

Optimisation géométrique d'un modèle de batterie lithium-ion

Richard JOLY, CMAP, Ecole Polytechnique - Palaiseau
 Grégoire ALLAIRE, CMAP, Ecole Polytechnique - Palaiseau
 Romain DE LOUBENS, TotalEnergies OneTech - Palaiseau

Le modèle homogénéisé de Doyle, Fuller et Newman [3] (DFN) constitue le fondement de nombreux logiciels académiques [4] et industriels, utilisés pour simuler le fonctionnement d'une batterie lithium-ion. En étudiant une cellule de batterie $\Omega = \Omega_{\text{anode}} \cup \Omega_{\text{separator}} \cup \Omega_{\text{cathode}}$, soumise à un courant constant pendant une décharge, notre objectif est d'optimiser la géométrie des interfaces séparant les électrodes du séparateur, en minimisant une fonction dépendante de cette géométrie.

Les équations multi-échelles du modèle DFN, dérivées de la théorie des électrodes poreuses, forment un système couplé. Il est constitué de deux équations de diffusion non stationnaires, l'une à l'échelle macroscopique pour la concentration en lithium dans l'électrolyte liquide (c_e) et la seconde, à l'échelle microscopique, pour la concentration en lithium dans la phase solide (c_s).

$$\epsilon_e \frac{\partial c_e}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{D}_{e,\text{eff}} \nabla c_e) = -\frac{t_+^0}{F} \nabla \cdot \mathbf{i}_e + \frac{a_s i_{se}}{F} \quad \text{in } \Omega \times [0, T_{\text{max}}] \quad (1)$$

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(D_s r^2 \frac{\partial c_s}{\partial r} \right) \quad \text{in } B_R \times [0, T_{\text{max}}] \quad (2)$$

Deux équations elliptiques stationnaires à l'échelle macroscopique terminent de compléter ce couplage. Celle du potentiel ionique électrolytique (φ_e) et celle du potentiel électrique dans la phase solide (ϕ_s).

$$-\nabla \cdot \mathbf{i}_e + a_s i_{se} = 0, \quad \mathbf{i}_e = -\mathbf{\Lambda}_{e,\text{eff}} \nabla \varphi_e + \frac{2RT(1 - t_+^0)(1 + \delta_e)}{F} \mathbf{\Lambda}_{e,\text{eff}} \nabla \ln c_e \quad \text{in } \Omega \times [0, T_{\text{max}}] \quad (3)$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{\Lambda}_{s,\text{eff}} \nabla \phi_s) = a_s i_{se} \quad \text{in } \Omega_{\text{anode}} \cup \Omega_{\text{cathode}} \times [0, T_{\text{max}}] \quad (4)$$

Le terme source de ces équations i_{se} est une fonction dépendante de l'ensemble des variables susmentionnées et est exprimée au moyen de la relation de Butler-Volmer. A ces équations, des conditions limites sont ajoutées ainsi que des conditions de continuité aux interfaces. La microstructure de la phase solide de chacune des électrodes poreuses est composée d'une matière active, qui est représentée par une boule B_R de rayon R . Enfin, ϵ_e , a_s , $\mathbf{\Lambda}_{e,\text{eff}}$, $\mathbf{\Lambda}_{s,\text{eff}}$ et $\mathbf{D}_{e,\text{eff}}$ sont des coefficients homogénéisés du modèle et D_s , t_+^0 et δ_e représentent des paramètres matériaux intrinsèques.

Nous proposons ici une implémentation de la version dite pseudo-3D (P3D) du modèle DFN, qui combine les méthodes d'éléments finis et des différences finies en utilisant les langages FreeFem et C++. Associée à l'application d'outils d'optimisation géométrique [1] aux interfaces des électrodes, cette implémentation nous permet de calculer un gradient de forme grâce à la méthode de l'adjoint et d'appliquer un algorithme de flot de gradient [2] pour minimiser une fonction de performance sous contraintes géométriques.

Ces calculs représentent une première étape vers une optimisation géométrique et topologique complète de la cellule de batterie, comprenant l'optimisation de la microstructure poreuse au sein de chaque électrode.

- [1] G. Allaire, C. Dapogny, F. Jouve. *Shape and topology optimization*. In *Handbook of numerical analysis*, vol. 22, pp. 1–132. Elsevier, 2021.
- [2] F. Feppon, G. Allaire, C. Dapogny. *Null space gradient flows for constrained optimization with applications to shape optimization*. ESAIM : Control, Optimisation and Calculus of Variations, **26**, 90, 2020.
- [3] T. F. Fuller, M. Doyle, J. Newman. *Simulation and optimization of the dual lithium ion insertion cell*. Journal of the electrochemical society, **141**(1), 1, 1994.
- [4] V. Taralova, O. Iliev, Y. Efendiev. *Derivation and numerical validation of a homogenized isothermal Li-ion battery model*. J. Eng. Math., **101**, 1–27, 2016. doi :10.1007/s10665-015-9842-6.