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





Rafael De la Sotta Vargas

Profesor guía Pablo Estévez Valencia

Profesor co-guía Jorge Vergara Quezada

Miembro de la comisión Williams Calderón Muñoz Marcos Orchard Concha

31 de mayo de 2023

Contenidos

- Introducción
- Antecedentes
 - Estado del arte y datos
 - Modelo térmico paramétrico
 - Algoritmos evolutivos
- Metodología
 - Formalización del problema
 - Procesamiento de datos
 - Optimización del modelo térmico paramétrico
 - Extensión del modelo: dinámica para la temperatura
- Resultados
 - Expresiones evolucionadas
 - Ajuste del modelo a los datos simulados mediante CFD
 - Validación con mediciones experimentales
- Conclusiones y trabajo futuro

Contenidos

- Introducción
- 2 Antecedentes
 - Estado del arte y datos
 - Modelo térmico paramétrico
 - Algoritmos evolutivos
- Metodología
 - Formalización del problema
 - Procesamiento de datos
 - Optimización del modelo térmico paramétrico
 - Extensión del modelo: dinámica para la temperatura
- Resultados
 - Expresiones evolucionadas
 - Ajuste del modelo a los datos simulados mediante CFD
 - Validación con mediciones experimentales
- 5 Conclusiones y trabajo futuro

(Universidad de Chile) 31 de mayo de 2023

3/37

Introducción (1/2): Baterías de litio

- Uso de las baterías de litio.
- Requerimiento de estabilidad térmica.
- Importancia del modelamiento.

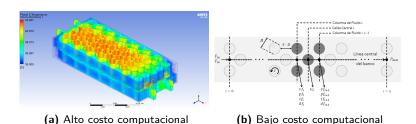


Figura 1: Diferentes enfoques para modelar baterías.

Introducción (2/2): Objetivos

Objetivo general

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.

Objetivos específicos

- Encontrar expresiones simples para coeficiente de arrastre, factor de fricción y número de Nusselt, de manera que estas se ajusten a resultados de simulaciones mediante dinámica de fluidos computacional.
- Evaluar el modelo térmico paramétrico ajustado comparando su comportamiento con el obtenido con dinámica de fluidos computacional.
- Extender el modelo paramétrico al cálculo de balance de temperatura en el tiempo. .



5/37

Contenidos

- Introducción
- Antecedentes
 - Estado del arte y datos
 - Modelo térmico paramétrico
 - Algoritmos evolutivos
- Metodología
 - Formalización del problema
 - Procesamiento de datos
 - Optimización del modelo térmico paramétrico
 - Extensión del modelo: dinámica para la temperatura
- Resultados
 - Expresiones evolucionadas
 - Ajuste del modelo a los datos simulados mediante CFD
 - Validación con mediciones experimentales
- 5 Conclusiones y trabajo futuro

(Universidad de Chile) 31 de mayo de 2023

6/37

Estado del arte

Optimización de modelos de baterías de litio

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 [Tamilselvi et al., 2021].

Trabajos anteriores

- Modelo térmico paramétrico [Reyes, 2014].
- Optimización del modelo mediante Genetic programming (GP) [Villa, 2015].
- Optimización del modelo mediante Grammatical evolution (GE) [Born, 2020].

Datos

Datos simulados mediante CFD

5000 simulaciones mediante un software de tipo CFD llamado ANSYS [Born, 2020].



Mediciones de procesos de descarga y enfriamiento de un pack de baterías, variando el número de columnas y la velocidad de descarga [Toledo-Quiroz et al., 2021].

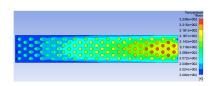


Figura 2: Simulación en ANSYS para temperatura en pack de baterías.

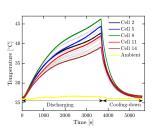


Figura 3: Descarga y enfriamiento de un pack de baterías.

Modelo térmico paramétrico (1/4): Estructura y variables

Se calcula el estado estacionario del pack de baterías, en cuanto a propiedades del fluido de refrigeración y la temperatura de celda [Reyes, 2014].

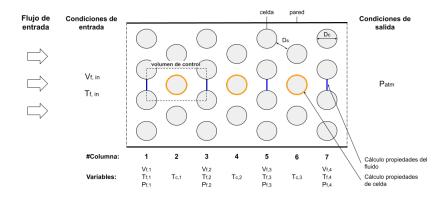


Figura 4: Estructura de una batería de 25 celdas utilizada para el modelamiento.

Modelo térmico paramétrico (2/4): Cálculo de variables

Velocidad de fluido

Presión de fluido

Temperatura de celda

Para calcular la velocidad de fluido se utiliza el coeficiente de arrastre (c_d) .

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

$$F_{Drag,i} = \frac{1}{2} \cdot \rho_i \cdot V_{f,i}^2 \cdot c_{d,i} \cdot A \tag{2}$$

Coeficiente de arrastre utilizado en la literatura

$$c_d = \frac{24}{Re} \quad \text{para} \quad Re < 0.4 \tag{3}$$

Modelo térmico paramétrico (3/4): Cálculo de variables

Velocidad de fluido

Presión de fluido

Temperatura de celda

Presión de fluido

Para calcular la presión de fluido se utiliza el factor de fricción (f_D) .

$$P_{f,i} = \frac{f_{D,i} \cdot \rho_i \cdot V_{f,i}^2}{2} + P_{f,i+1} \tag{4}$$

Factor de fricción utilizado en la literatura

$$f_D = \frac{64}{Re} \quad \text{para} \quad Re < 2 \cdot 10^3 \tag{5}$$

Modelo térmico paramétrico (4/4): Cálculo de variables

Velocidad de fluido

Presión de fluido

Temperatura de celda

Temperatura de celda Para calcular la temperatura de celda se utiliza el número de Nusselt (Nu).

$$T_{c,i} = \frac{Q_{gen}}{h_i \cdot A_{surf}} + T_{f,i} \tag{6}$$

$$h_i = \frac{Nu_i \cdot k_i}{D} \tag{7}$$

Número de Nusselt utilizado en la literatura

$$Nu = C \cdot Re^n \cdot Pr^m \tag{8}$$

Algoritmos evolutivos (1/2)

En algoritmos evolutivos (EA) se trabaja con conjuntos de posibles soluciones a un problema, las cuales sufren cambios inspirados en la biología.

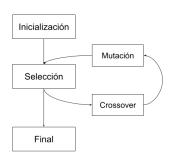


Figura 5: Diagrama simple.

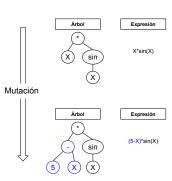


Figura 6: Ejemplo de mutación.

Algoritmos evolutivos (2/2): GE y SGE

Grammatical evolution (GE) es un algoritmo evolutivo que codifica las soluciones mediante una gramática [O'Neill and Ryan, 2001].

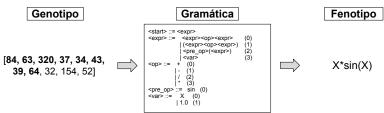


Figura 7: Ejemplo de uso de una gramática para Grammatical evolution.

Structured grammatical evolution (SGE) es una variación de GE que modifica la codificación de las soluciones [Lourenço et al., 2015].

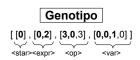


Figura 8: Ejemplo de genotipo en Structured grammatical evolution.

Contenidos

- Introducción
- 2 Antecedentes
 - Estado del arte y datos
 - Modelo térmico paramétrico
 - Algoritmos evolutivos
- Metodología
 - Formalización del problema
 - Procesamiento de datos
 - Optimización del modelo térmico paramétrico
 - Extensión del modelo: dinámica para la temperatura
- Resultados
 - Expresiones evolucionadas
 - Ajuste del modelo a los datos simulados mediante CFD
 - Validación con mediciones experimentales
- 5 Conclusiones y trabajo futuro

Formalización del problema

La optimización del modelo térmico paramétrico se plantea como un problema de regresión simbólica. El problema se define como la obtención de expresiones matemáticas para:

- Coeficiente de arrastre (c_d)
- Factor de fricción (f_D)
- Número de Nusselt (Nu)

Procesamiento de datos (1/3): Separación

Las simulaciones se dividen, según el tamaño del pack, en conjuntos de entrenamiento, validación y prueba.

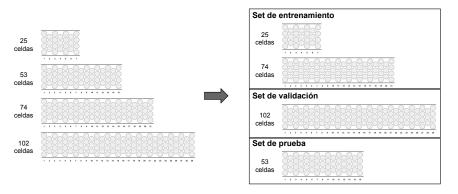


Figura 9: Separación de simulaciones según el tamaño del pack simulado.

Procesamiento de datos (2/3): Procesamiento

Se utilizan las salidas calculadas mediante CFD (V_f, P_f, T_f, T_c) para calcular los valores de los números de interés.

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

$$F_{Drag,i} = \frac{1}{2} \cdot \rho_i \cdot V_{f,i}^2 \cdot c_{d,i} \cdot A$$

$$Factor de fricción$$

$$P_{f,i} = \frac{f_{D,i} \cdot \rho_i \cdot V_{f,i}^2}{2} + P_{f,i+1}$$

$$T_{c,i} = \frac{Q_{gen}}{h_i \cdot A_{surf}} + T_{f,i}$$

$$h_i = \frac{Nu_i \cdot k_i}{D}$$

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

Figura 10: Ingeniería inversa para obtener valores de números de interés

Procesamiento de datos (3/3): Correlación

Se calcula la correlación de Pearson entre las variables de entrada y los números de interés.

Tabla 1: Correlación de Pearson.

| | I | D_c | S | $F_{f,in}$ | $T_{f,in}$ |
|-------------------------|--------|--------|--------|------------|------------|
| Coeficiente 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 |

Se destaca la importancia del factor de separación, el cual corresponde a la razón entre la distancia entre celdas y diámetro de estas ($S=D_s/D_c$).







Figura 11: Ejemplo de variación del factor de separación.

Optimización del modelo (1/3): Función objetivo

Se calcula una función de error que depende de la expresión a evaluar (c_d,f_D,Nu) y del tamaño de pack.

$$f(exp, n_{cells}) = \frac{1}{M \cdot n_{col}} \cdot \sum_{j=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_{col}} (y_i^j - \hat{y}_i^j)^2 \ \ (9)$$

M: Número de simulaciones. n_{cells} : Número de celdas. e_{cep} : Expresión evaluada (e_d, f_D, Nu) . n_{col} : Número de columnas. y_i^j : valor estimado en base a CFD. $\hat{y}_i^j = exp(x_i^j)$: valor calculado mediante la expresión evaluada. x_i^j : parámetros de cada columna en cada simulación

A modo de ejemplo, la función objetivo para el coeficiente de arrastre es la siguiente:

$$min \quad \frac{f(c_d, 25) + f(c_d, 74)}{2}$$
 (10)

Optimización del modelo (2/3): Algoritmo evolutivo

En la Tabla 2 se muestran los parámetros utilizados por *SGE*.

En la Figura 12 se muestran las gramáticas utilizadas por *SGE*.

Tabla 2: Parámetros utilizados para evolucionar SGE.

| Parámetro | Valor |
|---|-------------------------------|
| 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 [Virtanen et al., 2020] |
| a | |

^a Modificación al modelo.

(a) Coeficiente de arrastre y factor de fricción

(b) Número de Nusselt

21/37

Figura 12: Gramáticas utilizadas.

Optimización del modelo (3/3): Simplificación de expresiones

Cada expresión se simplifica en términos de estructura y de valores de las constantes.

- Estructura: se simplifica mediante symbolic computing [Meurer et al., 2017].
- Constantes: se hace un trade-off entre simplicidad y rendimiento.

$$f_D = (\frac{S}{6.5728802 \cdot (0.018566733 \cdot Re)^{-0.208613439}})^{-1.13912469}$$

$$\bigcap_{\text{Simplificación}} f_D = 20 \cdot S^{-1.1} \cdot Re^{-0.22}$$

Figura 13: Simplificación para el factor de fricción.

Extensión del modelo: dinámica para la temperatura

Se incluye una estimación del comportamiento térmico dinámico cada celda [Forgez et al., 2010].

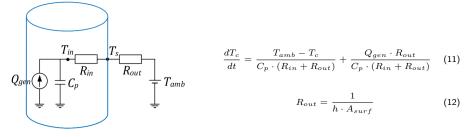


Figura 14: Modelo de circuito equivalente.

El coeficiente de transferencia de calor (h) se calcula utilizando el número de Nusselt.

$$h = \frac{Nu \cdot k}{D} \tag{13}$$

Contenidos

- Introducción
- 2 Antecedentes
 - Estado del arte y datos
 - Modelo térmico paramétrico
 - Algoritmos evolutivos
- Metodología
 - Formalización del problema
 - Procesamiento de datos
 - Optimización del modelo térmico paramétrico
 - Extensión del modelo: dinámica para la temperatura
- Resultados
 - Expresiones evolucionadas
 - Ajuste del modelo a los datos simulados mediante CFD
 - Validación con mediciones experimentales
- 5 Conclusiones y trabajo futuro

Expresiones evolucionadas (1/4)

Para medir el desempeño de las expresiones evolucionadas, se utiliza el error medio absoluto (MAE) y el error medio porcentual absoluto (MAPE).

$$MAE = \frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^{N} |x_i - \hat{x}_i|$$
 (14) $MAPE = \frac{100\%}{N} \cdot \sum_{i=1}^{N} |\frac{x_i - \hat{x}_i}{x_i}|$ (15)

En la Tabla 3 se resume el error de las expresiones obtenidas mediante SGE en comparación con la estimación de sus valores para simulaciones CFD.

Tabla 3: Desempeño de las expresiones evolucionadas.

| Nombre | Expresión obtenida | MAE | MAPE (%) |
|-------------------------|--|---------------|----------------|
| Coeficiente de arrastre | $c_d = S^{-0.6} + 5 \cdot Re^{-0.23}$ | 0.08 ± 0.08 | 3.73 ± 3.27 |
| Factor de fricción | $f_D = 20 \cdot S^{-1.1} \cdot Re^{-0.22}$ | 0.52 ± 0.67 | 11.39 ± 9.29 |
| Número de Nusselt | $Nu = 0.5 \cdot S^{-0.2} \cdot Re^{0.63} \cdot Pr$ | 1.77 ± 1.68 | 2.29 ± 2.25 |

Expresiones evolucionadas (2/4)

Coeficiente de arrastre (c_d)

Factor de fricción

Número de Nusselt

La expresión obtenida para el coeficiente de arrastre obtiene un MAPE de $3.73\pm3.27\,\%$ con respecto a los datos de referencia.

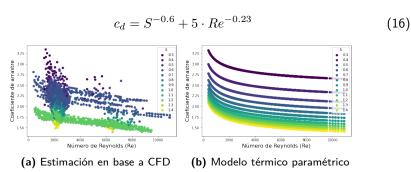


Figura 15: Coeficiente de arrastre en función del número de Reynolds y el factor de separación.

Expresiones evolucionadas (3/4)

Coeficiente de arrastre

Factor de fricción (f_D)

Número de Nusselt

La expresión obtenida para el factor de fricción obtiene un MAPE de $11.39\pm9.29\,\%$ con respecto a los datos de referencia.

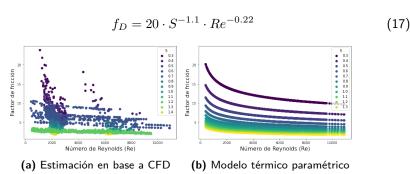


Figura 16: Factor de fricción en función del número de Reynolds y el factor de separación.

Coeficiente de arrastre

actor de fricción Número de Nusselt (Nu)

La expresión obtenida para el número de Nusselt obtiene un MAPE de $2.29\pm2.25\,\%$ con respecto a los datos de referencia.

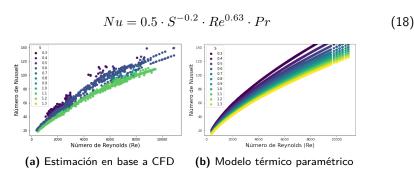


Figura 17: Número de Nusselt en función del número de Reynolds y el factor de separación¹.

El número de Prandtl (Pr) es constante para un mismo problema

Ajuste del modelo a datos simulados mediante CFD

En la Figura 18 se muestra el MAPE de temperatura de celda por columna. El MAPE general es $2.39\pm2.05\,\%.$

En la Figura 19 se grafican curvas de respuesta frente a la variación de corriente.

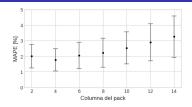
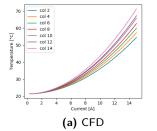
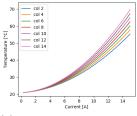


Figura 18: MAPE en cálculo de temperatura de celda por columna (pack de 53 celdas).





(b) Modelo térmico paramétrico

29 / 37

Figura 19: Temperatura de celda por columna, en función de la corriente en las celdas (S=1.2, F_{in} = 50.75 [CFM], T_{in} =21.25 [°C], D=25.5 [mm]).

Validación con mediciones experimentales

Se obtiene un MAPE de $1.19\pm0.63\,\%$ con respecto a las mediciones experimentales con respecto a los packs de 3 a 10 columnas.

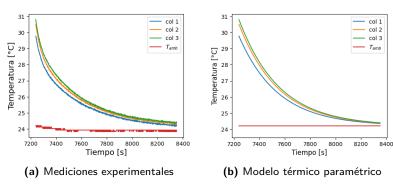


Figura 20: Comparación entre las mediciones experimentales y el modelo propuesto en relación con el proceso de enfriamiento de un módulo de batería de tres columnas.

Contenidos

- Introducción
- 2 Antecedentes
 - Estado del arte y datos
 - Modelo térmico paramétrico
 - Algoritmos evolutivos
- Metodología
 - Formalización del problema
 - Procesamiento de datos
 - Optimización del modelo térmico paramétrico
 - Extensión del modelo: dinámica para la temperatura
- Resultados
 - Expresiones evolucionadas
 - Ajuste del modelo a los datos simulados mediante CFD
 - Validación con mediciones experimentales
- 5 Conclusiones y trabajo futuro

Conclusiones y trabajo futuro

Conclusiones

- Se encuentran expresiones simples para el coeficiente de arrastre, factor de fricción y número de Nusselt, que se ajustan a los datos de simulaciones por dinámica de fluidos computacional.
- El modelo térmico paramétrico logra ajustarse a los datos de simulaciones por dinámica de fluidos computacional.
- Se extiende el modelo térmico paramétrico al dominio temporal.

Trabajo futuro

- Ampliar los rangos de operación del modelo térmico paramétrico.
- Ajustar el modelo a datos con temperatura dinámica: Obtener una expresión matemática para la resistencia térmica interna.
- Incluir otros tipos de refrigeración, tal como el uso de líquidos y materiales de cambio de fase.

Referencias I



Born, F. (2020).

Ajuste y análisis de modelos de empaquetamiento de baterías basado en algoritmos evolutivos.

Memoria de título. Universidad de Chile.



Forgez, C., Vinh Do, D., Friedrich, G., Morcrette, M., and Delacourt, C. (2010).

Thermal modeling of a cylindrical lifepo4/graphite lithium-ion battery.

Journal of Power Sources, 195(9):2961-2968.



Lourenco, N., Pereira, F., and Costa, E. (2015).

Sge: A structured representation for grammatical evolution.



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., and Scopatz, A. (2017).

Sympy: symbolic computing in python.

PeerJ Computer Science, 3:e103.

Referencias II



O'Neill, M. and Ryan, C. (2001).

Grammatical evolution.

IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 5(4):349–358.



Reyes, J. (2014).

Reporte del modelo paramétrico.

Technical report, Universidad de Chile.



Tamilselvi, S., Selvaraj, G., Natarajan, K., Kaladgi, A. R., Saranathan, M., Nagarajan, V., Sathish, T., Shamim, M. Z., Saleel C, A., and Afzal, A. (2021).

A review on battery modelling techniques.

Sustainability, 13:10042.



Toledo-Quiroz, R. A., Calderón-Muñoz, W. R., and Paccha-Herrera, E. (2021).

Modular packaging effect on thermal performance of licoo2 lithium-ion cells: An experimental study.

Journal of Energy Storage, 44:103394.

Referencias III



Villa, F. (2015).

Ajuste de modelo fenomenológico de celdas de batería usando algoritmos evolutivos.

Memoria de título, Universidad de Chile.



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., and SciPy 1.0 Contributors (2020).

SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python.

Nature Methods, 17:261-272.

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





Rafael De la Sotta Vargas

Profesor guía Pablo Estévez Valencia

Profesor co-guía Jorge Vergara Quezada

Miembro de la comisión Williams Calderón Muñoz Marcos Orchard Concha

31 de mayo de 2023

Anexo: Parámetros del modelo térmico paramétrico

Tabla 4: Lista de parámetros del modelo térmico paramétrico.

| Símbolo | Descripción | Rango | Unidades |
|------------|-----------------------------------|-----------|----------|
| I | Corriente de celda | [0,15] | А |
| D_c | Diámetro de celda | [18,28] | mm |
| S | Factor de separación ² | [0.3,1.5] | - |
| F | Flujo de entrada de fluido | [1,200] | CFM |
| $T_{f,in}$ | Temperatura de entrada del fluido | [10,25] | °C |
| N | Número de columnas | [7,29] | - |

Tabla 5: Lista de variables del modelo térmico paramétrico.

| Símbolo | Descripción | Unidades |
|-----------|--|-----------|
| $T_{c,i}$ | Temperatura de celda, por columna | °C |
| $P_{f,i}$ | Caída de presión del fluido, por columna | Pa |
| $T_{f,i}$ | Temperatura del fluido, por columna | °C |
| $V_{f,i}$ | Velocidad del fluido, por columna | ms^{-1} |

S es la razón entre el espaciamiento de celdas y su diámetro $\left(S=D_s/D_c\right)$