

LIVRE BLANC

# Modélisation des batteries

Par **HENRIK EKSTRÖM** et **ED FONTES**

## TABLE DES MATIÈRES

Introduction .....	3
Champs d'application de la modélisation .....	3
Modélisation multiphysique .....	4
Échelle microscopique .....	4
Échelle de la cellule de batterie avec la théorie des électrodes poreuses .....	5
Échelle du module et du pack batterie .....	5
Perspectives et conclusion .....	6

### Ressources complémentaires

#### CAS UTILISATEURS

<https://www.comsol.fr/stories>

#### BIBLIOTHEQUE D'APPLICATIONS

<https://www.comsol.fr/models>

#### DOCUMENTS TECHNIQUES ET PRÉSENTATIONS

<https://www.comsol.fr/papers-presentations>

#### BLOG COMSOL

<http://www.comsol.fr/blogs>

### Demandes d'informations

Pour toute question sur la manière d'utiliser les capacités de simulation numérique et de conception d'applications du logiciel COMSOL® pour vos propres projets, visitez le site <http://www.comsol.fr/contact>

Contactez le support technique :

<http://www.comsol.fr/support>

Publication d'origine: *Tech Briefs* - Février 2021 - Vol. 45 No. 2, *Battery Technology* Pages 8–11.

### A propos des auteurs

**Henrik Ekström, COMSOL, [www.comsol.com](http://www.comsol.com)**

Henrik Ekström travaille chez COMSOL et est titulaire d'un doctorat en électrochimie appliquée de l'Ecole royale polytechnique (KTH) de Stockholm. En tant que responsable technologique de l'électrochimie chez COMSOL, il supervise le développement de diverses solutions de simulation et de modélisation pour les batteries, les piles à combustible, la corrosion, l'électrodéposition, et plus généralement pour les applications électrochimiques.

**Ed Fontes, COMSOL, [www.comsol.com](http://www.comsol.com)**

Ed Fontes est directeur de la technologie chez COMSOL et titulaire d'un doctorat en électrochimie appliquée de l'Ecole royale polytechnique (KTH) de Stockholm. Il a été le principal développeur des produits relatifs à l'ingénierie chimique, à la CFD et au transfert de chaleur chez COMSOL. Il est responsable du développement chez COMSOL.

## INTRODUCTION

Dans le domaine de la recherche et du développement des batteries, la modélisation et la simulation (M&S) constituent une approche efficace et peu coûteuse.

L'utilisation de la M&S est toujours associée à des recherches expérimentales, qui permettent en premier lieu de développer et de valider les modèles. Une fois validés, les modèles physiques peuvent être utilisés pour faire des prédictions dans les limites de la théorie, qui va bien au-delà du cadre utilisé pour la validation d'un seul modèle.

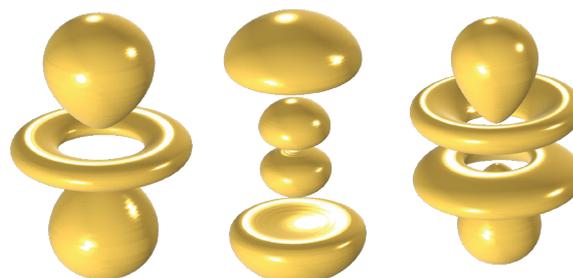
Tout au long du processus de R&D, les chercheurs et les ingénieurs utilisent des modèles pour accompagner leur réflexion et mener des expériences virtuelles. Ces études conduites via la simulation permettent de mieux comprendre le système de batterie étudié et font parfois émerger de nouvelles idées. Les modèles peuvent être utilisés pour prédire, concevoir, optimiser et contrôler le système de batteries.

Les systèmes de batteries sont étudiés par de nombreux acteurs pour des raisons et des objectifs variés. Par exemple, dans un véhicule électrique, les caractéristiques du système de batterie, tels que la densité énergétique, la densité de puissance, la durée de vie, le coût et la durabilité, déterminent les limites techniques et les objectifs des différents acteurs.

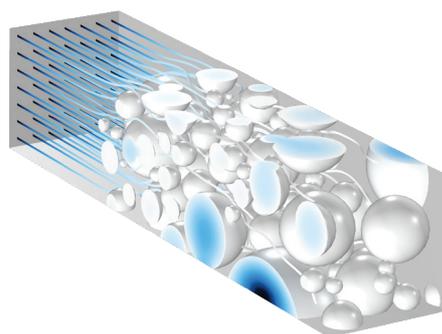
Les universités, instituts de recherche et laboratoires gouvernementaux ont souvent des programmes de recherche fondamentale visant à comprendre tous les aspects de l'utilisation des batteries. Les sujets de recherche peuvent porter sur l'étude des matériaux en vue de l'élaboration de nouvelles chimies de batteries, la conception de cellules et de systèmes de batteries, et l'analyse du cycle de vie (ACV) en tenant compte des processus d'extraction des matières premières, de l'élimination et du recyclage. Les fabricants de batteries quant à eux étudient des aspects similaires, en mettant davantage l'accent sur la fabricabilité, la mise en œuvre et l'utilisation. Enfin, les équipementiers s'occupent généralement des aspects liés à la conception des cellules et des systèmes de batteries, notamment en ce qui concerne leur utilisation et l'ACV.

## CHAMPS D'APPLICATIONS DE LA MODELISATION

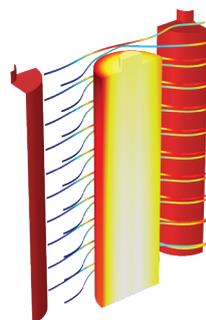
Selon le contexte et l'objectif, les projets de M&S peuvent adresser différentes échelles. Il peut s'agir de modéliser des processus à l'échelle moléculaire, microscopique, de la cellule ou encore du pack de batteries. Les problématiques liées à l'extraction, à l'élimination et au recyclage des matériaux peuvent également avoir un impact sur les projets de modélisation. En effet, ces questions déterminent de manière indirecte l'étendue des propriétés des cellules, des modules et des packs de batteries.



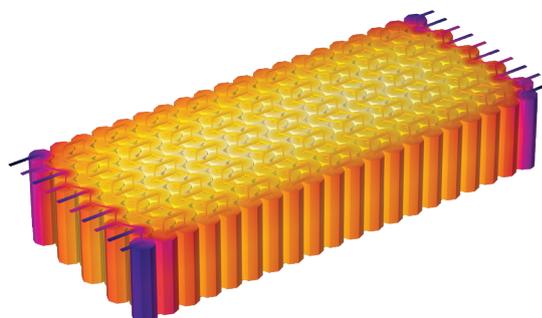
Échelle moléculaire ⇨ 0.5 Å



Échelle microscopique ⇨ 5 µm



Échelle de la cellule de batterie ⇨ 2 mm



Échelle du pack batterie et du module ⇨ 2 cm

**FIGURE 1** Les échelles de modélisation vont de l'Ångström (10<sup>-10</sup> m) à l'échelle du module (1 m). Ici, les échelles sont illustrées par une cellule Li-ion cylindrique et par un pack de cellules cylindriques.

Les spécialistes des matériaux, les électrochimistes et les physiciens qui étudient de nouvelles chimies de batteries peuvent utiliser des modèles de dynamique moléculaire pour simuler et prédire le comportement de nouveaux matériaux et de nouvelles chimies pour les batteries. Ce type de recherche est généralement effectué dans les universités, les instituts de recherche, les laboratoires gouvernementaux et les laboratoires de R&D des fabricants de batteries.

La microstructure et les propriétés physiques des matériaux utilisés intéressent autant les instituts de recherche que les fabricants de batteries ou les équipementiers. Il en va de même pour le design des électrodes, de l'électrolyte, du séparateur et des collecteurs de courant qui constituent les cellules. Dans ces projets, la M&S est indispensable pour comprendre les facteurs permettant de concevoir une cellule de batterie adaptée à une application spécifique.

Les systèmes de batteries destinés aux véhicules électriques sont constitués de packs et de modules, dont la conception intéresse tout particulièrement les fabricants de batteries et les équipementiers. Les laboratoires gouvernementaux et les instituts de recherche sont souvent impliqués dans ce type de recherche, généralement pour des applications aérospatiales et de défense. La M&S est alors axée sur la compréhension et le dimensionnement des performances du système (densité d'énergie et densité de puissance), la gestion thermique, la sécurité et la durée de vie des batteries.

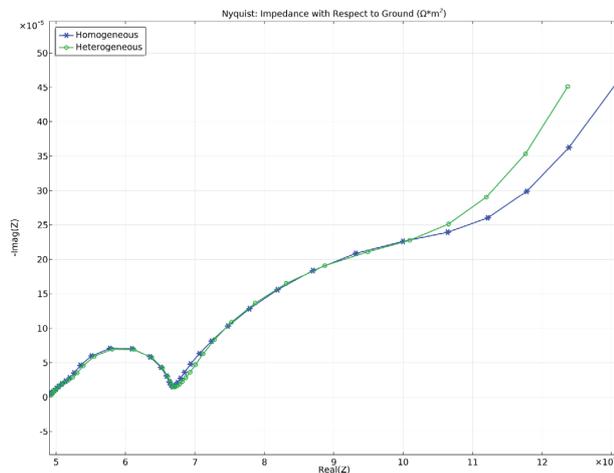
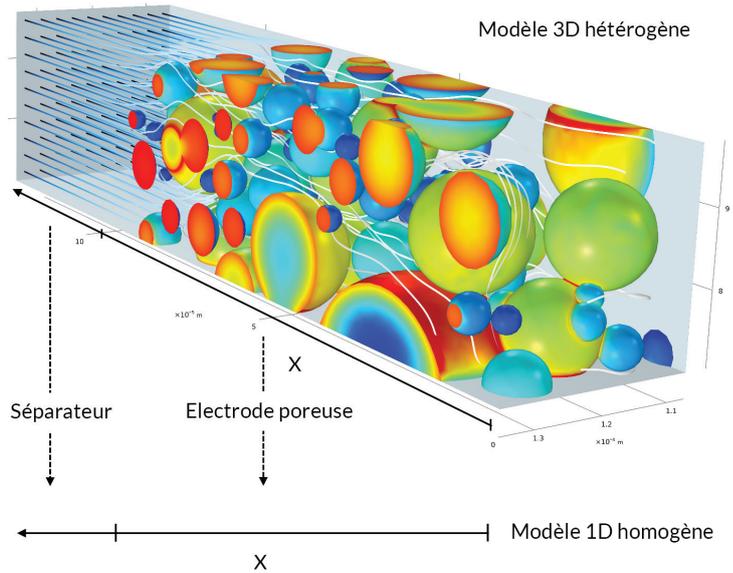
## MODELISATION MULTIPHYSIQUE

### Échelle microscopique

La modélisation d'une batterie à l'échelle microscopique repose sur les propriétés physicochimiques et la géométrie détaillée de la structure poreuse et de l'électrolyte des pores. La modélisation moléculaire peut servir à générer les données d'entrées des modèles microscopiques. Parmi celles-ci, on trouvera par exemple les constantes de vitesses et potentiels d'équilibre des électrodes, les propriétés de transport ainsi que diverses propriétés physicochimiques des matériaux qui constituent une batterie.

Les modèles microscopiques font intervenir le potentiel électrique des électrodes, le potentiel ionique de l'électrolyte, les concentrations des espèces chargées et des espèces neutres, et les réactions chimiques et électrochimiques. Ils permettent également d'accéder à la distribution de température et aux déformations mécaniques résultant de la dilatation thermique ou de la dilatation causée par le transport d'espèces chimiques. En d'autres termes, plusieurs phénomènes sont à prendre en compte pour décrire précisément le comportement du matériau constitutif de la batterie.

Les résultats issus de ces modèles sont essentiels pour comprendre les mécanismes de base qui régissent les performances et la durée de vie des batteries. Ils nous permettent également d'estimer de façon précise

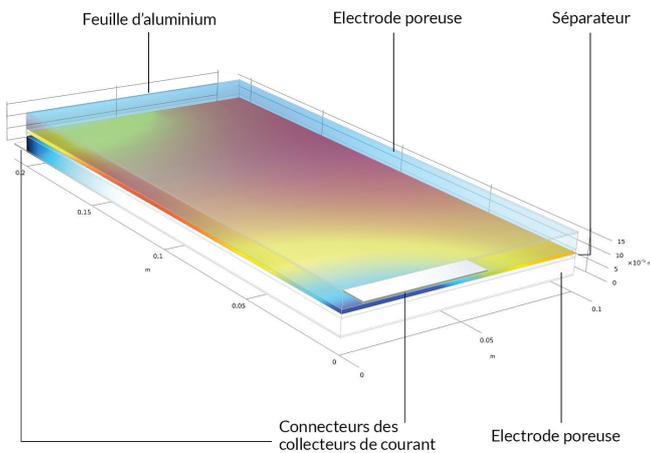


**FIGURE 2** Le modèle d'électrode hétérogène repose sur une représentation 3D de particules sphériques obtenues par analyse micrographique d'une électrode de batterie lithium-ion. Le modèle hétérogène peut ensuite être utilisé pour calculer la porosité, la surface spécifique et d'autres propriétés effectives, qui pourront être utilisées dans un modèle homogénéisé 1D de Newman où l'électrode est décrite comme une plaque homogène (en haut). Le diagramme de Nyquist montre que les résultats du modèle hétérogène détaillé et du modèle homogénéisé présentent un très bon accord, en particulier à haute fréquence. Dans ce cas, le modèle hétérogène valide le modèle homogène (en bas).

différentes quantités qui peuvent déterminer les performances d'une batterie, comme la densité d'énergie et la densité de puissance, l'impact des matériaux et des paramètres de conception, la distribution des réactions électrochimiques et la distribution de la température. En matière de durée de vie, il est possible d'évaluer les risques de court-circuit et de dysfonctionnement, la formation de sous-produits néfastes, les risques de fatigue et de défaillance structurelle. En outre, les modèles microscopiques permettent de développer des méthodes d'évaluation de l'état de santé d'une batterie. En effet, les pertes de performances et les défaillances se traduisent presque toujours d'abord par des phénomènes microscopiques, bien avant que l'état de santé ne transparaisse dans les performances globales d'une cellule.

### Échelle de la cellule de batterie avec la théorie des électrodes poreuses

Après l'échelle microscopique vient l'échelle de la cellule de batterie. Les électrodes poreuses sont alors décrites comme des plaques homogénéisées, où l'électrolyte des pores et les matériaux de l'électrode sont définis en tous points d'un même domaine géométrique (voir la figure 2 ci-dessus). Cela signifie que la structure de l'électrode est décrite à l'aide de paramètres effectifs tels que la fraction volumique d'électrolyte, la fraction volumique d'électrode et la tortuosité. Ces modèles utilisent la théorie dite de l'électrode poreuse développée par Newman et coauteurs qui est à la base de la modélisation des batteries à une échelle juste supérieure à l'échelle microscopique.



**FIGURE 3** Distribution de la densité de courant au centre du séparateur obtenue à l'aide d'un modèle 3D de cellule à poche de batterie lithium-ion. Le modèle utilise la théorie des électrodes poreuses de Newman et inclut les effets du vieillissement, tels que la croissance d'une interface électrolyte-solide (SEI). La cellule se compose de deux feuilles d'aluminium en haut et en bas de la figure, de deux électrodes poreuses (une positive et une négative) et d'un séparateur entre les électrodes. Les feuilles d'aluminium ont chacune une languette pour être connectées au circuit extérieur. Ce modèle de haute-fidélité est représentatif de ce qui peut être fait à l'échelle d'une cellule de batterie.

Les études à cette échelle portent sur des aspects similaires à ceux étudiés à l'échelle microscopique, mais pour une ou plusieurs cellules de batterie. Parmi les plus courants, citons l'impact sur les performances et la durée de vie de différents matériaux et différentes chimies ; la porosité des électrodes ; la surface spécifique des électrodes et des différents matériaux d'électrode (s'il y en a plusieurs dans la même électrode) ; les dimensions des collecteurs de courant, des électrodes et du séparateur ; les chargements mécaniques sur la cellule induits par la géométrie et la dilatation durant la charge et la décharge ; l'impact du système de gestion thermique ; et d'autres paramètres qui peuvent affecter la cellule de batterie.

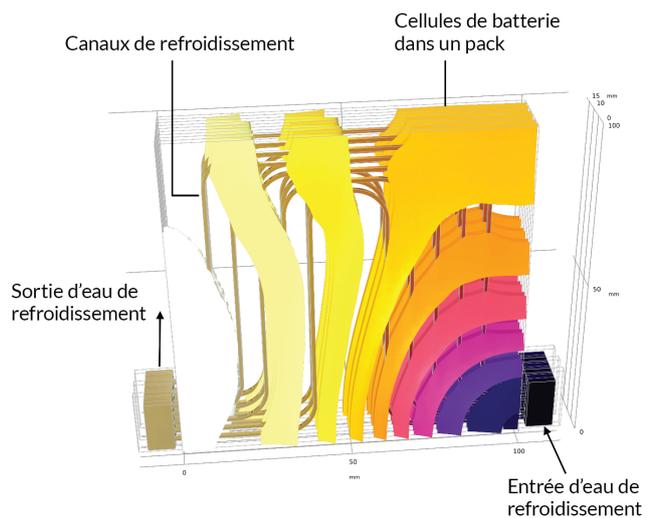
A cette échelle, les résultats de la M&S sont des estimations quantitatives des performances, des limites de performance et de la durée de vie. Ces estimations peuvent être obtenues à partir de résultats tels que la

distribution du courant et du potentiel, la distribution de la température, le dépôt de métal et les courts-circuits, la fatigue et les fissures dans les électrodes dues à la dilatation pendant la charge et la décharge, la formation de sous-produits et l'apparition de réactions secondaires réduisant la durée de vie de la cellule. Les caractéristiques, les propriétés et les prévisions quantitatives de ces modèles peuvent être validées à l'aide de modèles microscopiques détaillés. Les modèles de cellules de batterie peuvent en outre être reliés aux propriétés microscopiques détaillées de la batterie.

### Échelle du module et du pack de batterie

Les cellules de batteries individuelles peuvent faire partie d'un module ou d'un pack de batteries. Ces modules peuvent être constitués de dizaines ou de centaines de cellules. Nous ne sommes alors pas en mesure de modéliser chaque cellule de batterie en 3D en utilisant la théorie des électrodes poreuses. A la place, des modèles 0D et 1D sont utilisés pour décrire le comportement électrochimique de chaque cellule. Ces modèles peuvent être validés et reliés à des modèles plus détaillés de cellules de batterie. La géométrie 3D du module ou du pack de batterie est utilisée pour étudier la gestion thermique, les systèmes de conduction de courant externe et faire l'analyse mécanique du système de batterie. Les électrodes et les séparateurs sont décrits dans ce cas comme des matériaux homogènes dotés de propriétés mécaniques et thermiques effectives.

Les projets de M&S à cette échelle macroscopique se concentrent sur l'impact des matériaux constituant les modules et les packs, de la géométrie, des conditions de fonctionnement, du système de gestion thermique, du design mécanique et d'autres paramètres de conception.



**FIGURE 4** Section d'un module composé de cellules planes lithium-ion. Les canaux de refroidissement sont incorporés dans le module. Le champ d'écoulement et la distribution de la température sont couplés à l'électrochimie de chaque cellule, décrite à l'aide d'un modèle homogène 1D, comme le montre la figure 2 (en bas). Le modèle 1D pour chaque cellule est couplé au modèle de transfert de chaleur en 3D. Le modèle du pack est relié au modèle microscopique détaillé par le biais de la validation et de l'estimation de paramètres.

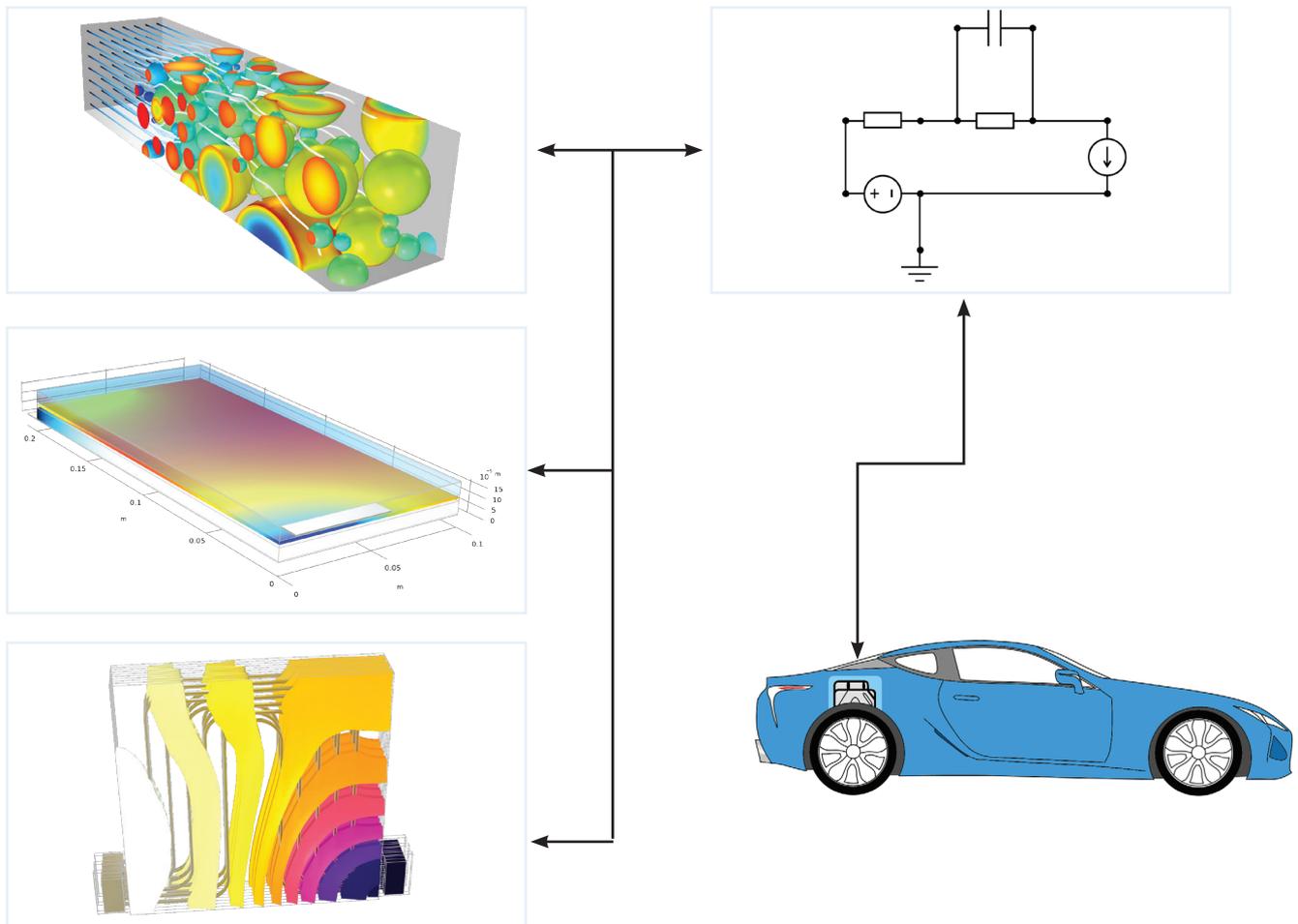
Les résultats les plus courants de ces modèles comprennent notamment la distribution de la température ; la distribution du courant et du potentiel entre les cellules individuelles ; l'effet de la température, de la charge et de la décharge sur la dilatation mécanique des différentes cellules ; l'effet de la dilatation et de la conception mécanique sur l'intégrité structurelle du module ou du pack batterie ; la distribution de température résultant du système de gestion thermique ; l'impact de la conception du système de conduction de courant externe et d'autres aspects pouvant influencer le module ou le pack batterie. Les modèles peuvent également être exploités pour concevoir des systèmes d'alerte préventive en cas de défaillance d'une cellule de batterie et d'emballage thermique dans un système de batteries.

**PERSPECTIVES ET CONCLUSIONS**

Le degré de sophistication d'un modèle de système de batterie dépend de l'objectif du modèle lui-même. Les modèles microscopiques sont très détaillés et visent une compréhension fine du cœur de la batterie. Un modèle utilisé pour le contrôle d'un pack batterie faisant partie du

groupe motopropulseur d'un véhicule électrique ne peut pas avoir le même degré de sophistication. Il peut dans ce cas s'agir de modèles réduits ne décrivant pas réellement la physique du système.

Cependant, même pour les grands systèmes de batteries, il convient de disposer de méthodes sophistiquées de détection précoce des défaillances et de mesure de l'état de santé. Ces méthodes peuvent reposer les unes sur les autres et être reliées entre elles, qu'il s'agisse de modèles réduits ou de modèles microscopiques. On peut alors imaginer que ces modèles de haute-fidélité fassent partie d'un jumeau numérique central, hébergé dans un serveur central, et décrivant un module ou un pack batterie particulier. L'objectif est d'être capable de détecter toute perte de performance, même minimale, bien avant la défaillance du système. On doit donc être capable de comprendre et d'expliquer physiquement la raison de la défaillance et de la baisse de performance, si l'on souhaite pouvoir améliorer la détection, la conception, le contrôle et le fonctionnement d'un système de batterie. La M&S multiphysique offre une chaîne ininterrompue de validation qualitative et quantitative d'un système de batterie, de l'échelle macroscopique jusqu'à l'échelle microscopique du cœur de la batterie.



**FIGURE 5** Tous les niveaux de sophistication doivent être intégrés d'une manière ou d'une autre dans la modélisation d'une batterie de véhicule électrique ou hybride. Il peut s'agir de modèles réduits validés et reliés aux propriétés fondamentales des cellules de la batterie issus de modèles plus sophistiqués, faisant tous partie d'un jumeau numérique hébergé sur un serveur central. Dans cet exemple, le modèle réduit est représenté par un circuit équivalent, mais il peut également s'agir d'un modèle avancé de type table de conversion obtenu à l'aide de techniques d'apprentissage automatique.

[www.comsol.fr](http://www.comsol.fr)

 COMSOL