

Comparativo entre materiais de mudança de fase (PCM) para aprimorar a gestão térmica em baterias de carros elétricos

Comparison between phase change materials (PCM) to improve thermal management in electric car batteries

Yuri Werner Ott¹, Fábio Junior Rommel², Walmor Cardoso³, Emilson Ribeiro Viana⁴

RESUMO

Esse trabalho compara diferentes materiais de mudança de fase para auxiliar o controle térmico de células de bateria utilizadas em veículos elétricos por meio de simulação multifísica. A bateria utilizada possui a química NMC 523 e, devido à sua alta capacidade de armazenamento de energia, requer um controle térmico adequado para garantir uma operação segura. Nesse caso, foram selecionados seis materiais de mudança de fase, sendo um deles a parafina, dois materiais comerciais da empresa *Rubitherm* e três à base de polietileno de alta densidade, com variações na concentração de grafite em suas estruturas. Assim, foi necessária uma pesquisa para determinar os valores do calor específico, calor latente, densidade e condutividade térmica que servirão como *input* para o software de simulação *Ansys Fluent*[®]. Foram realizadas simulações do comportamento térmico da célula, para descargas lineares de 0,5 C a 2,0 C. Foi possível concluir que o uso dos materiais à base de polietileno são mais eficientes em manter a temperatura das baterias, enquanto os materiais a base de parafina são menos eficientes causando um aumento da temperatura, com possibilidade de iniciar o processo de avalanche térmica, *thermal runaway*.

PALAVRAS-CHAVE: Controle Térmico, *Pack* de Baterias, PCM, Simulação Multifísica.

ABSTRACT

This work compares different phase change materials to aid the thermal control of battery cells used in electric vehicles through multiphysics simulation. The battery operated has NMC 523 chemistry and requires adequate thermal management to ensure safe operation due to its high energy storage capacity. In this case, six-phase change materials were selected, one of them being paraffin, two commercial materials from the company *Rubitherm*, and three based on high-density polyethylene, with variations in the concentration of graphite in their structures. Thus, research was necessary to determine the values of specific heat, latent heat, density, and thermal conductivity that will be input for the simulation software *Ansys Fluent*[®]. The cell's thermal behavior was simulated for linear discharges from 0.5 C to 2.0 C. It was possible to conclude that using polyethylene-based materials is more efficient in maintaining the battery temperature. In contrast, materials based on paraffin are less efficient, causing an increase in temperature, with the possibility of starting the thermal avalanche process of *thermal runaway*.

KEYWORDS: Thermal control; Battery pack; PCM; Multiphysics simulation.

¹Bolsista da FUNTEF-PR (Projeto Rota 2030). Departamento Acadêmico de Física. Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, Paraná, Brasil. E-mail: ott@alunos.utfpr.edu.br. ID Lattes: <http://lattes.cnpq.br/4382889650944686>.

²Mestre pelo Programa de Pós-Graduação em Física e Astronomia. Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, Paraná, Brasil. E-mail: fabiorommel@alunos.utfpr.edu.br. ID Lattes: <http://lattes.cnpq.br/1527581350191659>.

³Docente no Departamento Acadêmico de Física. Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, Paraná, Brasil. E-mail: walmorgodoi@professores.utfpr.edu.br. ID Lattes: <http://lattes.cnpq.br/1099680203756198>.

⁴Docente no Departamento Acadêmico de Física. Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, Paraná, Brasil. E-mail: emilsonjunior@professores.utfpr.edu.br. ID Lattes: <http://lattes.cnpq.br/6034855461324993>.

INTRODUÇÃO

Com a crescente compreensão global em relação às mudanças climáticas, desencadeadas pela emissão de gases tóxicos na atmosfera, a busca por alternativas viáveis de mobilidade e energia vem crescendo ao decorrer dos anos. No setor automobilístico, o uso de carros elétricos e híbridos estão sendo mais incentivados pois são movidos por meio de baterias carregáveis com uma longa vida útil (FERNANDES; GOMES, 2019). Os veículos elétricos (VEs) utilizam baterias de íons de lítio como fonte principal de armazenamento de energia. Essa tecnologia é reconhecida por sua alta densidade energética e eficiência ao movimentar o veículo por meio da transformação química em elétrica que acaba movimentando um motor elétrico.

Devido à sua alta capacidade energética, as baterias acabam gerando muito calor, podendo superaquecer e desencadear um processo conhecido como avalanche térmica ou "*thermal runaway*". Isso ocorre quando a temperatura aumenta de forma descontrolada devido a um curto-circuito interno, defeito ou exposição a condições extremas (PENG; JIANG, 2016). Portanto, torna-se necessário que, em alguns casos, os chamados *packs* de baterias possuam algum tipo de controle térmico, seja ele ativo, trocas de calor com ar ou líquidos em movimento, ou passivo, utilizando materiais de mudança de fase (PCM - *Phase Change Material*) materiais que alteram o seu estado físico, absorvendo calor quando necessário.

O controle térmico de um *pack* de baterias de íons de lítio representa um dos desafios mais significativos no desenvolvimento de veículos elétricos, com potencial impacto no desempenho, na durabilidade das baterias e na segurança do veículo. A utilização de materiais de mudança de fase para gerenciamento térmico passivo surge como uma solução eficaz para regular o fluxo de calor e, portanto, a temperatura das baterias (BUCHMANN, 2019).

A simulação multifísica (SM) é um procedimento computacional capaz de abordar diversas questões físicas por meio de simulações computacionais. A compreensão do comportamento térmico, bem como dos processos de carga e descarga, é fundamental e requer a aplicação da SM. Desta maneira, o trabalho da SM possibilita a análise do comportamento térmico sem a necessidade de manuseio direto de materiais, fornecendo condições seguras para a realização de testes que envolvem riscos potenciais à segurança (FARIAS et al., 2014).

Com base na necessidade do uso de materiais de mudança de fase em baterias com alta densidade energética, foi realizado um estudo científico que consiste em comparar seis tipos de PCMs aplicados a bateria de química NMC 523 (50% Níquel, 20% Manganês e 30% Cobalto), por meio de simulações multifísicas utilizando o *software ANSYS FLUENT*.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Para a realização da pesquisa, inicialmente foram definidos parâmetros de seleção para os PCMs. Esses parâmetros incluíam a necessidade de que o PCM permanecesse dentro da faixa de temperatura adequada para o funcionamento das baterias NMC 523, que variam de -20°C a 55°C . Além disso, foram considerados critérios como a alta capacidade de absorção de calor, estabilidade química, baixo custo, disponibilidade em grande escala, adaptabilidade a diferentes configurações de *packs* de baterias, leveza e,

acima de tudo, a não inflamabilidade. Essas diretrizes orientaram a seleção dos materiais mais adequados para a pesquisa que consistiu em selecionar trabalhos acadêmicos realizados entre os períodos de 2015 até os dias de hoje.

Por meio da leitura e análise dos trabalhos investigados, foi realizada uma seleção de seis tipos de materiais como PCMs. Dentre eles a parafina, dois materiais comerciais RT-44-HC e RT-70-HC da empresa *Rubitherm* e três a base do polietileno de alta densidade com variações na concentração de grafite em suas estruturas de 10%, 20% e 40% de grafite (PEHD 10%, 20% e 40%).

Em virtude de sua ampla disponibilidade, a parafina é frequentemente escolhida como o material principal para o controle térmico, sendo uma substância simples, leve e de notável resistência química. No entanto, foi observado que a parafina não modificada em sua composição é facilmente inflamável, o que requer a incorporação de outros materiais em sua composição, conhecidos como *composites* para ajustar o ponto de fusão e manter a temperatura constante.

Os materiais comerciais da *Rubitherm* são compostos de parafina e foram modificados para adquirir características desejáveis, como alta estabilidade térmica, capacidade de armazenamento de calor e longa vida útil, além de serem facilmente adaptáveis. No entanto, esses materiais têm um custo elevado de obtenção e importação e a baixa condutividade térmica, que podem prejudicar a distribuição de calor em *packs* de baterias.

Os polietilenos de alta densidade são materiais acessíveis e de baixo custo, caracterizados por sua alta capacidade de armazenamento de calor e longa vida útil. No entanto, para serem utilizados como materiais de mudança de fase, é necessária a incorporação de grafite em sua composição, o que resulta em um aumento na condutividade térmica. Isso, por sua vez, tem como consequência o aumento da densidade do material, o que pode resultar em um aumento significativo no peso do *pack* de baterias.

Quadro 1 – Informações dos PCMs

Parâmetro	Parafina	RT-44-HC	RT-70-HC	PEHD-10%	PEHD-20%	PEHD-40%
Densidade (kg/m ³)	887	800	880	1080	1210	1465
Calor Específico (j/kg.K)	2800	2000	2600	1560	1390	1130
Condutividade Térmica (W/m.K)	0,250	0,200	0,200	0,916	1,378	6,537
Ponto de Fusão (°C)	50	41-44	69-71	130	130	130

Fonte: Elaborado pelos autores (2023).

A bateria designada para o projeto corresponde a NMC **523**, uma composição química fabricada pela empresa *SUNWODA*, cujo cátodo é composto por **50%** de níquel, **20%** de cobalto e **30%** de manganês. Esta bateria apresenta uma capacidade nominal de 105 Ah para descargas de 1 C, com uma corrente de descarga de 105 A, e possui uma tensão nominal de 3,7 V, juntamente com uma densidade energética de 212 Wh/kg. É

importante notar que essas baterias são seguras em uma ampla faixa de temperatura, variando de -20°C a 55°C , e têm uma vida útil mínima de 1500 ciclos (SUNWODA, 2023).

Para realizar as simulações do comportamento térmico das células de bateria, foi adotado o método de solução *Multi-Scale Multi-Domain* (MSMD) e o modelo eletroquímico NTGK, Newman, Tiedemann, Gu e Kim (ANSYS,2022). As configurações do modelo NTGK são valores que levam em consideração as características químicas das baterias durante as simulações, tanto durante os processos de carga quanto de descarga. Nesse sistema, é essencial obter as configurações de U e Y do modelo NTGK, pois elas exercem influência direta sobre as curvas de carga e descarga, impactando, consequentemente, o comportamento térmico da bateria.

As equações matemáticas para as parâmetros empíricos de adaptação U e Y dependem da profundidade de descarga (DoD), das constantes de correção (C_1 e C_2), das temperaturas de referência e experimentais (T_{ref} e T), da densidade de corrente (j) e dos coeficientes de abuso térmico (a_n e b_n). Estes coeficientes são propriedades diretamente relacionadas com o comportamento térmico das baterias, conforme ilustrado nas Equações (1) e (2) (ANSYS,2022).

$$U = \left(\sum_{n=0}^5 a_n (DoD)^n \right) - C_2 (T - T_{ref}) \quad (1)$$

$$Y = \left(\sum_{n=0}^5 b_n (DoD)^n \right) \exp \left[-C_1 \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}} \right) \right] \quad (2)$$

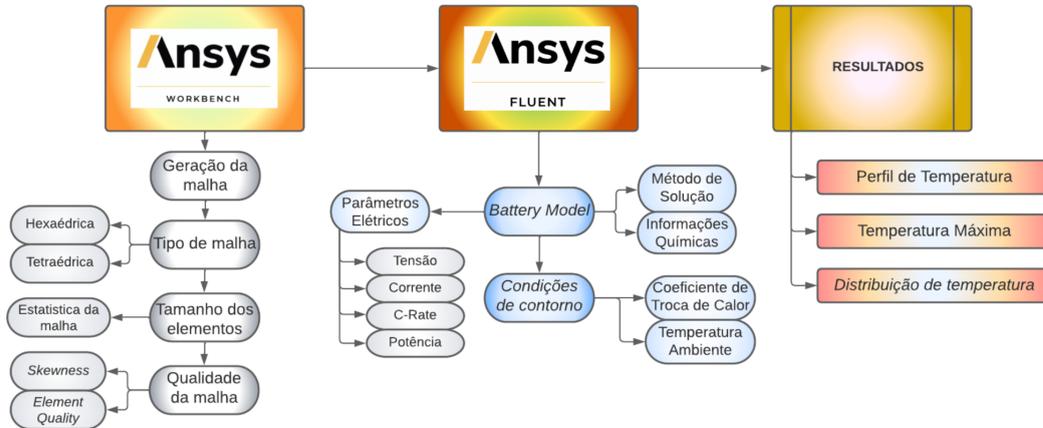
No qual a densidade de descarga da bateria pode ser calculada a partir da Equação (3).

$$DoD = \frac{Vol}{3600Q_{nominal}} \int_0^t j dt \quad (3)$$

onde (Q) é a carga nominal da célula a ser simulada e (Vol) o volume das zonas ativas da bateria.

A realização efetiva da simulação foi dividida em três etapas, conforme ilustrado na Figura 1. Inicialmente, foi realizada a definição das malhas e a criação dos desenhos em CAD 3D utilizando o *software Ansys Workbench*[®]. Com os desenhos concluídos, a simulação térmica e os ciclos de carga e descarga das baterias foram realizados utilizando o *software Ansys Fluent*[®], onde foram inseridos os valores dos parâmetros U e Y, bem como os PCMs necessários para a simulação. Deste modo, os resultados desejados foram obtidos por meio dos perfis de temperatura nas células das baterias e da temperatura máxima de distribuição.

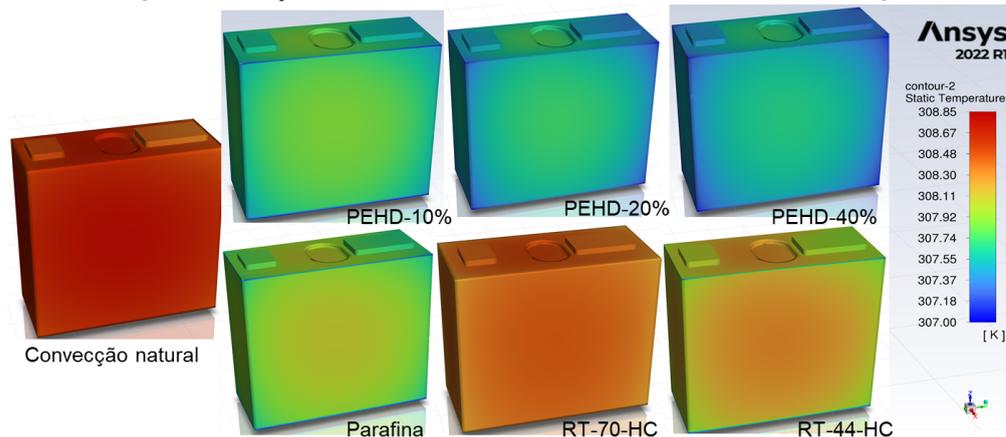
Figura 1 – Etapas da Simulação



Fonte: Elaborado pelos autores (2023).

Para identificar o comportamento térmico das baterias e realizar uma comparação entre os PCMs, a simulação foi dividida em sete etapas. Nessa análise, investigou-se o comportamento térmico de uma célula, considerando a convecção natural, e também com o uso de seis PCMs com 4mm de espessura ao redor da bateria. Foram realizadas sete simulações de descarga independentes, com o objetivo de avaliar o comportamento térmico da célula de bateria em diferentes taxas de descarga, variando de 0,5 C a 2 C. Cada simulação de descarga teve uma duração de 7000 segundos, e à medida que a descarga ocorria, a temperatura da célula aumentava. Assim, foi possível simular o comportamento térmico individual de cada célula de bateria, conforme ilustrado na Figura 2.

Figura 2 – Distribuição de temperatura das baterias com PCMs e com convecção natural



Fonte: Elaborado pelos autores (2023).

Os PCMs derivados do polietileno demonstraram um desempenho térmico superior em comparação com os outros PCMs devido à maior condutividade térmica resultante da presença de grafite em sua composição. Neste contexto, o PEHD-40% se destacou como o melhor na gestão térmica, devido à sua maior quantidade de grafite na composição. Em uma taxa de descarga de 2 C, o PEHD-40% reduziu a temperatura da bateria em até 2°C, mantendo a célula dentro da faixa segura de operação. Por outro lado, a célula com

convecção natural apresentou o pior desempenho na gestão térmica devido à sua baixa condutividade térmica, isolando a temperatura da bateria e causando seu aumento conforme mostrado na Figura 2.

Agradecimentos

Este trabalho foi financiado pela Chamada Pública Fundep Rota 2030 nº 01/2020, Acordo #27192.03.01/2020.16-00. Agradecimentos a FUNTEF-PR, Renault do Brasil e UTFPR-CT.

Conflito de interesse

Não há conflito de interesses.

REFERÊNCIAS

ANSYS, I. **Ansys Fluent Theory Guide**. Release 2022-r1. [S.l.], 2022.

BUCHMANN, I. **Types of Battery Cells**. 2019. Battery University. Acesso: 08 de fev de 2023. Disponível em: <https://batteryuniversity.com/article/bu-301a-types-of-battery-cells>.

FARIAS, A. M. et al. Novas formulações de elementos finitos e simulações multifísicas. [sn], 2014.

FERNANDES, G.; GOMES, C. E. P. d. S. A soundless path: sinergia entre o futuro da mobilidade e o setor elétrico. **BOLETIM DE CONJUNTURA DO SETOR ENERGÉTICO**, FGV Energia, v. 9, p. 34–39, 2019.

KIM, U. S. et al. Modeling the dependence of the discharge behavior of a lithium-ion battery on the environmental temperature. **Journal of The Electrochemical Society**, IOP Publishing, v. 158, n. 5, p. A611, 2011.

KWON, K. H. et al. A two-dimensional modeling of a lithium-polymer battery. **Journal of Power Sources**, Elsevier, v. 163, n. 1, p. 151–157, 2006.

LIU, Y.; LIAO, Y. G.; LAI, M.-C. Transient temperature distributions on lithium-ion polymer sli battery. **Vehicles**, MDPI, v. 1, n. 1, p. 127–137, 2019.

LOWE, M. et al. Lithium-ion batteries for electric vehicles. **The US Value Chain, Contributing CGGC researcher: Ansam Abayechi**, 2010

PENG, P.; JIANG, F. Thermal behavior analyses of stacked prismatic licoo2 lithium-ion batteries during oven tests. **International journal of heat and mass transfer**, Elsevier, v. 88, p. 411–423, 2015.

PENG, P.; JIANG, F. Thermal safety of lithium-ion batteries with various cathode materials: A numerical study. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 103, p. 1008–1016, 2016.

SUNWODA, E. C. L. **Ev Battery**. 2023. Sunwoda. Acessado: 18 de mar de 2023. Disponível em: <https://en.sunwoda.com/list/4.html>.