

Dr. Javier Marco Gimeno



Proyecto: Generación de modelos computacionales para predicción de fenómenos de fuga térmica en baterías de ion-litio basadas en tecnologías actuales y futuras

Resumen:

El proyecto propone el desarrollo de modelos computacionales avanzados para simular y predecir el fenómeno de fuga térmica en baterías de ion-litio, un riesgo crítico en la electrificación del transporte. Mediante una combinación de ensayos experimentales y modelado multifísico en 0D y 3D, se busca entender los mecanismos internos que provocan este fenómeno, incluyendo la generación de calor y gases inflamables, así como su propagación entre celdas. El objetivo final es validar estos modelos con datos reales, analizar métodos de prevención y aplicar el conocimiento tanto a baterías actuales como a tecnologías futuras como las de estado sólido, contribuyendo así a mejorar la seguridad en vehículos eléctricos.

Desarrollo:

El trabajo desarrollado se ha centrado en el diseño, implementación y validación de modelos computacionales avanzados en escalas cero-dimensionales, unidimensionales y tridimensionales, orientados a reproducir fielmente el fenómeno de la fuga térmica en celdas de ion-litio de última generación. Esta metodología combina la caracterización de las cinéticas químicas internas que provocan la degradación de los componentes de la batería con simulaciones de dinámica de fluidos para analizar la eyección de gases inflamables, el aumento de presión y la posterior transferencia de calor hacia otras celdas a nivel de módulo. El valor fundamental de este desarrollo radica en que todas las herramientas analíticas creadas han sido calibradas y validadas con datos experimentales reales obtenidos mediante ensayos de calorimetría de tasa acelerada, lo que garantiza que las simulaciones replican con absoluta fiabilidad el comportamiento físico y químico del fenómeno.

Los modelos de simulación validados constituyen el eslabón previo e indispensable para su implementación en modelos de Inteligencia Artificial, ya que funcionan como un motor generador de datos sintéticos de alta fidelidad. Dado que ensayar la fuga térmica en un laboratorio real implica altos riesgos, costes elevados y la destrucción de los equipos, resulta casi imposible obtener bases de datos experimentales lo suficientemente grandes como para entrenar modelos de IA. El trabajo computacional ya realizado resuelve esta limitación al permitir la creación segura y automatizada de miles de escenarios virtuales donde se combinan diferentes estados de carga, temperaturas ambientales, tasas de degradación y disposiciones geométricas, estructurando de este modo las matrices de datos masivas que la inteligencia artificial requiere para aprender los patrones de fallo.

La disponibilidad de este volumen de información estructurada abre el camino hacia la creación de modelos de orden reducido (ROM por sus siglas en inglés) basados en inteligencia artificial, capaces de sustituir simulaciones físicas que habitualmente exigen cientos de horas de cómputo por algoritmos de redes neuronales que estiman las mismas variables en cuestión de milisegundos. Esta drástica reducción del tiempo de cálculo permite que la lógica física validada en este proyecto pueda trasladarse a los sistemas de gestión de baterías comerciales mediante gemelos digitales híbridos, procesando variables operacionales ordinarias en tiempo real y anticipando firmas térmicas anómalas minutos antes de que ocurra un accidente. Asimismo, todo el conocimiento y la estructura de datos consolidada para químicas actuales sirve como una base sólida de aprendizaje por transferencia, facilitando que la inteligencia artificial extrapole estos comportamientos hacia tecnologías del futuro, como las baterías de estado sólido, sin necesidad de replicar costosas campañas de ensayos destructivos.

Publicaciones relacionadas:

<https://doi.org/10.1016/j.jaecs.2025.100375>

<https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2025.127536>

<https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2025.128934>