.25$ [°C]).

C.1.5. Temperatura de entrada del fluido

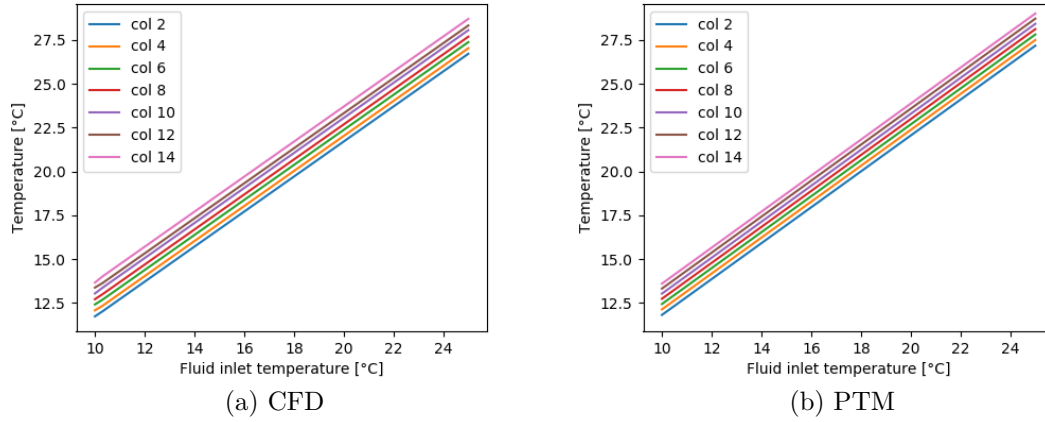


Figura C.5: Temperatura de celda en función de la temperatura de entrada del fluido, calculado mediante CFD para un pack de 53 celdas ($I=3.75$ [A], $S=0.6$, $F=50.75$ [CFM], $D=20.5$ [mm]).