

Universidade Federal de Campina Grande Centro de Engenharia Elétrica e Informática Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica

Dissertação de Mestrado

Gêmeos Digitais para Baterias de Veículos Elétricos

Sávio Alves de Oliveira

Campina Grande, Paraíba, Brasil ©Sávio Alves de Oliveira, Março de 2025

Sávio Alves de Oliveira

Gêmeos Digitais para Baterias de Veículos Elétricos

Dissertação de Mestrado submetida à Coordenadoria do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica da Universidade Federal de Campina Grande - Campus de Campina Grande como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências no Domínio da Engenharia Elétrica.

Antonio Marcus Nogueira Lima, Dr. Orientador

Rafael Bezerra Correia Lima, D.Sc.

Orientador

Campina Grande, Paraíba, Brasil, Março de 2025

O48g Oliveira, Sávio Alves de. Gêmeos digitais para baterias de veículos elétricos / Sávio Alves de Oliveira - Campina Grande, 2025. 124 f. : il. color. Dissertação (Mestrado em Engenharia Elétrica) - Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Engenharia Elétrica e Informática, 2025. "Orientação: Prof. Dr. Antonio Marcus Nogueira Lima, Prof. Dr. Rafael Bezerra Correia Lima". Referências. 1. Engenharia Elétrica. 2. Veículos Elétricos. 3. Gêmeos Digitais. 4. Baterias de Íons de Lítio. 5. Modelo Eletroquímico. 6. Estimativa de Estado de Carga. 7. Filtro de Kalman Estendido. I. Lima, Antonio Marcus Nogueira. II. Lima, Rafael Bezerra Correia. III. Título. CDU 621.3(043) FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECÁRIA ITAPUANA SOARES DIAS GONÇALVES CRB-15/093

Sávio Alves de Oliveira

Gêmeos Digitais para Baterias de Veículos Elétricos

Dissertação de Mestrado submetida à Coordenadoria do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica da Universidade Federal de Campina Grande - Campus de Campina Grande como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências no Domínio da Engenharia Elétrica.

Aprovado em 31 Março de 2025

Antonio Marcus Nogueira Lima, Dr. Orientador

Rafael Bezerra Correia Lima, D.Sc. Orientador

Eisenhawer de Moura Fernandes, Dr. Avaliador

Saulo Oliveira Dornellas Luiz, D.Sc. Avaliador

Campina Grande, Paraíba, Brasil, Março de 2025



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE POS-GRADUACAO EM ENGENHARIA ELETRICA Rua Aprigio Veloso, 882, - Bairro Universitario, Campina Grande/PB, CEP 58429-900

REGISTRO DE PRESENÇA E ASSINATURAS

1 - ATA DA DEFESA PARA CONCESSÃO DO GRAU DE MESTRE EM ENGENHARIA ELÉTRICA, REALIZADA EM 31 DE MARÇO DE 2025

(Nº 776)

CANDIDATO(A): SÁVIO ALVES DE OLIVEIRA. COMISSÃO EXAMINADORA: EISENHAWER DE MOURA FERNANDES, D.Sc., UFCG - Presidente da Comissão e Examinador Interno, ANTONIO MARCUS NOGUEIRA LIMA, Dr., UFCG -Orientador, RAFAEL BEZERRA CORREIA LIMA, D.Sc., UFCG - Orientador, SAULO OLIVEIRA DORNELLAS LUIZ, D.Sc., UFPE - Examinador Externo. TÍTULO DA DISSERTAÇÃO: GÊMEOS DIGITAIS PARA BATERIAS DE VEÍCULOS ELÉTRICOS. ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: Processamento da Informação. HORA DE INÍCIO: **08h00** – LOCAL: **Sala Virtual, conforme Art. 5º da PORTARIA SEI Nº 01/PRPG/UFCG/GPR, DE 09 DE MAIO DE 2022..** Em sessão pública, após exposição de cerca de 45 minutos, o(a) candidato(a) foi arguido(a) oralmente pelos membros da Comissão Examinadora, tendo demonstrado suficiência de conhecimento e capacidade de sistematização, no tema de sua dissertação, obtendo o conceito APROVADO. Face à aprovação, declara o(a) presidente da Comissão, achar-se o examinado, legalmente habilitado a receber o Grau de Mestre em Engenharia Elétrica, cabendo a Universidade Federal de Campina Grande, como de direito, providenciar a expedição do Diploma, a que o(a) mesmo(a) faz jus. Na forma regulamentar, foi lavrada a presente ata, que é assinada por mim, LEANDRO FERREIRA DE LIMA, e os membros da Comissão Examinadora. Campina Grande, 31 de Março de 2025.

LEANDRO FERREIRA DE LIMA Secretário

EISENHAWER DE MOURA FERNANDES, D.Sc., UFCG Presidente da Comissão e Examinador Interno

ANTONIO MARCUS NOGUEIRA LIMA, Dr., UFCG Orientador

RAFAEL BEZERRA CORREIA LIMA, D.Sc., UFCG Orientador

SAULO OLIVEIRA DORNELLAS LUIZ, D.Sc., UFPE Examinador Externo

SÁVIO ALVES DE OLIVEIRA Candidato

2 - APROVAÇÃO

2.1. Segue a presente Ata de Defesa de Dissertação de Mestrado da candidato SÁVIO ALVES DE OLIVEIRA, assinada eletronicamente pela Comissão Examinadora acima identificada.

2.2. No caso de examinadores externos que não possuam credenciamento de usuário externo ativo no SEI, para igual assinatura eletrônica, os examinadores internos signatários **certificam** que os examinadores externos acima identificados participaram da defesa da tese e tomaram conhecimento do teor deste documento.



Documento assinado eletronicamente por **LEANDRO FERREIRA DE LIMA**, **SECRETÁRIO (A)**, em 31/03/2025, às 14:40, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 8º, caput, da <u>Portaria SEI nº 002, de 25 de outubro de 2018</u>.



Documento assinado eletronicamente por **RAFAEL BEZERRA CORREIA LIMA**, **PROFESSOR(A) DO MAGISTERIO SUPERIOR**, em 31/03/2025, às 15:02, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 8º, caput, da <u>Portaria SEI nº 002, de 25 de outubro de 2018</u>.



Documento assinado eletronicamente por **ANTONIO MARCUS NOGUEIRA LIMA**, **PROFESSOR(A) DO MAGISTERIO SUPERIOR**, em 01/04/2025, às 02:19, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 8º, caput, da <u>Portaria SEI nº 002, de 25 de outubro de 2018</u>.



Documento assinado eletronicamente por **Sávio Alves de Oliveira**, **Usuário Externo**, em 01/04/2025, às 15:57, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 8º, caput, da <u>Portaria SEI nº 002, de 25 de outubro</u> <u>de 2018</u>.



Documento assinado eletronicamente por **EISENHAWER DE MOURA FERNANDES**, **PROFESSOR(A) DO MAGISTERIO SUPERIOR**, em 03/04/2025, às 15:10, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 8º, caput, da <u>Portaria SEI nº 002, de 25 de outubro de 2018</u>.



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site <u>https://sei.ufcg.edu.br/autenticidade</u>, informando o código verificador **5346480** e o código CRC **EB12C681**.

Referência: Processo nº 23096.017511/2025-19

SEI nº 5346480

Aos meus pais, que sempre foram minha fonte de inspiração, orientação e amor incondicional.

Resumo

Este trabalho apresenta o desenvolvimento de um gêmeo digital para baterias de íons de lítio, empregadas em veículos elétricos terrestres de uso urbano, visando monitorar variáveis como estado de carga e estado de temperatura. A metodologia proposta combina modelos eletroquímicos de ordem reduzida, modelos de circuito equivalente e modelos térmicos, integrados por algoritmos de estimação de estados capazes de processar dados de tensão, corrente e temperatura, como o Filtro de Kalman Estendido. Para validar o gêmeo digital, recorre-se a um conjunto de simulações pseudo-sintéticas, realizadas em diferentes faixas de temperatura, obtidas pela integração de duas ferramentas complementares: o FASTSim, utilizado para reproduzir de forma eficiente a dinâmica veicular em três ciclos de condução padronizados—um perfil urbano com tráfego intenso, um percurso rodoviário a velocidade quase constante em vias expressas e um trajeto dinâmico com acelerações bruscas e velocidades elevadas—e o PyBaMM, empregado para modelar o comportamento eletroquímico da bateria sob os perfis de potência demandada pelo veículo. Os resultados evidenciam acurácia na predição do estado de carga, com erro absoluto médio inferior a 3% em condições de temperatura ambiente maiores do que $10^{\circ}C$, além de estimativas de alcance residual de veículos com erros absolutos da ordem de $30 \, km$. Dessa forma, o gêmeo digital desenvolvido, sustentado por uma arquitetura modular e pela combinação de modelos físicos com dados pseudo-sintéticos, permite aprimorar o gerenciamento de baterias, bem como ampliar o potencial de integração dos veículos elétricos em novos serviços e arquiteturas.

Palavras-chave: Gêmeos digitais; Veículos elétricos; Baterias de íons de lítio; Modelo eletroquímico; Estimativa de estado de carga; Filtro de Kalman Estendido.

Abstract

This work presents the development of a digital twin for lithium-ion batteries employed in urban electric ground vehicles, aiming to monitor variables such as state-of-charge and temperature. The proposed methodology integrates reduced-order electrochemical models, equivalent circuit models, and thermal models, complemented by state estimation algorithms capable of processing voltage, current, and temperature data, such as the Extended Kalman Filter. To validate the digital twin, a series of pseudo-synthetic simulations were conducted across different temperature ranges, achieved by combining two complementary tools: FASTSim, employed to efficiently replicate vehicle dynamics under three standardized driving cycles—a congested urban driving profile, a highway cycle with near-constant speeds on expressways, and a dynamic route characterized by sudden accelerations and high speeds-and PyBaMM, used to model the electrochemical behavior of the battery subjected to power profiles demanded by the vehicle. The results demonstrate accurate state-of-charge predictions, with mean absolute errors below 3%under ambient temperature conditions above $10^{\circ}C$, as well as vehicle residual range estimations exhibiting absolute errors around $30 \, km$. Therefore, the developed digital twin, supported by a modular architecture and combining physics-based models with pseudo-synthetic data, enables improving battery management, as well as expanding the potential for integrating electric vehicles into novel services and architectures.

Keywords: Digital twins; Electric vehicles; Lithium-ion batteries; Electrochemical model; State of charge estimation; Extended Kalman Filter.

Lista de Figuras

3.1	Fluxos de dados em modelo digital, sombra digital e gêmeo digital	10
3.2	Gêmeo digital baseado no modelo P2D	11
3.3	Arquitetura de Gêmeo Digital para gerenciamento de baterias de veículos	
	elétricos	12
3.4	Representação dos sinais de entrada atuando sobre o veículo: comandos do	
	usuário e influências do ambiente.	14
3.5	Diagrama simplificado dos componentes de um BEV	15
3.6	Fluxo simplificado de energia em um veículo elétrico, destacando as principais	
	fontes de perda entre a bateria e as rodas.	17
3.7	Diagrama de um sistema de gerenciamento de bateria de veículo elétrico	
	$({\rm BMS})$ ilustrando a interação entre as cargas, o ${\rm BMS}$ e um módulo de bateria.	
	O BMS monitora a tensão (\tilde{v}_b) , a corrente (\tilde{i}_b) e a temperatura (\tilde{T}_b) do módulo	
	usando sensores	19
3.8	Representação de célula, módulo de bateria e banco de bateria	23
3.9	Diagrama da célula de íons de lítio	26
3.10	Modelo de Circuito Elétrico Equivalente com um ramo RC	33
3.11	Diagrama esquemático e modelo de circuito elétrico equivalente do	
	comportamento térmico da célula	40
4.1	Perfis de velocidade dos programas de condução padronizados para um único	
	ciclo	55
4.2	Perfis de corrente dos programas de condução padronizados para um ciclo	
	único	57
4.3	Estrutura do gêmeo digital proposto	60

5.1	Correntes de teste de descarga em corrente constante	75
5.2	Interpolação polinomial dos parâmetros $\alpha(T_s)$ e $\beta(T_s)$	76
5.3	Superfície 3D de tensão de circuito aberto estimada com $spline$ para carga	78
5.4	Superfície 3D de tensão de circuito aberto estimada com <i>spline</i> para descarga.	79
5.5	Derivada parcial da tensão de circuito aberto em relação ao SOC para carga.	80
5.6	Derivada parcial da tensão de circuito aberto em relação ao SOC para descarga.	81
5.7	Perfil de corrente amostrado e tensão resultante para identificação dos	
	parâmetros elétricos do modelo RV-ECMT	83
5.8	Ajuste de curvas $R_0(T_s)$, $R_1(T_s) \in C_1(T_s)$ para os modelos RV-ECMT e ECMT.	85
5.9	Resultados da estimação do SOC para o padrão HWFET a 25° C	87
5.10	Gráfico do erro na estimação do SOC para o padrão HWFET a 25° $C.$	87
5.11	Arquitetura de alto nível do gêmeo digital para o sistema de armazenamento	
	de energia veicular. A área delimitada em azul corresponde ao domínio virtual	
	do DT, enquanto a região tracejada em laranja representa o domínio físico	
	do veículo	95

Lista de Tabelas

3.1	Definição de célula, módulo de bateria e banco de bateria	23
4.1	Especificações da célula de íons de lítio LG M50 21700	62
4.2	Configuração do GA utilizado na calibração do ECM	67
4.3	Parâmetros térmicos.	68
4.4	Estrutura dos vetores de estado e dos blocos de ${\bf Q}$ para cada modelo. $\ .$	69
5.1	Valores dos parâmetros α e β para diferentes temperaturas	75
5.2	Parâmetros das <i>Splines</i>	82
5.3	Parâmetros identificados dos modelos RV-ECMT e ECMT para diferentes	
	temperaturas	84
5.4	Métricas de erro por perfil de condução com e sem medição da temperatura	
	de superfície da célula.	88
5.5	Métricas de erro organizadas por temperatura sem medição da temperatura	
	de superfície da célula.	89
5.6	Métricas de erro organizadas por temperatura com medição da temperatura	
	de superfície da célula.	90
5.7	Métricas de erro globais para cada modelo com e sem medição da temperatura	
	de superfície da célula.	90
5.8	Erros globais e médios dos modelos ECMT e RV-ECMT para a estimativa	
	de temperatura sem e com a medição da temperatura de superfície da célula.	92
5.9	Métricas de erro para a estimação de alcance sem e com medição da	
	temperatura de superfície da célula.	93

Lista de abreviaturas e siglas

$5\mathrm{G}$	Quinta Geração de Redes Móveis - Fifth Generation Mobile Networks
6G	Sexta Geração de Redes Móveis - Sixth Generation Mobile Networks
BBDST	Teste Dinâmico de Estresse de Ônibus de Pequim - <i>Beijing Bus Dynamic</i> Stress Test
BEV	Veículo Elétrico a Bateria - Battery Electric Vehicle
BMS	Sistema de Gerenciamento de Baterias - Battery Management System
CAN	Rede de Área de Controlador - Controller Area Network
CC	Corrente Constante - Constant Current
CPU	Unidade Central de Processamento - Central Processing Unit
CTC	Célula para Chassi - Cell-to-Chassis
CTM	Célula para Módulo - Cell-to-Module
CTP	Célula para Banco - Cell-to-Pack
CV	Tensão Constante - Constant Voltage
DEAP	Algoritmos Evolutivos Distribuídos em Python - Distributed Evolutionary Algorithms in Python
DFN	Doyle-Fuller-Newman
DT	Gêmeo Digital - Digital Twin

ECM	Modelo de Circuito Equivalente - Equivalent Circuit Model
ECMT	Modelo de Circuito Equivalente com dinâmica Térmica - <i>Equivalent</i> <i>Circuit Model with Thermal dynamics</i>
EKF	Filtro de Kalman Estendido - Extended Kalman Filter
EOL	Fim de Vida Útil - End of Life
FASTSim	Simulador de Tecnologia de Sistemas Automotivos Futuros - Future Automotive Systems Technology Simulator
FCEV	Veículo Elétrico a Célula de Combustível - Fuel Cell Electric Vehicle
GA	Algoritmo Genético - Genetic Algorithm
GANS	Redes Adversariais Generativas - Generative Adversarial Networks
GEE	Gases de Efeito Estufa - <i>Greenhouse Gases</i>
HEV	Veículo Híbrido Elétrico - Hybrid Electric Vehicle
HIF	Filtragem Iterativa Híbrida - Hybrid Iterative Filtering
HIF-PF	Algoritmo de Filtragem Iterativa Híbrida com Filtragem de Partículas - Hybrid Iterative Filtering – Particle Filter
HPL	Carga de Alta Potência - High-Power Load
HVAC	Aquecimento, Ventilação e Ar Condicionado - Heating, Ventilation, and Air Conditioning
HWFET	Teste de Economia de Combustível em Rodovias - Highway Fuel Economy Test
IA	inteligência artificial
IEA	Agência Internacional de Energia - International Energy Agency
IoT	internet das coisas - Internet of Things

IPCC	Painel Intergovernamental sobre Mudança do Clima - Intergovernmental Panel on Climate Change
KCL	Lei das Correntes em Nó - Kirchhoff's Current Law
KF	Filtro de Kalman - Kalman Filter
LCA	Avaliação do Ciclo de Vida - Life Cycle Assessment
LFP	Fosfato de Ferro-Lítio - Lithium Iron Phosphate
LIB	Bateria de Íons de Lítio - Lithium-Ion Battery
LSTM	Memória de Curto e Longo Prazo - Long Short-Term Memory
MAE	Erro absoluto médio - Mean Absolute Error
MPC	Controle Preditivo Baseado em Modelo - Model Predictive Control
OCV	Tensão de Circuito Aberto - Open Circuit Voltage
PF	Filtragem de Partículas - Particle Filter
PHEV	Veículo Híbrido Plug-in - Plug-in Hybrid Electric Vehicle
PyBaMM	Modelagem Matemática de Baterias em Python - Python Battery Mathematical Modelling
RMSE	Raiz quadrada do erro médio - Root Mean-Square Error
RUL	Vida Útil Restante - Remaining Useful Life
RV	Rakmatov-Vrudhula
RV-ECM	Modelo eletroquímico simplificado acoplado a um circuito elétrico equivalente - Rakmatov-Vrudhula Electrical Circuit Model
RV-ECMT	Modelo eletroquímico simplificado acoplado a um circuito elétrico equivalente com dinâmica térmica - Rakmatov–Vrudhula Electrical Circuit Mode with Thermal dynamics

- SEI Camada de Interfase de Eletrólito Sólido Solid Electrolyte Interphase
- SOA Área Operacional Segura Safe Operating Area
- SOC Estado de Carga State of Charge
- SOE Estado de Energia *State of Energy*
- SOF Estado de Funcionalidade *State of Functionality*
- SOH Estado de Saúde State of Health
- SOP Estado de Potência *State of Power*
- SOT Estado de Temperatura *State of Temperature*
- UDDS Ciclo de Condução do Dinamômetro Urbano Urban Dynamometer Driving Schedule
- UKF Filtro de Kalman Unscented Unscented Kalman Filter
- US06 Procedimento de Teste Federal Suplementar US06 Supplemental Federal Test Procedure US06
- UNEP Programa das Nações Unidas para o Meio Ambiente United Nations Environment Programme
- V2G Veículo para Rede Vehicle-to-Grid
- VAEs Autocodificadores Variacionais Variational Autoencoders
- VE Veículo Elétrico

Lista de símbolos

P_{bat}	Potência elétrica na bateria [kW]
$P_{\rm arr}$	Potência de arrasto aerodinâmico [kW]
$P_{\rm rol}$	Potência de resistência ao rolamento [kW]
$P_{\rm ram}$	Potência para vencer a rampa da via [kW]
$P_{\rm acel}$	Potência de aceleração longitudinal [kW]
$P_{\rm iner}$	Potência de inercia rotacional [kW]
$P_{\rm aux}$	Cargas auxiliares do veículo [kW]
$\eta_{ m trans}$	Rendimento da transmissão $[-]$
$\eta_{ m mot}$	Rendimento do motor elétrico $[-]$
$\eta_{ m inv}$	Rendimento do inversor de potência $[-]$
$\eta_{ m bat}$	Rendimento instantâneo da bateria $\left[-\right]$
C_a	Capacidade atual $[Ah]$
C_n	Capacidade nominal $[Ah]$
SOH	Estado de Saúde [–]
R_a	Impedância atual $[\Omega]$
R_n	Impedância nominal $[\Omega]$
P_p	Potência de pico $[W]$

P_n	Potência nominal $[W]$
SOP	Estado de Potência [—]
Р	Potência $[W]$
P_{max}	Potência máxima $[W]$
SOC	Estado de Carga —
SOF	Estado de Funcionamento $[-]$
P_d	Potência demandada $[W]$
t	Tempo $[s]$
E_r	Energia restante da bateria $[J]$
E_{max}	Energia máxima disponível da bateria $\left[J\right]$
SOE	Estado de Energia $[-]$
∇	Operador nabla (gradiente)
i _s	Densidade de corrente na fase sólida $[{\rm Am^{-2}}]$
σ_s	Condutividade elétrica na fase sólida $[Sm^{-1}]$
ϕ_s	Potencial elétrico na fase sólida $\left[V\right]$
Cs	Concentração de íons de lítio na fase sólida $[molm^{-3}]$
D_s	Coeficiente de difusão na fase sólida $[m^2s^{-1}]$
C _e	Concentração de íons de lítio no eletrólito $[molm^{-3}]$
D_e	Coeficiente de difusão no eletrólito $[m^2 s^{-1}]$
i_e	Densidade de corrente iônica no eletrólito $[{\rm A}{\rm m}^{-2}]$
t^0_+	Número de transferência do í on positivo $[-]$
F	Constante de Faraday $[C \ mol^{-1}]$

Condutividade iônica $[S m^{-1}]$
Potencial elétrico no eletrólito $[V]$
Constante universal dos gases $[J \mod^{-1} K^{-1}]$
Temperatura absoluta [K]
Coeficiente de atividade dos íons $[-]$
Densidade de corrente da reação eletroquímica $[{\rm A}{\rm m}^{-2}]$
Densidade de corrente de troca $[A m^{-2}]$
Coeficiente de transferência de carga $[-]$
Sobrepotencial da reação eletroquímica $\left[V\right]$
Tensão de circuito aberto $[V]$
Resistência interna $[\Omega]$
Resistência do ramo paralelo RC $[\Omega]$
Capacitância do ramo paralelo RC [F]
Corrente da bateria $[A]$
Tensão de terminal da bateria $\left[V\right]$
Tensão de polarização (no ramo paralelo RC) $\left[V\right]$
Corrente de polarização (no resistor R_1) $[A]$
Corrente no capacitor C_1 [A]
Índice temporal discreto $[-]$
Estado de carga por Contagem de Coulomb s $[-]$
Eficiência coulômbica $[-]$

Q_{nom}	Capacidade nominal da célula $[Ah]$
Δt	Passo de tempo $[s]$
x	Vetor de estados
$\mathbf{A}_{\mathbf{CC}}$	Matriz de transição de estado do modelo ECM
B_{CC}	Matriz de entrada de controle do modelo ECM
u	Entrada do modelo
y	Saída do modelo
h_{CC}	Função de medição (saída) do modelo ECM $\left[V\right]$
SOC	Estado de carga $[-]$
\mathbf{H}_{CC}	Matriz de medição do modelo ECM $[-]$
α	Capacidade total da célula $\left[C \right]$
β	Parâmetro de difusão $[s^{-1}]$
σ	Carga perdida $[C]$
L_b	Tempo de descarga da bateria $[s]$
m	Índice de soma $[-]$
M	Índice do truncamento da soma $[-]$
τ	Variável de integração no cálculo da integral do erro $\left[s\right]$
σ_d	Estado de carga entregue $[C]$
$\sigma_{um}, m \in \{1, 2, \dots, M\}$	Estados de carga indisponíveis $\left[C \right]$
SOC_{RV}	Estado de carga pelo modelo eletroquímico simplificado $[-]$
$\mathbf{x}_{\mathbf{dif}}$	Vetor de estados do modelo de difusão
$\mathbf{A}_{\mathbf{dif}}$	Matriz de transição de estado do modelo de difusão

$\mathbf{B}_{\mathbf{dif}}$	Matriz de entrada de controle do modelo de difusão
$\mathrm{C}_{\mathrm{dif}}$	Matriz de medição dos estados de difusão
A_{RV}	Matriz de transição de estado do modelo RV
B_{RV}	Matriz de entrada de controle do modelo RV
h_{RV}	Função de medição (saída) do modelo RV $\left[V\right]$
\mathbf{H}_{RV}	Matriz de medição do modelo RV-ECM $[-]$
T_c	Temperatura no centro da célula $[^\circ C]$
T_s	Temperatura na superfície da célula $[^\circ C]$
T_{amb}	Temperatura ambiente [° C]
R_c	Resistência térmica centro-superfície $\left[K/W\right]$
R_o	Resistência térmica superfície-ambiente $\left[K/W\right]$
C_c	Capacidade térmica do núcleo $\left[J/K\right]$
C_s	Capacidade térmica da superfície $\left[J/K\right]$
Q	Calor gerado internamente pela célula $\left[W\right]$
$T_c s$	Diferença de temperatura centro–ambiente $[^\circ C]$
$T_s s$	Diferença de temperatura superfície–ambiente [° $C]$
$\mathbf{x}_{ ext{th}}$	Vetor de estados do modelo térmico
$\mathbf{u}_{ ext{th}}$	Entrada do modelo térmico
$\mathbf{A}_{ ext{th}}$	Matriz de transição de estado do modelo térmico
$\mathbf{B}_{ ext{th}}$	Matriz de entrada de controle do modelo térmico
X _{CCT}	Vetor de estados do modelo ECMT
$\mathbf{A}_{\mathbf{CCT}}$	Matriz de transição de estado do modelo ECMT

B _{CCT}	Matriz de entrada de controle do modelo ECMT
h_{CCT}	Função de medição (saída) do modelo ECMT $\left[V\right]$
<i>Y</i> _{CCT}	Saída do modelo ECMT
$\mathbf{H}_{CCT,v}$	Matriz de medição do modelo ECMT considerando apenas a tensão $v_b \ [-]$
$\mathbf{H}_{CCT,vt}$	Matriz de medição do modelo ECMT considerando tensão v_b e temperatura da superfície $T_s \ [-]$
X _{RVT}	Vetor de estados do modelo RV-ECMT
A_{RVT}	Matriz de transição de estado do modelo RV-ECMT
B_{RVT}	Matriz de entrada de controle do modelo RV-ECMT
h_{RVT}	Função de medição (saída) do modelo RV-ECM T $\left[V\right]$
y_{RVT}	Saída do modelo RV-ECMT
$\mathbf{H}_{RVT,v}$	Matriz de medição do modelo RV-ECMT considerando apenas a tensão $v_b \; [-]$
$\mathbf{H}_{RVT,vt}$	Matriz de medição do modelo RV-ECMT considerando tensão v_b e temperatura da superfície $T_s \ [-]$
x_k	Vetor de estados no instante k
$\hat{x}_{k k-1}$	Estimativa predita de x_k usando dados até $k-1$
$\hat{x}_{k k}$	Estimativa corrigida de x_k após incorporar y_k
u_k	Vetor de entradas no instante k
y_k	Vetor de medições no instante k
A_k	Matriz de transição de estados (linearizada no EKF)
B_k	Matriz de controle

H_k	Matriz de observação (Jacobiana da função de medição)
w_k	Ruído de processo $\sim \mathcal{N}(0, Q_k)$
Q_k	Covariância do ruído de processo
v_k	Ruído de medição $\sim \mathcal{N}(0, R_k)$
R_k	Covariância do ruído de medição
$P_{k-1 k-1}$	Covariância do erro corrigido no instante $k-1$
$P_{k k-1}$	Covariância do erro de predição
K_k	Ganho de Kalman
Ι	Matriz identidade de ordem compatível
$P_{k k}$	Covariância do erro corrigido
$f(\cdot)$	Função não linear de evolução dos estados
$h(\cdot)$	Função não linear de medição
n	Dimensão do espaço de estados
I[i]	Corrente de descarga aplicada no experimento $i [A]$
L[i]	Duração da descarga no experimento $i [s]$
Ν	Número total de experimentos realizados $[-]$
$f_{lpha}(T_s)$	Função de interpolação da variável α em função da temperatura
$f_{eta}(T_s)$	Função de interpolação da variável β em função da temperatura
$f_{\rm chg}(soc,T_s)$	Função de interpolação do perfil de carga em função do estado de carga e da temperatura $\left[V\right]$
$f_{\rm dhg}(soc,T_s)$	Função de interpolação do perfil de descarga em função do estado de carga e da temperatura $\left[V\right]$
θ	Vetor de parâmetros do modelo ECM

\hat{v}_b	Tensão terminal prevista pelo modelo $\left[V\right]$
$\sqrt{R_0}$	Gene do algoritmo genético associado a $R_0~(R_0=(\sqrt{R_0})^2)~[\Omega^{1/2}]$
$\sqrt{R_1}$	Gene do algoritmo genético associado a $R_1~(R_1=(\sqrt{R_1})^2)~[\Omega^{1/2}]$
$\sqrt{C_1}$	Gene do algoritmo genético associado a $C_1~(C_1=(\sqrt{C_1})^2)~[{\rm F}^{1/2}]$
$v_{\rm PyBaMM}$	Tensão terminal gerada pela simulação PyBaMM $\left[V\right]$
$v_{ m modelo}$	Tensão terminal prevista pelo modelo ECM $\left[V\right]$
α_{GA}	Parâmetro de mistura do operador de cruzamento cxBlend $[-]$
μ	Média da distribuição de mutação gaussiana mut Gaussian $[-]$
σ_{GA}	Desvio-padrão da distribuição de mutação gaussiana mut Gaussian $[-]$
selTournament	Função da biblioteca DEAP que implementa o método de seleção por torneio, onde N indivíduos competem em grupos e o melhor de cada grupo é selecionado para reprodução.
indpb	Probabilidade independente de mutação por gene $[-]$
Q	Matriz de covariância do processo
R	Matriz de covariância da medição
H_k	Matriz de observação (Jacobiana da função de medição)
$\mathrm{ECM}_{\mathbf{Q}}$	Bloco de covariância do estado elétrico (ECM)
RV_Q	Bloco de covariância dos estados de difusão (RV)
$\mathrm{TH}_{-}\mathrm{Q}$	Bloco de covariância dos estados térmicos
q_1	Parâmetro de variância do processo associado ao ramo RC
r ou r_1	Parâmetro de variância do ruído de medição (tensão terminal)
r_2	Parâmetro de variância do ruído de medição (temperatura da superfície da célula)

rv_i	Parâmetro de variância do <i>i</i> -ésimo estado de difusão
th_1	Parâmetro de variância do estado térmico T_{cs}
th_2	Parâmetro de variância do estado térmico T_{ss}
\mathbf{x}_{GA}	Vetor de genes do algoritmo genético para ajuste do EKF
gen_Q	Parâmetro do vetor de genes associado à matriz de covariância do ruído de processo ${\bf Q}$
gen_R	Parâmetro do vetor de genes associado à matriz de covariância do ruído de medição ${\bf R}$
$\mathcal{U}(a,b)$	Distribuição uniforme entre $a \in b$
$soc_{ref}[k]$	Estado de carga de referência obtido a partir do modelo eletroquímico no instante $k \ [-]$
$\hat{soc}[k]$	Estado de carga estimado pelo EKF no instante $k \ [-]$
$c_L[k]$	Concentração de lítio no ponto $x=L$ da célula no instante $k~[{\rm mol}{\rm m}^{-3}]$
$c_L^{0\%}$	Concentração de lítio no ponto $x=L$ da célula correspondente a 0% de SOC $[{\rm mol}{\rm m}^{-3}]$
$c_{L}^{100\%}$	Concentração de lítio no ponto $x=L$ da célula correspondente a 100% de SOC $[{\rm mol}{\rm m}^{-3}]$
N_{err}	Número total de amostras consideradas para o cálculo dos erros $[-]$
$R_{0RV}(T_s)$	Resistência R_0 do modelo RV-ECMT, em função de T_s $[\Omega]$
$R_{1RV}(T_s)$	Resistência R_1 do ramo RC do modelo RV-ECMT, em função de T_s $[\Omega]$
$C_{1RV}(T_s)$	Capacitância C_1 do ramo RC do modelo RV-ECMT, em função de $T_s \; [{\rm F}]$
$R_{0CC}(T_s)$	Resistência R_0 do modelo ECMT, em função de T_s $[\Omega]$
$R_{1CC}(T_s)$	Resistência R_1 do ramo RC do modelo ECMT, em função de T_s $[\Omega]$

 $C_{1CC}(T_s)$ Capacitância C_1 do ramo RC do modelo ECMT, em função de T_s [F] d_{rem} Alcance residual estimado [km]

Sumário

1	Introdução				1	
	1.1	Objetivo Geral		•	4	
	1.2	Objetivos Específicos			4	
	1.3	Organização do Trabalho		•	4	
2	Tra	Trabalhos Relacionados 5				
	2.1	Considerações Finais			7	
3	Fun	damentação Teórica			9	
	3.1	Gêmeos Digitais		•	9	
3.2 Veículos Elétricos		Veículos Elétricos			13	
		3.2.1 Categorias de Veículos Elétricos			13	
		3.2.2 Simulação de Veículos e Modelagem das Perdas Energéticas		•	16	
	3.3	Sistema de Gerenciamento de Baterias (BMS)		•	18	
		3.3.1 Banco de Baterias		•	22	
	3.4	Baterias de Lítio		•	25	
		3.4.1 O Problema do Envelhecimento		•	27	
		3.4.2 Modelagem de Baterias			28	
		3.4.3 Estimadores do Estado da Bateria		•	45	
		3.4.4 Matriz de Observabilidade		•	49	
	3.5	Considerações Finais		•	50	
4	Met	odologia			52	
	4.1	Geração de Dados Pseudo-Sintéticos		•	52	

		4.1.1 Modelagem de Baterias com PyBaMM	57
		4.1.2 Simulação de Perfis de Condução com FASTSim	58
	4.2	Estrutura do Gêmeo Digital	60
	4.3	Modelo eletroquímico da bateria	61
		4.3.1 A Tensão de Circuito Aberto	64
		4.3.2 Estimativa de Parâmetros do ECM	65
	4.4	Parâmetros do modelo térmico	68
	4.5	Filtro de Kalman Estendido (EKF) para os modelos ECMT e RV–ECMT	69
	4.6	Métricas de Desempenho	70
	4.7	Estimativa de alcance (autonomia) e chegada ao destino	71
	4.8	Considerações Finais	73
5	Res	ultados 7	74
	5.1	Estimação dos parâmetros de difusão	74
	5.2	Estimação da curva de Tensão de Circuito Aberto	77
	5.3	Estimação dos parâmetros elétricos	82
	5.4	Desempenho no cenário de descarga do VE	86
	5.5	Desempenho na estimação de alcance	92
	5.6	Observabilidade dos modelos	94
	5.7	Visão geral do Gêmeo Digital desenvolvido	95
	5.8	Considerações Finais	96
6	Cor	nclusões e Trabalhos Futuros 9	98
	6.1	Sugestões de Trabalhos Futuros	99
	Referências bibliográficas		

Anexo A — Tradução parcial do material suplementar de O'Kane et al. (2022) 115

Capítulo 1

Introdução

Na última década, as considerações ambientais tornaram-se cada vez mais um ponto focal nos diálogos globais, sublinhando a urgência da adoção de práticas sustentáveis em vários setores ^[1]. Uma mudança notável que emana desta consciência é o rápido aumento no domínio dos veículos eléctricos (VE). Com o aumento das exigências regulatórias e da conscientização ambiental, o setor de veículos elétricos, anteriormente classificado como segmento de nicho, tem experimentado um crescimento exponencial, impulsionado por avanços tecnológicos, incentivos governamentais e escalabilidade industrial, como evidenciado pelo aumento nas vendas de veículos elétricos. As vendas globais de veículos elétricos continuaram crescendo de forma robusta, alcançando quase 14 milhões de unidades em 2023, o que representou 18% de todas as vendas de automóveis novos. Esse valor é superior aos 14% de participação de mercado observados em 2022. A China liderou o mercado, respondendo por 60% das vendas globais, seguida pela Europa (25%) e os Estados Unidos (10%). ^[2]. As implicações desse crescimento são profundas, indicando uma transformação não apenas industrial, mas também social, com impactos significativos na mobilidade, na infraestrutura urbana e nos modelos de consumo energético.

O motor de combustão tradicional é há muito tempo uma fonte significativa de emissões de gases com efeito de estufa ^[3,4]. Estas emissões desempenham um papel crítico nas alterações climáticas globais, que têm repercussões desde o derretimento das calotas polares até padrões climáticos cada vez mais imprevisíveis ^[5,6]. Para mitigar estes efeitos e alcançar um futuro sustentável, uma transição para alternativas mais limpas não é apenas preferível – é imperativa^[7].

Embora os benefícios dos VE sejam convincentes, a sua adoção em massa apresenta desafios, não apenas em termos do desempenho da bateria física ^[8,9], mas também no que diz respeito ao impacto ambiental mais amplo, particularmente nas áreas de fabricação, mineração e descarte ^[10–15].

A bateria do VE não deve apenas manter carga suficiente para viagens mais longas, mas também suportar os rigores das variações climáticas ^[16]. Ademais, o envelhecimento e a deterioração do desempenho da bateria ao longo do tempo resultam em uma autonomia reduzida, traduzindo-se em recargas frequentes e potenciais interrupções na viagem do utilizador ^[17,18]. Além disto, atrasos na recarga agravam esse problema. Ao contrário dos rápidos tempos de reabastecimento dos postos de gasolina, o carregamento de veículos elétricos pode muitas vezes ser mais prolongado ^[19], especialmente se a infraestrutura de carregamento rápido não estiver disponível ^[20–22]. Isto leva ao que é denominado "ansiedade de autonomia"– o medo de que um VE possa ficar sem carga ao longo da viagem, deixando os seus ocupantes parados na via de trânsito ^[23,24]. Associada à atual limitação na disponibilidade de infraestrutura de recarga em diversas regiões, essa condição representa uma barreira substancial à adoção em larga escala de veículos elétricos, influenciando negativamente a percepção de confiabilidade e conveniência por parte dos consumidores.

No quesito ambiental, a extração de lítio, cobalto e outros minerais essenciais para a fabricação de baterias tem implicações ambientais e sociais significativas, incluindo a destruição de habitats e a poluição da água ^[12,13,25,26]. Além disso, a eliminação em fim de vida das baterias de VE representa um desafio devido à sua composição química, criando o risco de poluição se não for devidamente reciclada ou eliminada. Estratégias eficazes para a reciclagem e eliminação destas baterias são essenciais para mitigar potenciais danos ambientais, garantindo o crescimento sustentável do setor de VE ^[10,11,27,28].

Nesse contexto, o gêmeo digital para baterias surge como uma ideia inovadora que pode aprimorar a experiência de utilizar um veículo elétrico ^[29,30]. Basicamente, um gêmeo digital é uma réplica digital dinâmica da bateria física, unindo os mundos virtual e físico ^[31–34]. No cenário dos veículos elétricos, o gêmeo digital serve como uma ferramenta preditiva e de monitoramento em tempo real, rastreando a saúde da bateria, prevendo possíveis problemas e sugerindo ações de manutenção antes mesmo de um problema se manifestar fisicamente
 $\left[29, 30, 35-38\right]$

Criar um gêmeo digital para baterias de veículos elétricos é uma atividade sofisticada, exigindo uma modelagem complexa do comportamento da bateria sob várias condições de operação e a transferência desse comportamento em algoritmos e ferramentas de software ^[29,30,39]. No entanto, modelos mais complexos de bateria exigem mais recursos computacionais, tornando inviável sua implementação em tempo real para aplicações embarcadas ou em larga escala ^[40]. Para contornar essa limitação, alguns gêmeos digitais propostos adotam abordagens mais simplificadas, abstraindo a eletroquímica detalhada da bateria e recorrendo ao uso de modelos de ordem reduzida ou circuitos equivalentes ^[31].

Embora essa simplificação resulte em menor demanda computacional e maior aplicabilidade prática, ela também implica na perda de parte da fidelidade na representação dos fenômenos internos da bateria, como a dinâmica dos íons no eletrólito e eletrodo, além dos efeitos de degradação a longo prazo. Além disso, a temperatura afeta a resistência interna, a velocidade das reações eletroquímicas e até a segurança do sistema, tornando essencial a sua incorporação para uma representação mais realista e robusta do comportamento da bateria ^[41,42].

As implicações de um gêmeo digital vão além dos veículos individuais. Com o potencial para integrações veículo para rede (V2G), do inglês *Vehicle-to-Grid*, os VE podem tornarse parte de um ecossistema energético mais amplo, permitindo o fluxo de energia entre os veículos e a rede elétrica ^[43]. Isto pode estabilizar as cargas da rede durante os horários de pico, sendo uma prática potencialmente lucrativa para os usuários de VE, e também facilitar o uso eficiente de fontes de energia renováveis ^[44–47].

À medida que o mundo se direciona a um futuro mais sustentável, os veículos elétricos estão inegavelmente na vanguarda deste movimento. No entanto, para garantir a sua adoção generalizada e maximizar os seus potenciais benefícios, é essencial superar desafios. Dessa forma, o objetivo deste trabalho é desenvolver um gêmeo digital para baterias de VE para fornecer estimativas precisas de grandezas importantes para avaliar o estado de saúde e funcionamento da bateria e o alcance real de veículos elétricos, evitando paradas inesperadas para recarga e contribuindo para diminuir a ansiedade de autonomia.

1.1 Objetivo Geral

O objetivo principal desta pesquisa é desenvolver e validar um gêmeo digital para baterias de lítio, especificamente adaptado para aplicações em veículos elétricos terrestres de uso urbano, capaz de representar o comportamento eletroquímico e térmico da bateria em diferentes condições de operação e de fornecer estimativas confiáveis acerca de parâmetros críticos como estado de carga e temperatura.

1.2 Objetivos Específicos

Para atingir o objetivo geral proposto, definem-se os seguintes objetivos específicos:

- criar um modelo digital detalhado que represente as principais variáveis internas da bateria, contemplando sua dinâmica de descarga e recarga ao longo de diferentes perfis de condução de um veículo elétrico;
- 2. implementar algoritmos de estimação de estados da bateria física;
- estabelecer indicadores e métricas de desempenho que permitam avaliar a disponibilidade energética da bateria;
- testar e validar o gêmeo digital em cenários típicos de operação de veículos elétricos, verificando a confiabilidade das previsões de estado de carga e temperatura.

1.3 Organização do Trabalho

O restante deste documento encontra-se dividido da seguinte maneira: no Capítulo 2 são abordados trabalhos relacionados, explorando pesquisas recentes que tenham proposto estratégias para a utilização de gêmeos digitais; o Capítulo 3 contém a Fundamentação Teórica, explicando de forma mais aprofundada o conceito de gêmeo digital e introduzindo o funcionamento das baterias de lítio; no Capítulo 4 é apresentada a metodologia empregada neste trabalho; no Capítulo 5 são discutidos os resultados obtidos, enquanto o Capítulo 6 traz as conclusões e sugestões para pesquisas futuras.

Capítulo 2

Trabalhos Relacionados

Eaty e Bagade (2022)^[29] propõem uma estrutura de gêmeo digital (DT - *Digital Twin*) para gerenciamento de baterias de veículos elétricos para estimar o estado de saúde (SOH - *State of Health*) e o estado de carga (SOC - *State of Charge*). Sua abordagem divide a computação entre veículo e nuvem: a estimativa de SOC ocorre no veículo usando um filtro de Kalman combinando contagem de Coulomb e tensão de circuito aberto (OCV - *Open Circuit Voltage*), enquanto a previsão de SOH é feita na nuvem por meio de um método de aprendizado contínuo. O modelo de aprendizado contínuo foi treinado incrementalmente usando imagens baseadas em *wavelet* derivadas de sinais de tensão e corrente da bateria. Seus resultados demonstram desempenho preditivo aprimorado, com erro quadrático médio de 0,022 no SOH.

Xie et al. (2024)^[48] propõem uma estrutura denominada de gêmeo digital duplo (*Dual Digital Twin*). Este sistema combina um gêmeo abrangente baseado em nuvem para análises detalhadas com um gêmeo baseado em borda para controle instantâneo no gerenciamento de baterias de veículos elétricos. A estrutura emprega um mecanismo de aprendizagem incremental com garantia de estabilidade derivada da teoria de Lyapunov, permitindo adaptação dinâmica a novos dados e assegurando precisão em tempo real no monitoramento e controle da bateria. A pesquisa demonstra que o modelo criado aumenta em 43,3% a precisão nas previsões do estado da bateria com erro médio de previsão de 1,70% e apresenta robustez frente a fatores ambientais variáveis e ruídos, oferecendo uma

solução robusta.

Em Schmitt et al. (2023) ^[38], uma abordagem para estimar o SOH de baterias de lítio foi desenvolvida utilizando gêmeos digitais criados por meio de técnicas de aprendizado de máquina. Esses modelos foram treinados em dados não estruturados de baterias, com o uso de uma arquitetura codificador-decodificador recorrente, permitindo uma estimativa eficaz de SOH com base em perfis de carga variados. Diante do estudo, foi possível concluir que a nova estrutura permite uma estimativa precisa e escalável da capacidade da bateria, independentemente da condição de envelhecimento. Isto representa um avanço significativo na avaliação do estado da bateria, especialmente para aplicações em veículos elétricos, onde a compreensão da vida útil e da eficiência da bateria é crucial.

No sistema proposto por Yi et al (2023)^[49], foi desenvolvido um método avançado para prever a temperatura e avaliar a degradação em baterias de lítio em tempo real. Esta técnica combinou a tecnologia de gêmeo digital com uma rede neural do tipo memória de curto e longo prazo, do inglês *Long Short-Term Memory* (LSTM). Usando modelos baseados em circuitos equivalentes, foi possível prever com eficácia as mudanças de temperatura e analisar padrões de degradação. O estudo concluiu que esta abordagem melhora significativamente a previsão da temperatura em tempo real, aumentando a monitorização do estado da bateria.

Yuan et al. (2023) ^[37] desenvolveu um modelo baseado em gêmeo digital para baterias de lítio para gerar dados de falha, especificamente para cenários de curto-circuito interno. Este modelo, aproveitando simulações acopladas termoelétricas, permitiu a análise de vários fatores que influenciam o comportamento da falha, como corrente de carga, localização de curto-circuito, resistência de curto equivalente e temperatura ambiente. As descobertas enfatizaram a capacidade do modelo de prever com precisão mudanças de temperatura e tensão sob diferentes condições de curto-circuitos. Dessa forma, foi possível concluir que esta abordagem baseada em gêmeo digital auxilia efetivamente no desenvolvimento e calibração de algoritmos de detecção de falhas, fornecendo uma alternativa mais rápida e econômica aos testes físicos.

Tang et al. (2022) ^[50] desenvolveram um sistema de gerenciamento de bateria (BMS - *Battery Management System*) baseado em DT para baterias de íons de lítio, abordando especificamente a estimativa precisa do SOC. Eles propõem um algoritmo de filtragem híbrida (HIF-PF - *Hybrid Iterative Filtering – Particle Filter*), que combina a Filtragem Iterativa Híbrida (HIF - *Hybrid Iterative Filtering*) com a Filtragem de Partículas (PF - *Particle Filter*), validado sob condições dinâmicas usando o Teste Dinâmico de Estresse de Ônibus de Pequim (BBDST - *Beijing Bus Dynamic Stress Test*). Sua abordagem corrige efetivamente as imprecisões do estado inicial associadas aos métodos tradicionais e reduz significativamente os erros cumulativos em comparação aos métodos padrão, como contagem de Coulomb. Os autores implementaram monitoramento de tensão, corrente e temperatura em tempo real junto com interfaces de visualização, demonstrando com sucesso a estimativa de SOC com raiz do erro quadrático médio de de 0.5%.

Em Wang et al. (2022)^[31], propõe-se uma arquitetura de colaboração em nuvem, borda e dispositivo (cloud-side-end collaboration) para o gerenciamento inteligente de baterias, apoiada no conceito de gêmeos digitais ao longo de todo o ciclo de vida das células de íons de lítio. Na solução apresentada, o processamento de dados e a execução de algoritmos mais simples ocorrem na borda (próxima ao veículo ou dispositivo), enquanto a nuvem realiza análises mais complexas, aproveitando maior capacidade de armazenamento e computação. Dessa forma, comandos e atualizações vindos da nuvem são enviados ao sistema local, permitindo um controle mais preciso e atualizado das baterias. O estudo mostra que, ao empregar modelos de circuito equivalente e algoritmos de estimação para variáveis críticas (como o estado de carga e a capacidade de potência), o sistema alcança maior eficiência energética e prolonga a vida útil das baterias. Além disso, a abordagem inclui estratégias de equalização ativa, identificando e corrigindo discrepâncias entre as células com base em dados globais. Os resultados indicam que tal arquitetura em nuvem, aliada aos gêmeos digitais, pode melhorar significativamente a precisão no monitoramento e as estratégias de controle de baterias em aplicações como veículos elétricos e sistemas de armazenamento de energia.

2.1 Considerações Finais

A partir dos trabalhos apresentados, verifica-se que a adoção de gêmeos digitais para o gerenciamento de baterias tem avançado em ritmo acelerado, apresentando soluções cada vez mais integradas entre nuvem, borda e dispositivo. Estratégias que combinam modelos físicomatemáticos ou de circuito equivalente com algoritmos de aprendizagem se mostram capazes de estimar parâmetros críticos (como o SOC, SOH e temperatura) com maior fidelidade, além de otimizar operações como a equalização ativa entre células. Essa evolução demonstra o potencial de se alcançar uma sincronização mais precisa entre o modelo digital e a bateria física, refletindo diretamente em melhorias na eficiência energética, no prolongamento da vida útil do sistema e na segurança operacional.

No entanto, observa-se um desafio recorrente: é preciso balancear a complexidade computacional de modelos eletroquímicos detalhados com a necessidade de execução em tempo real para aplicações embarcadas. Por esse motivo, muitos estudos acabam adotando abordagens de modelagem mais simples (por exemplo, circuitos equivalentes), mas que podem limitar a capacidade de representar processos físico-químicos internos da bateria. Portanto, o desenvolvimento de um modelo eletroquímico simplificado surge como uma justificativa importante para complementar a lacuna encontrada. Tal modelo pode atuar como base de um gêmeo digital de bateria, conciliando um nível adequado de fidelidade à dinâmica real da célula e, ao mesmo tempo, mantendo a viabilidade computacional e a escalabilidade do sistema.

Com isso, a presente pesquisa se propõe justamente a investigar e desenvolver um gêmeo digital centrado em um modelo eletroquímico de ordem reduzida, oferecendo subsídios para que a simulação mantenha a coerência física necessária e possibilite estimativas mais robustas de variáveis de interesse, como SOC, SOH e temperatura. Essa iniciativa visa contribuir para as soluções existentes, fornecendo um caminho intermediário entre modelos puramente empíricos e as formulações eletroquímicas de alta complexidade, respondendo à crescente demanda por aplicações em veículos elétricos e sistemas de armazenamento energético que requerem simultaneamente precisão, confiabilidade e capacidade de execução em tempo real.
Capítulo 3

Fundamentação Teórica

Neste capítulo são apresentados os fundamentos teóricos essenciais para a compreensão deste trabalho. Serão abordados tópicos referentes aos veículos elétricos, ao funcionamento das baterias de íons de lítio e ao conceito de gêmeos digitais.

3.1 Gêmeos Digitais

Um gêmeo digital transcende um modelo simples ao incorporar um conjunto de dados em constante evolução e um mecanismo para atualizações contínuas ^[51]. São réplicas digitais de sistemas físicos que podem empregar modelos multicamadas, inteligência artificial (IA), tecnologias de internet das coisas (IoT - *Internet of Things*) e computação em nuvem ^[30]. No contexto de baterias de veículos elétricos, o gêmeo digital atua como a representação computacional dinâmica da bateria física, construída a partir de modelos físico-matemáticos e continuamente atualizada com dados de sensores e históricos operacionais, permitindo um mapeamento dinâmico e bidirecional de dados e a simulação e a representação de alta fidelidade de baterias do mundo real ^[32].

Estão ilustrados na Figura 3.1 3 subcategorias dos gêmeos digitais, classificados em função da dinâmica do fluxo de informações. Em um modelo digital, as alterações na entidade física não são refletidas automaticamente em sua representação digital e viceversa. Não há atualização em tempo real, de modo que quaisquer modificações, tanto no modelo quanto no sistema físico, precisam ser realizadas de forma manual e independente. Por outro lado, numa sombra digital, qualquer modificação no item físico provoca uma alteração correspondente na sua versão digital, embora o inverso não ocorra. No caso do gêmeo digital, a influência é bidirecional: qualquer alteração no estado do objeto físico é refletida no objeto digital, e qualquer alteração no objeto digital também afeta o físico ^[32].

Figura 3.1: Fluxos de dados em modelo digital, sombra digital e gêmeo digital.



Fonte: Adaptado de Wang et al. $(2022)^{[32]}$.

Ademais, com essa representação virtual bidirecional, esses sistemas podem monitorar de forma persistente e precisa a condição das baterias, auxiliando no estabelecimento de uma estrutura abrangente de diagnóstico de falhas. Isto inclui a capacidade de prever e evitar fugas térmicas, uma questão de segurança importante no gerenciamento de baterias [34].

Nos veículos elétricos, Naseri et al. (2023) observam que gêmeos digitais de baterias tipicamente combinam modelos de múltiplas camadas (elétricos, térmicos e até eletroquímicos), técnicas de IA, sensores avançados e conectividade IoT para fornecer uma representação virtual viva da bateria física, visando melhorar seu desempenho, segurança e custo-benefício operacional ^[30].

Na Figura 3.2 está desenhado um diagrama de gêmeo digital baseado no modelo eletroquímico Pseudo-2D para baterias.



Figura 3.2: Gêmeo digital baseado no modelo P2D.

Fonte: Wang et al. $(2021)^{[34]}$.

O modelo apresentado é uma estrutura para estimativa de parâmetros em tempo real de baterias de lítio utilizando uma rede LSTM e foi projetado especificamente para simular as mudanças microestruturais que ocorrem internamente em baterias durante os ciclos de carga e descarga. O modelo aproveita a estimativa de parâmetros baseado em rede neural, com o LSTM processando dados de séries temporais de várias métricas de desempenho da bateria, como tensão, corrente e temperatura. Após o treinamento, a rede LSTM é capaz de estimar em tempo real os principais parâmetros da bateria, como áreas de superfície de partículas sólidas, condutividades, espessura da Camada de Interfase de Eletrólito Sólido (SEI - *Solid Electrolyte Interphase*) e capacidade normalizada, aumentando assim a eficiência e a segurança no uso da bateria. Além disso, a precisão e confiabilidade do modelo foram validadas com dados experimentais, afirmando sua aplicabilidade prática em cenários do mundo real. Dessa forma, este gêmeo digital representa um avanço significativo no monitoramento de baterias, ao integrar redes neurais com análises em tempo real voltadas para aplicações eletroquímicas.

Em alguns casos, a transferência de dados entre o veículo e o gêmeo digital é descrita como dependente de uma conexão via nuvem, reforçando a importância da conectividade para o funcionamento eficiente do sistema, como ilustrado na Figura 3.3. Esta figura apresenta o diagrama do gêmeo digital proposto por Eaty e Bagade (2022)^[29], composto por três partes principais: o BMS a bordo do veículo (sistema físico), o modelo digital da bateria (sistema virtual na nuvem) e a conexão em nuvem (link de dados). O BMS calcula o SOC em tempo real com um filtro de Kalman e envia dados de corrente e tensão para a nuvem, onde o modelo digital estima o SOH da bateria e retorna informações ao sistema físico. A computação em nuvem reduz a carga de processamento no veículo, pois o SOH muda lentamente e não exige cálculos instantâneos. A interconexão permite a troca contínua de dados, e o modelo usa aprendizado incremental para aprimorar as previsões de SOH ^[29].





Fonte: Eaty e Bagade (2022)^[29].

3.2 Veículos Elétricos

A transição global para uma mobilidade mais sustentável tem encontrado nos veículos elétricos um pilar fundamental para a redução das emissões de gases de efeito estufa e da dependência de combustíveis fósseis. Os VEs promovem uma transformação significativa no setor automotivo, ao integrar avanços em tecnologias de eletrificação, armazenamento de energia e sistemas inteligentes de propulsão. No entanto, limitações técnicas — especialmente no que se refere ao armazenamento de energia — contribuíram historicamente para a predominância dos motores a combustão. O recente crescimento do interesse por veículos elétricos foi viabilizado por avanços expressivos nas tecnologias de baterias, em particular as de íons de lítio, que ampliaram substancialmente a autonomia e reduziram os custos de produção, tornando essa alternativa de transporte cada vez mais acessível e atrativa para adoção em larga escala ^[52, 53].

3.2.1 Categorias de Veículos Elétricos

A categoria de veículos elétricos compreende diversas configurações tecnológicas, cada uma com características distintas em termos de fonte energética, autonomia, desempenho e aplicabilidade. Embora este trabalho tenha como foco principal os Veículos Elétricos a Bateria (BEVs - *Battery Electric Vehicle*), é relevante contextualizar os quatro principais tipos de veículos elétricos, cada um com características distintas em termos de propulsão e eficiência energética.

Os BEVs representam a forma mais pura de eletrificação, sendo propulsionados exclusivamente por um ou mais motores elétricos alimentados por baterias recarregáveis. Estes veículos não possuem motor a combustão interna, eliminando completamente as emissões diretas durante sua operação ^[8,54]. A autonomia dos BEVs modernos varia significativamente, com modelos atingindo entre 150 e 300 quilômetros com uma única recarga ^[55–57]. A recarga pode ser realizada em ambientes domésticos com carregadores de baixa potência (tipicamente 1.44 a 19.2 kW) ou em estações públicas de recarga rápida (50 a 400 kW) ^[58].

Na Figura 3.4 está ilustrada a interação entre três componentes principais: o usuário, o veículo e o ambiente. A atuação do usuário sobre o veículo é representada por uma seta

vermelha, indicando comandos como aceleração, frenagem, direção e outras ações de controle direto. Em resposta, o veículo envia informações de retorno ao usuário, como velocidade e estado de carga da bateria, simbolizadas por uma seta preta. Além disso, o veículo é influenciado por variáveis externas ao sistema de controle direto, como temperatura, topografia e condições climáticas, representadas por uma seta azul proveniente do ambiente. O diagrama destaca entradas que influenciam diretamente a dinâmica do veículo e, consequentemente, o seu desempenho energético e a demanda sobre os sistemas de tração e armazenamento de energia.

Figura 3.4: Representação dos sinais de entrada atuando sobre o veículo: comandos do usuário e influências do ambiente.



Na Figura 3.5 está ilustrada a estrutura funcional de um BEV, destacando os principais componentes e suas interações. A Unidade de Controle do Veículo é responsável por processar os sinais de entrada do usuário e diversas informações do sistema, como dados do ambiente, incluindo peso, tipo de estrada, inclinação e atritos, além de variáveis internas do próprio veículo, como estado de carga da bateria (SOC) e temperatura dos componentes. Com base nesses fatores, a unidade de controle gera sinais para os demais componentes do veículo. A energia necessária para o funcionamento do veículo é armazenada no banco de baterias, que fornece eletricidade para os sistemas do veículo. Esse processo é gerenciado pelo Sistema de Gerenciamento de Bateria (BMS), responsável por monitorar a temperatura, o estado de carga e a segurança do sistema, garantindo uma operação eficiente e segura. Além disso, o veículo conta com subsistemas auxiliares, como gerenciamento térmico e comunicação, que garantem o funcionamento adequado da bateria e do veículo em diferentes condições operacionais. A energia elétrica da bateria passa pelo Controlador do Motor/Conversor, que controla a velocidade, torque e rotação do motor. Este conversor também gerencia a conversão de energia da rede elétrica (Interface de carregamento) para recarga da bateria e da frenagem regenerativa, que converte a energia cinética do veículo de volta em energia elétrica para recarregar a bateria, aumentando a eficiência energética do sistema. Por fim, o Motor Elétrico converte a energia elétrica em energia mecânica, gerando o torque necessário para movimentar o veículo. Esse torque é transferido para as rodas por meio do sistema de Transmissão.

Figura 3.5: Diagrama simplificado dos componentes de um BEV.



Fonte: Autoria própria.

Os Veículos Híbridos Elétricos (HEVs - *Hybrid Electric Vehicles*) combinam um motor a combustão interna com um motor elétrico e um sistema de baterias de capacidade limitada, que não necessita de recarga externa. Os HEVs operam primariamente com o motor a combustão, utilizando o motor elétrico como suporte em situações específicas, como partidas, baixas velocidades ou necessidade de potência adicional. Além disso, em algumas configurações de HEVs, o motor a combustão interna é empregado para acionar diretamente um gerador elétrico; e a energia cinética normalmente perdida durante a frenagem é recuperada através de frenagem regenerativa e armazenada na bateria para posterior utilização. Esta configuração permite reduções significativas no consumo de combustível e emissões em comparação com veículos convencionais, particularmente em ambientes urbanos caracterizados por frequentes paradas e partidas, onde a assistência elétrica pode ser mais efetivamente aproveitada ^[8,54]. Os Veículos Híbridos Plug-in (PHEVs - *Plug-in Hybrid Electric Vehicles*) representam uma evolução dos híbridos convencionais, incorporando baterias de maior capacidade que podem ser recarregadas através de fontes externas de eletricidade. Esta configuração permite que os PHEVs operem como veículos puramente elétricos por distâncias limitadas antes que o motor a combustão interna seja acionado para estender a autonomia total, reduzindo o consumo de combustível. Os PHEVs apresentam-se como uma solução intermediária no processo de transição para mobilidade elétrica, oferecendo a possibilidade de deslocamentos diários exclusivamente elétricos para a maioria dos usuários, enquanto eliminam a ansiedade de autonomia para viagens mais longas ^[8,54].

Os Veículos Elétricos a Célula de Combustível (FCEVs - Fuel Cell Electric Vehicles) utilizam células de hidrogênio para gerar eletricidade a bordo, que então alimenta motores elétricos para propulsão. Diferentemente dos BEVs, que armazenam energia em baterias, os FCEVs produzem eletricidade através de uma reação eletroquímica entre hidrogênio (armazenado em tanques pressurizados) e oxigênio (do ar ambiente), tendo como único subproduto vapor d'água. Estes veículos combinam a autonomia e o tempo de reabastecimento comparáveis aos veículos convencionais com os benefícios ambientais da propulsão elétrica livre de emissões. No entanto, desafios significativos permanecem para sua adoção em larga escala, incluindo a limitada infraestrutura de abastecimento de hidrogênio, eficiência energética global inferior aos BEVs quando considerado o ciclo completo de produção e utilização do hidrogênio, e custos elevados de produção tanto dos veículos quanto do próprio combustível ^[8, 54, 59].

3.2.2 Simulação de Veículos e Modelagem das Perdas Energéticas

A etapa de simulação é indispensável para o projeto de veículos elétricos, pois permite quantificar a potência instantânea exigida do banco de baterias ao longo de um ciclo de condução arbitrário. Essa estimativa só é fidedigna se o modelo computacional representar o encadeamento de perdas que ocorre desde a *energia da bateria* até a *energia efetivamente entregue às rodas*. A Figura 3.6 resume esse processo: a energia elétrica armazenada (energia da bateria) sofre sucessivas reduções associadas a (i) cargas auxiliares do veículo (perda auxiliar), (ii) ineficiências de conversão do inversor de potência (perda do inversor), (iii) perdas eletromecânicas do motor (perda do motor), (iv) atritos e folgas no conjunto de engrenagens (perda na transmissão), (v) efeito de deformação cíclica dos pneus sobre o pavimento (perda nos pneus) e (vi) forças aerodinâmicas proporcionais à velocidade (perda por arrasto). Apenas a parcela remanescente alcança as rodas, impulsionando o veículo.

Figura 3.6: Fluxo simplificado de energia em um veículo elétrico, destacando as principais fontes de perda entre a bateria e as rodas.



Fonte: Autoria própria.

A equação compacta para capturar o encadeamento de perdas pode ser descrita como:

$$P_{\text{bat}} = \frac{P_{\text{arr}} + P_{\text{rol}} + P_{\text{ram}} + P_{\text{acel}} + P_{\text{iner}}}{\eta_{\text{trans}} \eta_{\text{mot}} \eta_{\text{inv}} \eta_{\text{bat}}} + \frac{P_{\text{aux}}}{\eta_{\text{inv}} \eta_{\text{bat}}}.$$
(3.1)

O termo $P_{\rm arr}$ representa a potência necessária para vencer o arrasto aerodinâmico, cujo valor cresce com a velocidade. Já $P_{\rm rol}$ corresponde à resistência ao rolamento dos pneus, dependente do peso normal e da velocidade de translação. A potência $P_{\rm ram}$ quantifica o trabalho de vencer rampas, que é positivas para subidas e negativas para descidas, enquanto $P_{\rm acel}$ cobre a energia cinética adicionada (ou retirada) quando o veículo se acelera longitudinalmente. Por fim, $P_{\rm iner}$ agrega o esforço extra para acelerar as massas rotativas dos eixos e rodas.

Somados esses termos, a demanda mecânica nas rodas é convertida em demanda elétrica

dividindo-se pelo produto dos rendimentos da transmissão (η_{trans}), do motor (η_{mot}), do inversor (η_{inv}) e da bateria (η_{bat}). Essa retropropagação contabiliza as perdas sucessivas em cada estágio do trem-de-força e fornece a potência que efetivamente deve sair do banco de baterias.

Além da tração, o veículo consome potência nos sistemas auxiliares como: Aquecimento, Ventilação e Ar Condicionado (HVAC - Heating, Ventilation, and Air Conditioning), iluminação, direção assistida, bombas e eletrônica embarcada, que estão agrupados em P_{aux} . Como esses consumidores estão ligados ao barramento de corrente contínua, apenas os rendimentos $\eta_{\text{inv}} \in \eta_{\text{bat}}$ incidem sobre essa parcela de potência.

3.3 Sistema de Gerenciamento de Baterias (BMS)

O Sistema de Gerenciamento de Baterias (BMS - *Battery Management System*) constitui um componente crítico e sofisticado dos veículos elétricos, responsável pelo monitoramento, controle e proteção dos bancos de baterias. Este sistema desempenha um papel fundamental para garantir a operação segura, maximizar a vida útil e otimizar o desempenho das células de bateria, que representam o componente mais valioso e tecnologicamente sensível dos veículos elétricos modernos. O BMS pode ser definido como um conjunto integrado de hardware e software que supervisiona continuamente os parâmetros operacionais da bateria e gerencia sua interação com os demais sistemas do veículo, como ilustrado na Figura 3.7. Figura 3.7: Diagrama de um sistema de gerenciamento de bateria de veículo elétrico (BMS) ilustrando a interação entre as cargas, o BMS e um módulo de bateria. O BMS monitora a tensão (\tilde{v}_b) , a corrente (\tilde{i}_b) e a temperatura (\tilde{T}_b) do módulo usando sensores.



Fonte: Autoria própria.

Um sistema de gerenciamento eficiente é essencial para proteger as células contra condições potencialmente prejudiciais, como sobrecarga, sobredescarga, correntes excessivas e operação fora das faixas seguras de temperatura, situações que podem comprometer significativamente a longevidade da bateria ou, em casos extremos, resultar em falhas catastróficas como incêndios ou explosões ^[31,34,60].

Entre as funções primárias do BMS, destaca-se o monitoramento constante da tensão individual de cada célula ou grupo de células, possibilitando a detecção precoce de desequilíbrios que podem indicar degradação ou falhas incipientes. Esta capacidade de monitoramento celular permite a implementação de sistemas de balanceamento que redistribuem a carga entre células para maximizar a capacidade utilizável do conjunto e prevenir que células individuais operem fora de seus limites seguros. O controle de temperatura representa outra função crítica do BMS, que monitora a distribuição térmica através do banco de baterias e aciona sistemas de refrigeração ou aquecimento conforme necessário. A operação dentro da faixa ideal de temperatura (tipicamente entre 20°C e 45°C para baterias de íons de lítio ^[61]) é essencial para maximizar a eficiência e a vida útil, visto que temperaturas elevadas aceleram reações químicas indesejáveis que causam degradação permanente, enquanto temperaturas muito baixas reduzem significativamente a potência disponível e a capacidade de aceitar carga rapidamente ^[31,34,60]. A estimativa de Estado de Carga (SOC - *State of Charge*) constitui uma das funções mais complexas e simultaneamente mais visíveis para o usuário final, sendo responsável por determinar o percentual de energia remanescente na bateria, análogo ao indicador de combustível em veículos convencionais ^[62]. Diferentemente dos combustíveis líquidos, cuja medição é relativamente direta, o SOC deve ser inferido através de algoritmos sofisticados que combinam múltiplos parâmetros, incluindo tensão, corrente, temperatura e histórico de uso. Complementarmente, o BMS calcula o Estado de Saúde (SOH - *State of Health*), um indicador que reflete a condição geral da bateria em comparação com suas especificações quando nova, quantificando sua degradação ao longo do tempo. Estes parâmetros são essenciais não apenas para informar o usuário sobre a autonomia remanescente, mas também para otimizar as estratégias de recarga e descarga que maximizem a vida útil da bateria ^[63].

Os componentes físicos de um BMS típico incluem unidades de controle eletrônico, sensores distribuídos (tensão, corrente, temperatura), circuitos de balanceamento, sistemas de refrigeração/aquecimento e interfaces de comunicação com outros sistemas do veículo. Os BMSs podem ser implementados com uma arquitetura centralizada — em que um único controlador supervisiona todas as células — ou distribuída, na qual múltiplos módulos de controle são organizados de forma hierárquica. Tendências recentes indicam uma preferência por configurações distribuídas, devido à maior redundância, escalabilidade e capacidade de processamento paralelo que essas oferecem. A complexidade destes sistemas aumenta proporcionalmente ao número de células sob gerenciamento, com veículos elétricos modernos frequentemente incorporando milhares de células individuais organizadas em módulos e bancos, exigindo monitoramento de centenas de pontos de medição em tempo real ^[31,34,60].

A integração do BMS com outros sistemas veiculares ocorre através de diversas interfaces de comunicação, tipicamente utilizando protocolos padronizados como Rede de Área de Controlador (CAN - *Controller Area Network*), permitindo interação coordenada com o sistema de propulsão, controles de climatização, interface com o usuário e, crescentemente, sistemas telemáticos que possibilitam diagnósticos remotos ^[64]. Esta integração sistêmica permite implementar estratégias sofisticadas de gerenciamento energético, como frenagem regenerativa adaptativa que ajusta automaticamente seus parâmetros com base no estado atual da bateria, ou climatização pré-condicionada durante o carregamento para otimizar o conforto sem comprometer a autonomia. Adicionalmente, os dados coletados e processados pelo BMS são instrumentais para diagnósticos preditivos, possibilitando a detecção antecipada de potenciais falhas e programação de manutenções preventivas antes que problemas mais sérios se manifestem ^[31, 34, 60].

No entanto, o BMS normalmente possui capacidade de processamento limitada, o que dificulta a implementação de modelos e estimadores mais complexos ^[34]. Essa limitação impede a aplicação de algoritmos avançados de estimação de estados que exigem maior poder computacional e de armazenamento para processar e armazenar os dados em tempo real. A integração de um gêmeo digital com o BMS representa uma evolução natural na busca por otimização do desempenho das baterias em veículos elétricos, permitindo que o sistema convencional de gerenciamento seja complementado por capacidades preditivas avançadas, baseadas não apenas em dados históricos e instantâneos, mas também em simulações prospectivas que antecipam o comportamento da bateria sob diversas condições [^{51,65]}. O desenvolvimento desta simbiose entre sistemas físicos e virtuais apresenta desafios técnicos consideráveis, incluindo a necessidade de algoritmos de estimação precisos, modelos matemáticos de alta fidelidade e infraestrutura computacional capaz de processar grandes volumes de dados.

As potenciais vantagens desta integração são múltiplas e impactantes para o ecossistema de veículos elétricos. A previsão mais precisa de autonomia representa um benefício imediato, permitindo estimativas que consideram não apenas condições atuais, mas projeções complexas incorporando topografia, condições climáticas antecipadas, padrões de condução e degradação específica daquela unidade. Em termos de diagnóstico, o gêmeo digital possibilita a identificação precoce de anomalias sutis que poderiam passar despercebidas por sistemas convencionais, através da comparação contínua entre comportamento observado e esperado, detectando desvios estatisticamente significativos antes que evoluam para falhas manifestas ^[52, 65].

A implementação bem-sucedida desta integração representa um passo fundamental na direção dos objetivos desta pesquisa, estabelecendo a base tecnológica necessária para que o gêmeo digital não apenas complemente, mas eventualmente assuma funções tradicionalmente desempenhadas pelo BMS convencional. Esta transição gradual de responsabilidades permitiria sistemas mais adaptativos e personalizados, capazes de evoluir suas estratégias de gerenciamento ao longo da vida útil do veículo, otimizando continuamente o equilíbrio entre desempenho, autonomia e longevidade da bateria. Tal evolução alinha-se perfeitamente com as tendências mais amplas de digitalização e virtualização da mobilidade elétrica, onde veículos progressivamente se transformam em plataformas interconectadas, com capacidades de auto-diagnóstico e aprendizagem contínua sobre seus próprios padrões de operação e degradação.

3.3.1 Banco de Baterias

A configuração do banco de baterias representa um aspecto fundamental no projeto de veículos elétricos, determinando características essenciais como densidade energética, potência disponível, confiabilidade, segurança e custos de produção. O desenvolvimento destas configurações envolve um complexo equilíbrio entre múltiplos requisitos frequentemente conflitantes, incluindo maximização de autonomia, minimização de peso e volume, gerenciamento térmico eficiente, facilidade de manufatura, custo competitivo e durabilidade ao longo da vida útil do veículo. Este campo tem experimentado rápida evolução nos últimos anos, com novas abordagens arquiteturais emergindo para superar limitações das configurações tradicionais e atender às crescentes demandas de mercado por veículos elétricos com maior autonomia e menor tempo de recarga ^[53, 60].

Antes de explorar as configurações dos bancos de baterias, é preciso deixar claro a distinção entre célula, módulo de bateria e banco de bateria. Cada termo refere-se a uma unidade específica dentro da hierarquia de montagem de um sistema de baterias, variando desde o nível mais básico de armazenamento de energia até o agrupamento complexo dessas unidades, como ilustrado na Figura 3.8 e descrito na Tabela 3.1.



Figura 3.8: Representação de célula, módulo de bateria e banco de bateria.

Fonte: Adaptado de Bhowmick $(2021)^{[66]}$.

	Tabela 3	3.1:	Definiq	ção de	célula,	módulo	de	bateria	е	banco	de	bateria.
--	----------	------	---------	--------	---------	--------	----	---------	---	-------	----	----------

Célula de Bateria (ou célula)A célula é a unidade fundamental de armazenamento de energia em uma bateria. Ela é composta, de forma genérica, por dois eletrodos (ânodo e cátodo), separados por um eletrólito, que permite o fluxo de íons entre os eletrodos durante os processos de carga e descarga, além de coletores de corrente que conduzem os elétrons para fora da célula. Entre os eletrodos, há ainda o separador, um material poroso eletricamente isolante que impede o contato direto entre o ânodo e o cátodo, evitando curtos- circuitos internos, ao mesmo tempo em que permite a livre passagem dos íons.Módulo de BateriaUm módulo de bateria é formado pela associação de várias células conectadas em série, paralelo ou uma combinação de ambos.Banco de Bateria (ou Pack de Bateria)Um banco de bateria é uma unidade composta por vários módulos de bateria interligados.	Termo	Definição
Módulo de BateriaUm módulo de bateria é formado pela associação de várias células conectadas em série, paralelo ou uma combinação de ambos.Banco de Bateria (ou Pack de Bateria)Um banco de bateria é uma unidade composta por vários módulos de bateria interligados.	Célula de Bateria (ou célula)	A célula é a unidade fundamental de armazenamento de energia em uma bateria. Ela é composta, de forma genérica, por dois eletrodos (ânodo e cátodo), separados por um eletrólito, que permite o fluxo de íons entre os eletrodos durante os processos de carga e descarga, além de coletores de corrente que conduzem os elétrons para fora da célula. Entre os eletrodos, há ainda o separador, um material poroso eletricamente isolante que impede o contato direto entre o ânodo e o cátodo, evitando curtos- circuitos internos, ao mesmo tempo em que permite a livre passagem dos íons.
Banco de Bateria (ou Pack de Bateria)Um banco de bateria é uma unidade composta por vários módulos de bateria interligados.	Módulo de Bateria	Um módulo de bateria é formado pela associação de várias células conectadas em série, paralelo ou uma combinação de ambos.
	Banco de Bateria (ou Pack de Bateria)	Um banco de bateria é uma unidade composta por vários módulos de bateria interligados.

Fonte: Autoria própria.

A arquitetura Célula para Módulo (CTM - *Cell-to-Module*) representa a abordagem tradicional e ainda predominante na indústria, caracterizando-se pela organização hierárquica em múltiplos níveis de integração. Nesta configuração, células individuais são

primeiramente agrupadas em módulos (tipicamente contendo entre 6 e 24 células), que são então combinados para formar o banco de bateria. Cada módulo incorpora seu próprio sistema de gerenciamento térmico, monitoramento eletrônico e estrutura mecânica de proteção, funcionando como uma unidade semi-independente dentro do sistema maior. Esta abordagem modular oferece diversas vantagens, incluindo facilidade de manufatura e montagem em linha de produção, possibilidade de substituição seletiva de módulos danificados durante manutenção, e flexibilidade para configurar diferentes capacidades de bateria utilizando os mesmos componentes básicos. No entanto, esta arquitetura tradicional impõe penalidades significativas em termos de densidade energética volumétrica e gravimétrica, devido ao espaço ocupado por estruturas de suporte, conectores, sistemas de refrigeração duplicados e carcaças de proteção em cada nível hierárquico ^[67].

A arquitetura Célula para Banco (CTP - *Cell-to-Pack*) representa uma evolução disruptiva que elimina o nível intermediário de modularização, integrando células diretamente no banco completo da bateria. Esta abordagem, pioneiramente implementada em escala comercial por fabricantes chineses como BYD e CATL, permite aumentos substanciais na densidade energética através da redução drástica de componentes estruturais redundantes, simplificação do sistema de refrigeração e maximização do espaço útil dentro do envelope disponível ^[68, 69]. Estudos comparativos indicam que a transição de CTM para CTP pode resultar na redução na contagem total de componentes em 40% menos peças, o que traduz-se em menores custos de manufatura e maior confiabilidade sistêmica. Os desafios desta arquitetura incluem maior complexidade de design inicial, necessidade de sistemas de monitoramento e controle mais sofisticados, e potenciais dificuldades em manutenção e reparos, uma vez que falhas celulares individuais podem exigir substituição de seções maiores do banco ^[67,70].

Uma evolução ainda maior é representada pela emergente arquitetura Célula para Chassi (CTC - *Cell-to-Chassis*), também denominada baterias estruturais, onde as células de bateria são integradas diretamente à estrutura do veículo, eliminando não apenas o nível modular, mas também a distinção entre banco de bateria e chassi. Nesta abordagem, as células tornam-se elementos estruturais que contribuem para a rigidez global do veículo, permitindo redução adicional de peso e maximização da utilização volumétrica. Pioneiros nesta tecnologia incluem a Tesla com seu conceito de "bateria estrutura" implementado no Model Y ^[71]. Esta configuração representa o ápice atual da integração, com potencial para redução em 40% de volume, além de benefícios secundários como melhor distribuição de massa, centro de gravidade mais baixo e superior rigidez do veículo. Os desafios significativos incluem complexidade de projeto, exigências de novos métodos de fabricação, questões de reciclabilidade e preocupações relacionadas à manutenção e substituição ao longo da vida útil do veículo ^[67,71,72].

3.4 Baterias de Lítio

As baterias de lítio (LIBs - *Lithium-Ion Battery*) representam um avanço significativo na tecnologia de armazenamento de energia, combinando princípios de física e química para fornecer alta densidade de energia, ciclo de vida longo e baixas taxas de autodescarga ^[73]. Desenvolvidas comercialmente pela Sony em 1991, as baterias de íons de lítio consolidaram-se como a principal tecnologia de armazenamento eletroquímico de energia, sendo amplamente utilizadas em aplicações que variam desde dispositivos eletrônicos portáteis até sistemas de tração em veículos elétricos ^[74]. O lítio desempenha um papel central na eficácia das LIBs, oferecendo a maior energia específica por peso e o maior potencial eletroquímico em comparação com materiais de bateria convencionais, como chumbo e zinco. Sua reatividade, leveza e capacidade de armazenar energia significativa em ligações atômicas contribuem para a alta densidade energética das LIBs ^[74].

As baterias de lítio funcionam com base em reações eletroquímicas. Estas reações envolvem o movimento de íons de lítio entre o cátodo e o ânodo durante os processos de carga e descarga, como ilustrado no diagrama presente na Figura 3.9.



Figura 3.9: Diagrama da célula de íons de lítio.

Fonte: Adaptado de Plett (2015)^[75].

Durante o carregamento, os íons de lítio são extraídos do eletrodo positivo e intercalados no eletrodo negativo, acompanhados pelo fluxo de elétrons no circuito externo. O processo é revertido durante a descarga, fornecendo energia elétrica. A tensão da célula de uma bateria é determinada pela diferença nos potenciais eletroquímicos dos eletrodos negativo (ânodo) e positivo (cátodo), sendo fortemente influenciada pelas propriedades redox dos materiais ativos utilizados. Elementos como o lítio, por exemplo, apresentam elevado potencial de redução, o que contribui para a obtenção de tensões nominais elevadas por célula ^[75]. No entanto, a tensão terminal observada externamente também é afetada por quedas de tensão internas associadas à resistência ôhmica dos componentes, incluindo os coletores de corrente, o eletrólito, as interfaces eletrodo-eletrólito e o separador. Essas perdas resistivas tornam-se particularmente relevantes em regimes de alta corrente, onde a diferença entre a tensão de circuito aberto (OCV - *Open Circuit Voltage*) e a tensão terminal pode ser significativamente ampliada, impactando o desempenho e a eficiência energética da célula.

Com relação aos materiais usados na fabricação de baterias, o grafite é comumente usado para eletrodos negativos, consistindo em camadas de grafeno onde os íons de lítio se intercalam. A interação entre o lítio e o grafite não é uma reação química típica, mas um processo de intercalação, onde átomos de lítio são inseridos ou removidos da estrutura do grafite. Vários materiais podem ser usados para eletrodos positivos, como o óxido de lítio-cobalto, que é uma escolha comum para pequenos dispositivos eletrônicos. No entanto, alternativas como o óxido de lítio-manganês e o fosfato de ferro-lítio também são utilizadas [75]

O eletrólito nas baterias de íon-lítio desempenha um papel importante como meio de transferência de íons e normalmente é um sal de lítio como o hexafluorofosfato de lítio dissolvido em um solvente orgânico. Esta configuração fornece a condutividade iônica necessária sem participar da reação química em si ^[75]. Ainda, o separador é uma membrana permeável que permite a passagem de íons de lítio, evitando o contato direto entre os eletrodos negativo e positivo, o que levaria a um curto-circuito. Um aspecto único das baterias de lítio é a formação da camada SEI. Esta camada se forma na superfície do eletrodo negativo de grafite e é crucial para o funcionamento da bateria, atuando como uma barreira que inibe futuras reações entre o eletrodo e o eletrólito, ao mesmo tempo que permite que os íons de lítio se movam livremente ^[75].

Normalmente, o termo 'célula' refere-se a uma unidade individual que abrange ânodos, cátodos, separadores, terminais, eletrólito e revestimento. Já o termo 'bateria' é empregado em seu sentido mais amplo, denotando potencialmente uma única célula, um módulo de bateria ou uma bateria inteira. Um módulo de bateria é uma unidade de nível médio na arquitetura de baterias, consistindo em várias células conectadas entre si para atingir a tensão e a capacidade desejadas. Em contraste, uma bateria é um conjunto de nível superior que compreende vários módulos ^[75].

3.4.1 O Problema do Envelhecimento

O envelhecimento de uma bateria de lítio refere-se à diminuição irreversível da sua capacidade de armazenamento de carga e da sua potência ao longo do tempo e ciclos de uso. Este fenômeno ocorre devido a uma variedade de mudanças físicas, químicas e mecânicas que acontecem a níveis molecular e celular das baterias. A perda de desempenho manifesta-se em uma redução na duração da carga, aumentando a frequência de carregamento necessário e, eventualmente, levando a bateria a um estado no qual ela já não é funcional para o uso pretendido ^[17,18].

Existem uma série de mecanismos que contribuem para a degradação das baterias de lítio, como o crescimento da camada SEI, craqueamento de material ativo, oxidação de eletrólito, decomposição de ligante e revestimento de lítio. Dependendo das diversas condições operacionais, como temperatura e frequência de carregamento, esses processos podem ser acelerados ^[76, 77].

3.4.2 Modelagem de Baterias

No domínio da investigação sobre a modelagem de baterias, as classificações principais incluem modelos de circuitos elétricos equivalentes, eletroquímicos, e baseado em dados [^{60,75,78]}. Esses modelos são empregados para obter informações úteis sobre os estados internos das baterias, como Estado de Saúde (SOH - *State of Health*), Estado de Potência (SOP - *State of Power*), Estado de Funcionalidade (SOF - *State of Functionality*), Estado de Carga (SOC - *State of Charge*), Estado de Energia (SOE - *State of Energy*), Estado de Temperatura (SOT - *State of Temperature*) e Vida Útil Restante (RUL - *Remaining Useful Life*) ^[79,80]. Ademais, alguns modelos também buscam prever a resposta de tensão da célula sob várias taxas de descarga ^[81], ou ainda a concentração de íons de lítio dentro dos eletrodos ^[41]. Compreender estes estados é crucial para otimizar o desempenho e a longevidade das baterias, particularmente em veículos elétricos e sistemas de armazenamento de energia.

O SOH descreve o grau de envelhecimento da bateria, normalmente definido usando parâmetros de capacidade ou resistência interna. Por exemplo, pode ser quantificado como a razão entre a capacidade total atual C_a e a capacidade nominal C_n , i.e., SOH = $\frac{C_a}{C_n}$, ou em termos de razão entre a impedância atual R_a e a impedância nominal R_n , i.e., SOH = $\frac{R_a}{R_n}$. SOP representa a capacidade de potência da bateria, definida como a razão entre a potência de pico P_p e a potência nominal P_n , i.e., SOP = $\frac{P_p}{P_n}$. Este estado é crucial para determinar a capacidade da bateria de atender às demandas de energia, especialmente em aplicações de alta potência, como no caso dos VE. O SOF é um indicador da capacidade instantânea de fornecimento de potência da bateria dentro da Área Operacional Segura (SOA - Safe Operating Area), levando em conta o SOC, o SOH e, eventualmente, o SOT. A potência disponível no instante t pode ser expressa como:

$$P(t) = P_{\max} \cdot SOC(t) \cdot SOH(t)$$
(3.2)

sendo $P_{\rm max}$ a potência máxima que uma célula nova pode fornecer.

A partir disso, o SOF é definido como:

$$SOF(t) = \frac{P(t) - P_d(t)}{P_{\max} - P_d(t)}$$
 (3.3)

na qual $P_d(t)$ representa a potência demandada no instante t. O valor de SOF(t) varia entre 0 e 1, refletindo o quanto a bateria ainda pode fornecer em relação à sua condição ideal ^[79,80].

SOC indica a capacidade restante da bateria, usado para gerenciar o uso de energia e planejar ciclos de recarga ^[62]. SOE, semelhante ao SOC, informa o status de energia da bateria. SOE pode ser definido como a razão entre a energia restante da bateria ${\cal E}_r$ e a energia máxima disponível E_{max} , i.e., SOE = $\frac{E_r}{E_{max}}$. RUL, outro estado crítico, é definido como o tempo restante ou o número de ciclos de carga/descarga até que a bateria atinja seu fim de vida útil (EOL - End of Life). O EOL é geralmente determinado pelo ponto em que a capacidade da bateria se reduz a um limite específico em relação à sua capacidade nominal inicial. Para veículos elétricos, o RUL é comumente considerado como o tempo até que o SOH da bateria atinja 80%, indicando que a capacidade disponível caiu para 80% do valor original, ponto no qual o desempenho da bateria pode não ser mais adequado para a aplicação. A estimativa precisa do RUL é essencial para prever quando uma bateria precisará ser substituída. Finalmente, o SOT, que descreve o estado térmico da bateria em tempo real, é crucial para garantir a segurança e a eficiência da bateria. A definição precisa de SOT é complexa devido ao calor gerado pelas reações eletroquímicas dentro da bateria e sua transmissão para a superfície. O monitoramento do SOT é fundamental para evitar fuga térmica, uma das principais causas de incidentes de incêndio ou explosão em baterias de lítio ^[79, 80].

Modelo eletroquímico

Sistemas eletroquímicos, como baterias, podem ser modelados com base em princípios físicos. Esses modelos oferecem detalhes abrangentes sobre os processos eletroquímicos internos da bateria. Eles consistem em uma série de equações diferenciais parciais interrelacionadas, que explicam como as reações eletroquímicas internas geram e modulam o potencial da célula, permitindo compreender de forma aprofundada a dinâmica operacional da bateria ^[75, 78, 82, 83].

Um modelo de célula em microescala é um tipo de modelo eletroquímico usado para simular e analisar os comportamentos e reações que ocorrem dentro de uma bateria em escala microscópica ^[75]. As cinco principais equações acopladas para modelar os processos eletroquímicos no interior de uma célula de bateria são:

• Conservação de carga na fase sólida:

$$\nabla \cdot \mathbf{i}_s = \nabla \cdot \left(-\sigma_s \nabla \phi_s \right) = 0, \qquad (3.4)$$

onde ∇ é o operador diferencial vetorial nabla, utilizado para calcular tanto o divergente da densidade de corrente na fase sólida ($\nabla \cdot \mathbf{i}_s$) quanto o gradiente do potencial elétrico ($\nabla \phi_s$), \mathbf{i}_s é a densidade de corrente na fase sólida, σ_s é a condutividade elétrica e ϕ_s é o potencial elétrico na fase sólida. A fase sólida em uma célula eletroquímica refere-se aos materiais condutores onde ocorre o transporte eletrônico, como os eletrodos (ânodo e cátodo). Nessa fase, os elétrons se deslocam através de um meio condutor (tipicamente materiais como grafite ou óxidos metálicos), e não há mobilidade iônica significativa. Essa equação garante a conservação da carga elétrica na fase sólida da bateria. A divergência da densidade de corrente dentro dessa fase é nula; em outras palavras, a taxa com que a carga entra em um dado volume do material sólido é igual à taxa com que ela sai, assumindo que não existam nem fontes nem sumidouros de carga nesse material.

• Conservação de massa na fase sólida:

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} = \nabla \cdot \left(D_s \nabla c_s \right), \tag{3.5}$$

onde c_s é a concentração de íons de lítio na fase sólida, e D_s é o coeficiente de difusão desses íons nessa mesma fase. Essa equação descreve a difusão de íons de lítio na fase sólida da bateria, garantindo que a variação de c_s ao longo do tempo corresponda ao fluxo líquido desses íons através do material sólido.

• Conservação de massa no eletrólito:

$$\frac{\partial c_e}{\partial t} = \nabla \cdot \left(D_e \nabla c_e \right) - \frac{\mathbf{i}_e \cdot \nabla t_+^0}{F} - \nabla \cdot \left(c_e \mathbf{v}_0 \right), \tag{3.6}$$

onde c_e é a concentração de íons de lítio no eletrólito (fase líquida), D_e é o respectivo coeficiente de difusão, \mathbf{i}_e é a densidade de corrente iônica no eletrólito, t^0_+ é o número de transferência do íon positivo, F é a constante de Faraday e \mathbf{v}_0 é a velocidade do eletrólito devida à convecção. Assim como na fase sólida, esta equação representa a difusão de íons no eletrólito, incluindo os efeitos da migração iônica (devido ao campo elétrico) e da convecção do eletrólito.

• Conservação de carga no eletrólito:

$$\nabla \cdot \mathbf{i}_{e} = \nabla \cdot \left(-\kappa \nabla \phi_{e} - \frac{2\kappa RT}{F} \left(1 + \frac{\partial \ln f_{\pm}}{\partial \ln c_{e}} \right) (t_{+}^{0} - 1) \nabla \ln c_{e} \right) = 0, \quad (3.7)$$

onde κ é a condutividade iônica, ϕ_e é o potencial elétrico no eletrólito, R é a constante universal dos gases, T é a temperatura absoluta, F é a constante de Faraday e f_{\pm} é o coeficiente de atividade dos íons. Essa equação garante a conservação da carga na fase eletrolítica.

• Cinética da reação na interface sólido/eletrólito:

$$j = \frac{i_0}{F} \left[\exp\left(\frac{(1-\alpha_c)F\eta}{RT}\right) - \exp\left(-\frac{\alpha_c F\eta}{RT}\right) \right], \qquad (3.8)$$

onde j é a densidade de corrente da reação eletroquímica, i_0 é a densidade de corrente de troca, α_c é o coeficiente de transferência de carga e η é o sobrepotencial. Aqui, F é a constante de Faraday, R é a constante universal dos gases e T é a temperatura absoluta. Essa equação, conhecida como equação de Butler-Volmer, descreve a cinética das reações eletroquímicas na interface entre o eletrodo sólido e o eletrólito, considerando as reações direta (oxidação) e inversa (redução) que ocorrem durante a carga e descarga da bateria.

Em conjunto, essas equações estabelecem uma estrutura matemática rigorosa para

descrever os fenômenos acoplados de transporte de massa, conservação de carga e cinética eletroquímica que regem o comportamento dinâmico de uma célula eletroquímica de íons de lítio ^[75,83]. Tais modelos são cruciais para prever o desempenho da bateria, diagnosticar problemas e aprimorar tanto o projeto quanto os sistemas de gerenciamento desse dispositivo.

Modelo de circuito elétrico equivalente

Historicamente, a complexidade dos modelos eletroquímicos e as limitações computacionais necessitaram de uma abordagem alternativa, levando ao desenvolvimento da modelagem de circuitos equivalentes. Nas aplicações atuais, particularmente em veículos elétricos, existe uma necessidade crítica de equilibrar a complexidade do modelo com a precisão para integração em microprocessadores para obter resultados em tempo real. Esses modelos são construídos utilizando resistores, capacitores e fontes de tensão para representar a dinâmica da bateria. ^[75, 78].

Wei et al. (2021) ^[84] utilizou o modelo de bateria de circuito elétrico equivalente, similar ao ilustrado na Figura 3.10, para estimar simultaneamente a corrente de carga e o estado de carga em baterias de lítio. Este modelo é especialmente pertinente para aplicações como dispositivos portáteis e baterias inteligentes, onde a integração de sensores de corrente pode ser um problema devido a considerações de tamanho, custo ou complexidade ^[84]. A Figura 3.10 representa um modelo de circuito equivalente composto por uma fonte de tensão dependente do estado de carga, $v_{oc}(soc)$, conectada em série com uma resistência ôhmica R_0 e um ramo paralelo RC, formado por uma resistência R_1 e um capacitor C_1 . Este arranjo é amplamente utilizado por apresentar um bom compromisso entre complexidade computacional e precisão na representação da dinâmica da célula. O ramo RC é responsável por modelar os efeitos de polarização e a dinâmica de relaxamento da tensão durante transientes de corrente. A corrente i_b representa a corrente total da célula, e a tensão terminal v_b é medida nos terminais externos do modelo. Figura 3.10: Modelo de Circuito Elétrico Equivalente com um ramo RC.



Fonte: Adaptado de Wei et al. $\left(2021\right)^{[84]}$

A tensão de terminal do modelo da Figura 3.10 é dada por:

$$v_{\rm b}(t) = v_{\rm oc}(soc(t)) - i_{\rm b}(t)R_0 - v_{\rm P}(t), \qquad (3.9)$$

na qual $v_b(t)$ é a tensão terminal, $v_{oc}(soc(t))$ é a tensão de circuito aberto como função do estado de carga, $i_b(t)$ é a corrente da célula, $v_P(t)$ é a tensão no capacitor do ramo RC e R_0 é a resistência ôhmica.

A tensão $v_{\rm P}(t)$ é a mesma nos dois elementos do ramo $R_1 - C_1$. Como o resistor e o capacitor estão em paralelo, vale:

$$v_{\mathrm{P}}(t) = R_1 \, i_{\mathrm{P}}(t),$$

e a corrente que atravessa o capacitor é:

$$i_C(t) = C_1 \frac{dv_P(t)}{dt} = C_1 R_1 \frac{di_P(t)}{dt}.$$

Aplicando a lei das correntes em nó (KCL - *Kirchhoff's Current Law*) na junção do ramo RC com a resistência ôhmica R_0 ,

$$i_b(t) = i_P(t) + i_C(t) = i_P(t) + C_1 R_1 \frac{di_P(t)}{dt}.$$
(3.10)

Isolando a derivada de $i_{\rm P}(t)$ em (3.10) obtém-se a dinâmica de $i_{\rm P}$:

Capítulo 3. Fundamentação Teórica

$$\frac{di_{\rm P}(t)}{dt} = -\frac{1}{R_1 C_1} i_{\rm P}(t) + \frac{1}{R_1 C_1} i_b(t).$$
(3.11)

Considerando um sistema avaliado em instantes de tempo discretos, denotados por k a equação 3.9 pode ser escrita como:

$$v_b[k] = v_{oc}(soc[k]) - i_b[k]R_0 - i_P[k]R_1$$
(3.12)

na qual $v_b[k]$, $v_{oc}(soc[k])$, $i_b[k]$ e $i_P[k]$ representam, no tempo discreto, a tensão terminal, a tensão de circuito aberto, a corrente da célula, a corrente que passa no resistor R_1 , respectivamente.

A dinâmica contínua de $i_{\rm P}(t)$ dada em (3.11) pode ser discretizada usando a solução exata da dinâmica de primeira ordem ^[75]:

$$i_{\rm P}[k+1] = \exp\left(-\frac{\Delta t}{R_1 C_1}\right) i_{\rm P}[k] + \left(1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{R_1 C_1}\right)\right) i_b[k].$$
(3.13)

O SOC obtido pela Contagem de Coulomb é dado por:

$$soc_{CC}[k] = soc_{CC}[k-1] - \frac{\eta_{CC} \cdot i_b[k] \cdot \Delta t}{3600 \cdot Q_{nom}},$$
(3.14)

na qual η_{CC} é a eficiência coulômbica, Q_{nom} é a capacidade nominal da célula e Δt é o passo de tempo.

A representação em espaço de estados é:

$$\mathbf{x}[k+1] = \mathbf{A}_{\mathbf{CC}}\mathbf{x}[k] + \mathbf{B}_{\mathbf{CC}}u[k], \qquad (3.15)$$

$$\mathbf{y}[k] = \mathbf{h}_{\mathbf{CC}}(\mathbf{x}[k], i_b[k]) = v_b[k], \qquad (3.16)$$

na qual:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} i_{\mathrm{P}} \\ soc \end{bmatrix}, \quad u[k] = i_b[k],$$

$$\mathbf{A_{CC}} = \begin{bmatrix} e^{-\frac{\Delta t}{R_1 C_1}} & 0\\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B_{CC}} = \begin{bmatrix} 1 - e^{-\frac{\Delta t}{R_1 C_1}}\\ -\frac{\Delta t}{3600 \cdot Q_{nom}} \end{bmatrix},$$
$$\mathbf{h_{CC}}(\mathbf{x}[k], i_b[k]) = v_{oc}(soc_{CC}[k]) - R_0 i_b[k] - R_1 i_{\mathrm{P}}[k],$$

com matriz de medição \mathbf{H}_{CC} :

$$\mathbf{H}_{CC} = \begin{bmatrix} \frac{\partial v_b}{\partial i_{\mathrm{P}}} & \frac{\partial v_b}{\partial soc} \end{bmatrix},$$

com:

$$\frac{\partial v_b}{\partial i_{\rm P}} = -R_1, \qquad \frac{\partial v_b}{\partial soc} = \frac{\partial v_{oc}}{\partial soc_{CC}} \Big|_{soc_{CC} = \hat{soc}[k]}.$$

Modelo eletroquímico simplificado acoplado a um circuito elétrico equivalente

Partindo do modelo de circuito elétrico equivalente apresentado anteriormente, é possível usar um modelo eletroquímico simplificado, desenvolvido por Rakmatov-Vrudhula (RV) ^[85, 86], para aprimorar a representação da bateria. O RV fornece uma representação simplificada dos processos eletroquímicos internos da célula. Dessa forma, é possível combiná-lo com um circuito elétrico equivalente para formar o modelo RV-ECM (*Rakmatov-Vrudhula Electrical Circuit Model*), oferecendo maior precisão na captura da dinâmica do SOC, às custas de uma complexidade computacional maior ^[87].

Assim como no modelo ECM, a função de Tensão de Circuito Aberto (v_{oc}) versus SOC é essencial no modelo do RV-ECM, pois vincula as características de tensão diretamente ao SOC. No entanto, a curva $v_{oc}(soc)$ apresenta histerese, necessitando de determinação precisa através de ciclos de carga/descarga de baixa corrente ^[88,89].

O modelo RV provê uma descrição da dinâmica de difusão dentro da célula de íons de lítio, levando a uma representação mais precisa do comportamento do SOC do que a contagem de Coulomb, e menos complexa do que o modelo eletroquímico. O conjunto (3.17)-(3.23) define a formulação matemática do modelo RV.

$$\alpha = \int_0^{L_b} i_b(\tau) d\tau + 2\sum_{m=1}^\infty \int_0^{L_b} i_b(\tau) e^{-\beta^2 m^2 (L_b - \tau)} d\tau$$
(3.17)

Capítulo 3. Fundamentação Teórica

$$\sigma(t) = \int_0^t i_b(\tau) d\tau + 2\sum_{m=1}^\infty \int_0^t i_b(\tau) e^{-\beta^2 m^2 (t-\tau)} d\tau$$
(3.18)

na qual $\alpha \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ é a capacidade total da célula em Coulombs (C), $\beta \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ é o parâmetro de difusão em s⁻¹, i_b é a corrente da célula em ampere (A), σ é a carga perdida, também em Coulombs, L_b é o tempo de descarga da bateria e m é o índice da soma, que é truncada até um valor M. Este parâmetro M define a quantidade de termos somados: quanto maior for M, maior será a resolução da representação eletroquímica do modelo. Aplicando-se a transformada de Laplace em (3.18) obtém-se (3.19) ^[87]:

$$\sigma(s) = \frac{1}{s} + 2\sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{s + \beta^2 m^2}$$
(3.19)

O modelo de tempo discreto para o modelo de difusão é $^{[87]}:$

$$\sigma_d[k] = \sigma_d[k-1] + i_b[k]\Delta t \tag{3.20}$$

$$\sigma_{um}[k] = e^{-\beta^2 m^2 \Delta t} \sigma_{um}[k-1] - \frac{e^{-\beta^2 m^2 \Delta t} - 1}{\beta^2 m^2} i_b[k],$$

$$m \in [1, 2, \dots, M]$$
(3.21)

$$\sigma[k] = \sigma_d[k] + 2\sum_{m=1}^{M} \sigma_{um}[k]$$
(3.22)

O SOC é então dado por ^[87]:

$$soc_{RV}[k] = 100 \frac{\alpha - \sigma[k]}{\alpha}\%$$
(3.23)

Em espaço de estados:

$$\mathbf{x}_{\mathrm{dif}}[k+1] = \mathbf{A}_{\mathrm{dif}}\mathbf{x}_{\mathrm{dif}}[k] + \mathbf{B}_{\mathrm{dif}}u[k], \qquad (3.24)$$

$$\mathbf{y}[k] = soc_{RV}[k], \tag{3.25}$$

na qual:

$$\mathbf{x}_{dif} = \begin{bmatrix} \sigma_{u1} \\ \sigma_{u2} \\ \vdots \\ \sigma_{uM} \\ \sigma_d \end{bmatrix}, \quad u[k] = i_b[k],$$

$$\mathbf{A}_{dif} = \begin{bmatrix} e^{-\beta^2 \Delta t} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & e^{-\beta^2 2^2 \Delta t} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & e^{-\beta^2 M^2 \Delta t} & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{B}_{dif} = \begin{bmatrix} \frac{-\left(e^{-\beta^2 \Delta t} - 1\right)}{\beta^2 \cdot 2^2} \\ \vdots \\ -\left(e^{-\beta^2 M^2 \Delta t} - 1\right) \\ \frac{\beta^2 \cdot M^2}{\Delta t} \end{bmatrix},$$

$$\sigma[k] = \mathbf{C}_{\mathbf{dif}} \begin{bmatrix} \sigma_{u1}[k] \\ \sigma_{u2}[k] \\ \vdots \\ \sigma_{uM}[k] \\ \sigma_d[k] \end{bmatrix}$$

е

$$\mathbf{C}_{\mathbf{dif}} = \begin{bmatrix} 2 & 2 & \cdots & 2 & 1 \end{bmatrix}.$$

A partir do modelo de difusão discreto obtido, é possível aproveitar a equações de circuito desenvolvidas na subseção anterior substituindo-se o método de cálculo de SOC. Assim, a representação em espaço de estados da célula com RV-ECM é:

$$\mathbf{x}[k+1] = \mathbf{A}_{\mathbf{R}\mathbf{V}}\mathbf{x}[k] + \mathbf{B}_{\mathbf{R}\mathbf{V}}u[k], \qquad (3.26)$$

$$\mathbf{y}[k] = \mathbf{h}_{\mathbf{R}\mathbf{V}}(\mathbf{x}[k], i_b[k]), \qquad (3.27)$$

na qual:

$$\begin{split} \mathbf{x} &= \begin{bmatrix} i_{\mathrm{P}} \\ \mathbf{x}_{\mathrm{dif}} \end{bmatrix}, \quad u[k] = i_{b}[k], \\ \mathbf{A}_{\mathrm{RV}} &= \begin{bmatrix} e^{-\frac{\Delta t}{R_{1}C_{1}}} & [\mathbf{0}]_{1 \times M + 1} \\ [\mathbf{0}]_{M + 1 \times 1} & \mathbf{A}_{\mathrm{dif}} \end{bmatrix}, \\ \mathbf{B}_{\mathrm{RV}} &= \begin{bmatrix} 1 - e^{-\frac{\Delta t}{R_{1}C_{1}}} \\ \mathbf{B}_{\mathrm{dif}} \end{bmatrix}, \end{split}$$

$$\mathbf{h_{RV}}(\mathbf{x}[k], i_b[k]) = v_{oc}(soc_{RV}[k]) - R_0 i_b[k] - R_1 i_P[k],$$

com matriz de medição \mathbf{H}_{RV} :

$$\mathbf{H}_{RV} = \begin{bmatrix} \frac{\partial v_b}{\partial i_{\rm P}} & \frac{\partial v_b}{\partial \mathbf{x}_{\rm dif}} \end{bmatrix}$$

com:

$$\frac{\partial v_b}{\partial i_{\rm P}} = -R_1, \qquad \frac{\partial v_b}{\partial \mathbf{x}_{\rm dif}} = \frac{\partial v_{oc}}{\partial soc_{RV}} \left(-\frac{\mathbf{C}_{\rm dif}}{\alpha}\right) \Big|_{soc_{RV} = \hat{soc}[k]}$$

Modelo de bateria ECM e RV-ECM com circuito térmico

A gestão térmica é um dos aspectos mais críticos na operação de baterias de íons de lítio, especialmente em aplicações de alta potência, como veículos elétricos e sistemas de armazenamento de energia. Muitas características da bateria, incluindo resistências internas e capacidade disponível, são fortemente dependentes da temperatura de operação ^[90]. Além disso, a temperatura interna de uma célula pode diferir significativamente da temperatura ambiente ou da superfície, especialmente durante correntes altas, tornando importante acompanhar a dinâmica térmica para garantir segurança, otimizar o desempenho e prolongar a vida útil das baterias ^[91].

O monitoramento térmico é um componente crucial dos BMSs, devido à necessidade de evitar superaquecimento, uma das principais causas de falhas e acidentes. Temperaturas elevadas aceleram mecanismos de degradação, como o crescimento da camada SEI, aumentando a resistência interna ao longo do tempo ^[92].

Como apenas a temperatura superficial da bateria é acessível diretamente em alguns veículos elétricos, modelos térmicos podem atuar como sensores virtuais, permitindo estimar a temperatura interna e da superfície, possibilitando implementar estratégias eficientes de gerenciamento térmico sem instrumentação invasiva ^[93].

O comportamento térmico das baterias de íons de lítio é definido pelo equilíbrio entre geração e transferência de calor. Em células cilíndricas, como os formatos 18650 ou 21700, o calor gerado internamente advém não apenas do fluxo de corrente elétrica, responsável por perdas ôhmicas nos componentes internos, mas também das reações eletroquímicas que ocorrem nos eletrodos. Assim, o aquecimento interno resulta da combinação de efeitos resistivos e reativos, sendo influenciado pelas condições de carga, descarga e temperatura ambiente. Modelos térmicos de dois estados, conforme ilustrado na Figura 3.11, permitem a representação diferenciada da temperatura no interior da célula (região central) e na superfície externa ^[93,94]. Na Figura 3.11a evidenciam-se três nós térmicos: o núcleo (T_c) , a superfície (T_s) e o ambiente (T_{amb}) . O fluxo de calor por condução entre núcleo e superfície é limitado pela resistência térmica R_c , ao passo que a convecção/irradiação da superfície para o meio é modelada por R_o . Na Figura 3.11b está ilustrado o balanço energético em um circuito RC equivalente, cuja dinâmica contínua é descrita pelas equações (3.28) e (3.29). Essas equações podem ser discretizadas para integração em tempo real, servindo como base para monitoramento térmico e algoritmos de estimação em BMSs.

Figura 3.11: Diagrama esquemático e modelo de circuito elétrico equivalente do comportamento térmico da célula.





(a) Diagrama esquemático da célula.

(b) Diagrama do circuito elétrico equivalente do comportamento térmico da célula.

Fonte: Adaptado de Pang et al. (2021) e Dai et al. (2015) ^[93,94].

Este modelo térmico pode ser representado pelas seguintes equações diferenciais acopladas:

$$C_{c}\frac{d(T_{c} - T_{amb})}{dt} = Q - \frac{T_{c} - T_{s}}{R_{c}},$$
(3.28)

$$C_s \frac{d(T_s - T_{amb})}{dt} = \frac{T_c - T_s}{R_c} - \frac{T_s - T_{amb}}{R_o},$$
(3.29)

onde T_c é a temperatura do núcleo, T_s é a temperatura da superfície, T_{amb} é a temperatura ambiente (fluido refrigerante), Q é o calor gerado internamente pela célula, R_c é a resistência térmica centro-superfície, R_0 é a resistência térmica superfície-ambiente, C_c é a capacidade térmica do núcleo e C_s é a capacidade térmica da superfície ^[91,93,94].

Normalmente, células pequenas como as 18650 e 21700 possuem uma capacidade térmica da superfície muito pequena, ($C_s < 5JK^{-1}$), podendo muitas vezes ser ignorada, resultando nas seguintes equações diferenciais acopladas:

$$C_{c}\frac{d(T_{c} - T_{amb})}{dt} = Q - \frac{T_{c} - T_{s}}{R_{c}},$$
(3.30)

$$0 = \frac{T_c - T_s}{R_c} - \frac{T_s - T_{amb}}{R_o},$$
(3.31)

onde o calor gerado internamente pela célula é definido como ^[95]:

$$Q = (v_{oc} - v_b) \cdot i_b + i_b T_s \cdot \frac{\partial v_{oc}}{\partial T_s}, \qquad (3.32)$$

na qual v_{oc} é a tensão de circuito aberto, v_b é a tensão de terminal da célula e i_b é a corrente da célula. O segundo termo da equação, $i_b T_s \cdot \frac{\partial v_{oc}}{\partial T_s}$, está relacionado à variação da tensão de circuito aberto com a temperatura da superfície da célula T_s e é frequentemente desprezado por apresentar contribuição desprezível em comparação com o primeiro termo ^[93].

Essas equações capturam a dinâmica básica do calor gerado internamente e sua transferência até o ambiente. Assim, com a parte térmica definida é possível acoplá-lo a um modelo elétrico da bateria que fornece v_b , v_{oc} e i_b . Essa abordagem permite obter estimativas das temperaturas na superfície e no centro da célula com apenas medições de temperatura ambiente, sem a necessidade da instalação de sensores térmicos na superfície da célula ^[93].

A partir de (3.30)-(3.31), definindo as diferenças de temperatura em relação ao ambiente

como $T_{cs} = T_c - T_{amb}$ e $T_{ss} = T_s - T_{amb}$, obtém-se

$$C_c \, \dot{T}_{cs} = Q \; - \; \frac{T_{cs} - T_{ss}}{R_c}, \tag{3.33}$$

$$0 = \frac{T_{cs} - T_{ss}}{R_c} - \frac{T_{ss}}{R_0} \implies T_{ss} = \frac{R_o}{R_o + R_c} T_{cs}.$$
 (3.34)

Com o método de Euler para um passo Δt obtém-se

$$T_{cs}[k+1] = T_{cs}[k] + \frac{\Delta t}{C_c} \left(Q[k] - \frac{T_{cs}[k] - T_{ss}[k]}{R_c} \right), \qquad (3.35)$$

$$T_{ss}[k+1] = \frac{R_o}{R_o + R_c} T_{cs}[k].$$
(3.36)

Re-escrevendo (3.35)–(3.36) em forma matricial, com $\mathbf{x}_{\text{th}} = [T_{cs} \ T_{ss}]^{\top}$ e $\mathbf{u}_{\text{th}} = Q$, tem-se

$$\mathbf{x}_{\rm th}[k+1] = \mathbf{A}_{\rm th}\mathbf{x}_{\rm th}[k] + \mathbf{B}_{\rm th}\mathbf{u}_{\rm th}, \qquad \mathbf{A}_{\rm th} = \begin{bmatrix} 1 - \frac{\Delta t}{C_c R_c} & \frac{\Delta t}{C_c R_c} \\ \frac{R_o}{R_o + R_c} & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B}_{\rm th} = \begin{bmatrix} \frac{\Delta t}{C_c} \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (3.37)$$

Nos experimentos deste trabalho adota-se

$$Q[k] = (v_{oc}[k] - v_b[k]) \cdot i_b[k], \qquad (3.38)$$

que desconsidera o termo $i_b T_s \cdot \frac{\partial v_{oc}}{\partial T_s}$ da equação (3.32), uma vez que é relativamente pequeno em comparação com a geração total de calor ^[93].

Fazendo os parâmetros elétricos (R_0, R_1, C_1, Q_{nom}) e os coeficientes da difusão (α, β) funções da temperatura de superfície $T_s[k] = T_{ss}[k] + T_{amb}[k]$, as matrizes do subsistema elétrico variam a cada passo de tempo:

$$\mathbf{A_{CC}}(T_s[k]) = \begin{bmatrix} \exp\left(-\frac{\Delta t}{R_1(T_s[k])C_1(T_s[k])}\right) & 0\\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{B_{CC}}(T_s[k]) = \begin{bmatrix} 1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{R_1(T_s[k])C_1(T_s[k])}\right)\\ -\frac{\Delta t}{3600 Q_{nom}(T_s[k])} \end{bmatrix}$$

Com $\mathbf{x}_{\mathbf{CC}} = \begin{bmatrix} i_{\mathrm{P}} & soc \end{bmatrix}^{\top}, \mathbf{x}_{\mathbf{th}} = \begin{bmatrix} T_{cs} & T_{ss} \end{bmatrix}^{\top} \in \mathbf{u} = \begin{bmatrix} i_{b} & Q \end{bmatrix}^{\top}$, a forma em espaço de estados

do modelo de circuito elétrico equivalente com dinâmica térmica (ECMT - *Electrical Circuit Model with Thermal dynamics*) torna-se:

$$\mathbf{x}_{\mathbf{CCT}}[k+1] = \mathbf{A}_{\mathbf{CCT}}[k] \mathbf{x}_{CCT}[k] + \mathbf{B}_{\mathbf{CCT}}[k] \mathbf{u}[k], \qquad \mathbf{x}_{\mathbf{CCT}} = \begin{vmatrix} \mathbf{x}_{\mathbf{CC}} \\ \mathbf{x}_{\mathbf{th}} \end{vmatrix},$$

$$\mathbf{A}_{\mathbf{CCT}}[k] = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{\mathbf{CC}}(T_s[k]) & [\mathbf{0}]_{2\times 2} \\ & & \\ [\mathbf{0}]_{2\times 2} & \mathbf{A}_{\mathbf{th}} \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{B}_{\mathbf{CCT}}[k] = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{\mathbf{CC}}(T_s[k]) & [\mathbf{0}]_{2\times 1} \\ & & \\ [\mathbf{0}]_{2\times 1} & \mathbf{B}_{th} \end{bmatrix}.$$

A equação de saída é agora:

$$\mathbf{h}_{\mathbf{CCT}}(\mathbf{x}[k], i_b[k]) = y_{CCT}[k] = v_{oc} \left(soc[k], T_s[k] \right) - R_0 \left(T_s[k] \right) i_b[k] - R_1 \left(T_s[k] \right) i_P[k],$$

com duas configurações possíveis para a matriz de medição \mathbf{H}_{CCT} – uma com apenas a medição de tensão ($\mathbf{H}_{CCT,v}$), e outra com medição de tensão combinada à temperatura na superfície da célula ($\mathbf{H}_{CCT,vt}$).

A matriz $\mathbf{H}_{CCT,v}$ é:

$$\mathbf{H}_{CCT,v} = \begin{bmatrix} \frac{\partial v_b}{\partial i_{\mathrm{P}}} & \frac{\partial v_b}{\partial soc} & \frac{\partial v_b}{\partial T_{cs}} & \frac{\partial v_b}{\partial T_{ss}} \end{bmatrix},$$

com:

$$\frac{\partial v_b}{\partial i_{\rm P}} = -R_1(T_s[k]), \qquad \frac{\partial v_b}{\partial soc} = \left. \frac{\partial v_{oc}}{\partial soc_{CC}} \right|_k,$$

$$\frac{\partial v_b}{\partial T_{ss}} = \frac{\partial v_{oc}}{\partial T_s} - i_{\rm P}[k] \frac{\partial R_1}{\partial T_s} - i_b[k] \frac{\partial R_0}{\partial T_s} \Big|_k,$$

$$\frac{\partial v_b}{\partial T_{cs}} = \frac{R_o}{R_o + R_c} \left(\frac{\partial v_{oc}}{\partial T_s} - i_{\rm P}[k] \frac{\partial R_1}{\partial T_s} - i_b[k] \frac{\partial R_0}{\partial T_s} \right) \Big|_k.$$

A matriz $\mathbf{H}_{CCT,vt}$ é:

$$\mathbf{H}_{\mathrm{CCT},vt} = \begin{bmatrix} \mathbf{H}_{\mathrm{CCT},v} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{R_o + R_c}{R_o} & 1 \end{bmatrix}.$$

Para o modelo eletroquímico simplificado acoplado a um circuito elétrico equivalente com dinâmica térmica (RV-ECMT - Rakmatov-Vrudhula Electrical Circuit Model with Thermal dynamics), os coeficientes (α,β), e portanto $\mathbf{A}_{dif}, \mathbf{B}_{dif}$, dependem de $T_s[k]$. Definindo $\mathbf{x}_{\mathbf{RV}} = [i_{\mathrm{P}} \ \mathbf{x}_{\mathrm{dif}}^{\mathsf{T}}]^{\mathsf{T}}$, obtém-se:

$$\mathbf{x}_{\mathbf{RVT}}[k+1] = \mathbf{A}_{\mathbf{RVT}}[k] \mathbf{x}_{\mathbf{RVT}}[k] + \mathbf{B}_{\mathbf{RVT}}[k] \mathbf{u}[k], \qquad \mathbf{x}_{\mathbf{RVT}} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_{\mathbf{RV}} \\ \mathbf{x}_{th} \end{bmatrix}$$

O vetor \mathbf{x}_{RVT} possui 1 + (M+1) + 2 = M + 4 estados ($i_P + \mathbf{x}_{dif} + T_{cs}, T_{ss}$). A matriz $\mathbf{A}_{RVT}[k] \in \mathbb{R}^{(M+4) \times (M+4)}$ torna-se:

$$\mathbf{A_{RVT}}[k] = \begin{bmatrix} e^{-\frac{\Delta t}{R_1(T_s[k])C_1(T_s[k])}} & [\mathbf{0}]_{1\times(M+1)} & [\mathbf{0}]_{1\times 2} \\ \\ [\mathbf{0}]_{(M+1)\times 1} & \mathbf{A_{dif}}(T_s[k]) & [\mathbf{0}]_{(M+1)\times 2} \\ \\ [\mathbf{0}]_{2\times 1} & [\mathbf{0}]_{2\times(M+1)} & \mathbf{A_{th}} \end{bmatrix}$$

Com duas entradas $(i_b \in Q), \mathbf{B}_{\mathbf{RVT}}[k] \in \mathbb{R}^{(M+4) \times 2}$ escreve-se:

$$\mathbf{B}_{\mathbf{RVT}}[k] = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{\mathbf{RV}}(T_s[k]) & [\mathbf{0}]_{(M+2)\times 1} \\ & & \\ & & \\ \mathbf{[0]}_{2\times 1} & \mathbf{B}_{\mathbf{th}} \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{B}_{\mathbf{RV}}(T_s[k]) = \begin{bmatrix} 1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{R_1(T_s[k])C_1(T_s[k])}\right) \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ \mathbf{B}_{\mathbf{dif}}(T_s[k]) \end{bmatrix} \end{bmatrix}$$

A saída é:

$$\mathbf{h_{RVT}}(\mathbf{x}[k], i_b[k]) = y_{RVT}[k] = v_{oc} \left(soc_{RVT}[k], T_s[k] \right) - R_0 \left(T_s[k] \right) i_b[k] - R_1 \left(T_s[k] \right) i_P[k],$$

com duas configurações possíveis para a matriz de medição \mathbf{H}_{RVT} – uma com apenas a medição de tensão ($\mathbf{H}_{RVT,v}$), e outra com medição de tensão combinada à temperatura na
superfície da célula ($\mathbf{H}_{RVT,vt}$).

A matriz $\mathbf{H}_{RVT,v}$ é:

$$\mathbf{H}_{RVT,v} = \begin{bmatrix} \frac{\partial v_b}{\partial i_{\mathrm{P}}} & \frac{\partial v_b}{\partial \mathbf{x}_{\mathrm{dif}}} & \frac{\partial v_b}{\partial T_{cs}} & \frac{\partial v_b}{\partial T_{ss}} \end{bmatrix},$$

com:

$$\begin{split} \frac{\partial v_b}{\partial i_{\rm P}} &= -R_1(T_s[k]), \qquad \frac{\partial v_b}{\partial \mathbf{x}_{\rm dif}} = \frac{\partial v_{oc}}{\partial soc_{RV}} \left(-\frac{\mathbf{C}_{RV}}{\alpha(T_s[k])} \right) \Big|_k, \\ &\frac{\partial v_b}{\partial T_{ss}} = \frac{\partial v_{oc}}{\partial T_s} - i_{\rm P}[k] \frac{\partial R_1}{\partial T_s} - i_b[k] \frac{\partial R_0}{\partial T_s} \Big|_k, \\ &\frac{\partial v_b}{\partial T_{cs}} = \frac{R_o}{R_o + R_c} \left(\frac{\partial v_{oc}}{\partial T_s} - i_{\rm P}[k] \frac{\partial R_1}{\partial T_s} - i_b[k] \frac{\partial R_0}{\partial T_s} \right) \Big|_k. \end{split}$$

A matriz $\mathbf{H}_{RVT,vt}$ é:

$$\mathbf{H}_{\mathrm{RVT},vt} = \left[egin{array}{cc} \mathbf{H}_{\mathrm{RVT},v} \ 0 & 0 & \cdots & 0 & rac{R_o + R_c}{R_o} & 1 \end{array}
ight].$$

3.4.3 Estimadores do Estado da Bateria

Os estimadores de estado desempenham um papel fundamental no monitoramento e controle de sistemas dinâmicos, sendo essenciais para aplicações em gerenciamento de baterias onde a precisão na determinação dos estados internos como o SOC e o SOH é crucial. Diversas abordagens foram propostas para essa finalidade, incluindo observadores lineares, filtros de partículas e métodos baseados em redes neurais, cada um com suas vantagens e desafios em termos de precisão, complexidade computacional e sensibilidade a ruídos e não linearidades. Contudo, dentre essas técnicas, os filtros de Kalman (KF - Kalman Filter) e suas variantes – como o Filtro de Kalman Estendido (EKF - Extended Kalman Filter) e o Filtro de Kalman Unscented (UKF - Unscented Kalman Filter) – têm se destacado pela sua capacidade de fornecer estimativas ótimas (no sentido de erro quadrático mínimo) de forma recursiva e em tempo real, mesmo na presença de incertezas e modelos aproximados. Essa robustez e eficiência tornam os estimadores de Kalman

particularmente adequados para sistemas de gerenciamento de baterias em veículos elétricos ^[75, 96-98].

O filtro de Kalman convencional fornece uma base matemática para a estimativa de estados em sistemas dinâmicos sujeitos a incertezas de processo e medição. Originalmente desenvolvido para sistemas lineares, o KF implementa um processo recursivo de duas etapas, composto pelos passos de predição e correção, com o objetivo de minimizar o erro quadrático médio da estimativa ^[99,100]. Para aplicações em baterias, a implementação do KF linear requer uma modelagem em espaço de estados que normalmente incorpora ECMs com pares de resistor-capacitor, a fim de aproximar a dinâmica eletroquímica ^[75,98].

O modelo do sistema considerado é descrito pelas equações de estado e de saída ^[99, 100]:

$$x_k = A_{k-1} x_{k-1} + B_{k-1} u_{k-1} + w_{k-1}, (3.39)$$

$$y_k = H_k x_k + v_k, \tag{3.40}$$

Em que x_k representa o vetor de estados no instante k, u_k é o vetor de entradas de controle, e y_k é o vetor de medições. As matrizes A_k , B_k e H_k correspondem, respectivamente, à matriz de transição de estados, à matriz de controle e à matriz de observação. Os termos $w_k \sim \mathcal{N}(0, Q_k)$ e $v_k \sim \mathcal{N}(0, R_k)$ representam os ruídos do processo e da medição, assumidos como ruídos brancos gaussianos com média zero e covariâncias Q_k e R_k , respectivamente.

A etapa de predição é dada pelas equações ^[99, 100]:

$$\hat{x}_{k|k-1} = A_{k-1}\,\hat{x}_{k-1|k-1} + B_{k-1}\,u_{k-1},\tag{3.41}$$

$$P_{k|k-1} = A_{k-1} P_{k-1|k-1} A_{k-1}^T + Q_{k-1}, (3.42)$$

nas quais $\hat{x}_{k|k-1}$ é a estimativa do estado no instante k com base em informações até k-1, $P_{k|k-1}$ é a covariância do erro da predição e Q_{k-1} representa a covariância do ruído do processo.

Na etapa de correção, após obter a medição y_k , calcula-se o ganho de Kalman e atualizase a estimativa e sua covariância ^[99,100]: Capítulo 3. Fundamentação Teórica

$$K_{k} = P_{k|k-1} H_{k}^{T} \left(H_{k} P_{k|k-1} H_{k}^{T} + R_{k} \right)^{-1}, \qquad (3.43)$$

$$\hat{x}_{k|k} = \hat{x}_{k|k-1} + K_k \left(y_k - H_k \, \hat{x}_{k|k-1} \right), \tag{3.44}$$

$$P_{k|k} = (I - K_k H_k) P_{k|k-1} (I - K_k H_k)^T + K_k R_k K_k^T, \qquad (3.45)$$

sendo H_k a matriz de observação que relaciona os estados com as medições, R_k a covariância do ruído da medição e K_k o ganho de Kalman.

Apesar de sua elegância matemática e eficiência computacional, o KF linear apresenta limitações para aplicações em baterias, uma vez que as relações entre os estados internos (como SOC) e os parâmetros medidos (como a tensão terminal) são intrinsecamente não lineares.

Para superar as limitações do KF linear, o Filtro de Kalman Estendido (EKF) utiliza técnicas de linearização para tratar sistemas não lineares. Seja o modelo de estado não linear ^[99,100]:

$$x_k = f(x_{k-1}, u_{k-1}) + w_{k-1}, (3.46)$$

$$y_k = h(x_k) + v_k,$$
 (3.47)

onde $f(\cdot)$ e $h(\cdot)$ são funções não lineares, w_{k-1} e v_k são os ruídos do processo e de medição, respectivamente. O EKF aproxima essas funções por meio de expansões em série de Taylor de primeira ordem. Assim, define-se ^[99,100]:

$$A_{k-1} = \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{\hat{x}_{k-1|k-1}, u_{k-1}}, \quad H_k = \left. \frac{\partial h}{\partial x} \right|_{\hat{x}_{k|k-1}}, \tag{3.48}$$

ou ainda:

$$A_{k-1} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix} \Big|_{\hat{x}_{k-1|k-1}, u_{k-1}}, \quad H_k = \begin{bmatrix} \frac{\partial h}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial h}{\partial x_n} \end{bmatrix} \Big|_{\hat{x}_{k|k-1}}, \quad (3.49)$$

e utiliza as mesmas equações recursivas do KF, agora com as matrizes linearizadas.

Passos do Filtro de Kalman (KF/EKF)

Independentemente da variante utilizada, os passos recursivos básicos são:

1. Inicialização: Definir a estimativa inicial do estado \hat{x}_0 e a matriz de covariância P_0 .

2. Predição:

(a) Calcular a estimativa do estado previsto:

$$\hat{x}_{k|k-1} = f(\hat{x}_{k-1|k-1}, u_{k-1})$$

(b) Calcular a covariância do erro previsto:

$$P_{k|k-1} = A_{k-1} P_{k-1|k-1} A_{k-1}^T + Q_{k-1}$$

3. Correção:

(a) Calcular o ganho de Kalman:

$$K_{k} = P_{k|k-1} H_{k}^{T} \left(H_{k} P_{k|k-1} H_{k}^{T} + R_{k} \right)^{-1}$$

(b) Atualizar a estimativa do estado:

$$\hat{x}_{k|k} = \hat{x}_{k|k-1} + K_k \left(y_k - h(\hat{x}_{k|k-1}) \right)$$

(c) Atualizar a covariância do erro:

$$P_{k|k} = (I - K_k H_k) P_{k|k-1} (I - K_k H_k)^T + K_k R_k K_k^T$$

4. Iteração: Repetir os passos de predição e correção para cada nova medição.

Este estrutura matemática proporciona uma base robusta para a estimativa do estado em sistemas dinâmicos, como os sistemas de gerenciamento de baterias, embora cada variante (KF, EKF) seja escolhida de acordo com o nível de não linearidade e os requisitos computacionais da aplicação ^[99, 100].

3.4.4 Matriz de Observabilidade

Considerando o sistema linear e invariante no tempo em tempo discreto:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{A} \, \mathbf{x}_k + \mathbf{B} \, \mathbf{u}_k, \qquad \mathbf{y}_k = \mathbf{C} \, \mathbf{x}_k,$$

em que $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$ é o vetor de estados, $\mathbf{u}_k \in \mathbb{R}^m$ o vetor de entradas de controle e $\mathbf{y}_k \in \mathbb{R}^p$ o vetor de saídas medidas. A *matriz de observabilidade* é definida por:

$$\mathbf{O} = \begin{bmatrix} \mathbf{C} \\ \mathbf{C}\mathbf{A} \\ \mathbf{C}\mathbf{A}^2 \\ \vdots \\ \mathbf{C}\mathbf{A}^{n-1} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{pn \times n}.$$

O sistema é observável se, e somente se, o posto da matriz O for completo:

$$\operatorname{rank}(\mathbf{O}) = n.$$

Isso garante que, a partir de uma sequência finita de medições $\{\mathbf{y}_k\}$, é possível reconstruir

unicamente o estado inicial \mathbf{x}_0 .

Para modelos não lineares, lineariza-se a função de medição y = h(x,u) em cada passo; o Jacobiano $\mathbf{H}_k = \partial h / \partial x \big|_{x = \hat{x}_k, u = u_k}$ substitui a matriz de medição \mathbf{C} do modelo linear.

3.5 Considerações Finais

Neste capítulo, foram apresentados os conceitos fundamentais sobre baterias de íons de lítio e gêmeos digitais, estabelecendo a base teórica essencial para a compreensão do trabalho. Discutimos o funcionamento das baterias de íons de lítio, enfatizando os mecanismos eletroquímicos e suas equações de conservação. Ademais, abordamos o problema do envelhecimento das baterias, destacando os fatores que contribuem para a degradação da capacidade e os impactos na vida útil das células, um desafio crítico para aplicações em veículos elétricos.

Além disso, exploramos a modelagem de baterias por meio de diferentes abordagens, incluindo modelos eletroquímicos detalhados, modelos de circuitos elétricos equivalentes e modelos baseados em dados. A escolha do modelo adequado depende das aplicações específicas, variando entre precisão e eficiência computacional. No contexto de gerenciamento de baterias, destacamos a importância dos BMSs e sua integração com gêmeos digitais, permitindo um monitoramento preciso e uma estimativa confiável de estados como SOC e SOH.

A discussão sobre gêmeos digitais enfatizou seu papel na simulação e no acompanhamento em tempo real do desempenho da bateria, abordando tanto os modelos puramente digitais quanto os sistemas interconectados via nuvem. Foram exploradas aplicações avançadas que utilizam aprendizado de máquina, redes neurais e filtros de Kalman para melhorar a precisão das estimativas e otimizar o desempenho das baterias. Exemplos práticos demonstraram como gêmeos digitais têm sido empregados para prever falhas, monitorar degradação e melhorar a eficiência do gerenciamento de energia em veículos elétricos.

Por fim, este capítulo estabeleceu a base teórica necessária para a compreensão dos trabalhos relacionados que serão discutidos no próximo capítulo. Essa fundamentação permitirá uma análise mais aprofundada sobre como diferentes abordagens e metodologias estão sendo aplicadas na área de gêmeos digitais para baterias de íons de lítio.

O próximo capítulo apresenta a metodologia adotada para o desenvolvimento do gêmeo digital. Serão descritos os procedimentos para geração de dados pseudo-sintéticos, as métricas de desempenho utilizadas e a estrutura geral do modelo. Além disso, abordaremos os principais estimadores implementados, incluindo SOC e SOT, destacando as diretrizes para garantir a precisão e aplicabilidade do sistema.

Capítulo 4

Metodologia

Este capítulo descreve os procedimentos utilizados para simular o comportamento da bateria em diferentes cenários, utilizando ferramentas como FASTSim e PyBaMM para gerar dados consistentes, bem como a construção de uma arquitetura modular que integra modelos da bateria, estimadores de estados como SOC (estado de carga) e SOT (estado de temperatura).

4.1 Geração de Dados Pseudo-Sintéticos

A disponibilidade de dados reais de desempenho de baterias de veículos elétricos é limitada, e os conjuntos de dados públicos existentes apresentam frequentemente inconsistências em formatos, condições de teste e tipos de química. Essas divergências dificultam comparações diretas e o desenvolvimento de modelos generalizáveis. Assim, neste trabalho optou-se por gerar dados pseudo-sintéticos de forma controlada, simulando o comportamento de uma bateria de veículo elétrico em diversos cenários. Essa abordagem permite obter dados consistentes e abrangentes, evitando dependência de dados experimentais escassos ou proprietários, ao mesmo tempo em que reproduz características realistas da bateria.

Para a geração dos dados, combinam-se duas ferramentas de simulação especializadas. Primeiro, utiliza-se o Simulador de Tecnologia de Sistemas Automotivos Futuros (FASTSim - *Future Automotive Systems Technology Simulator*), que a partir de um perfil de velocidade do veículo (dados reais ou ciclos padronizados) calcula o perfil de potência ou corrente exigido da bateria ao longo do tempo. A cada instante, o FASTSim considera forcas resistivas (arrasto aerodinâmico, atrito de rolamento), variação de velocidade (aceleração/inércia) e inclinação da via, bem como os limites de potência e eficiência dos componentes do trem de força (*powertrain*) de um veículo específico — neste caso, o Tesla Model S de 2016. A escolha desse modelo se justifica por se tratar de um veículo elétrico de ampla difusão e representatividade no mercado, com dados públicos bem documentados, além de já estar disponível como modelo de referência na biblioteca do FASTSim. Essas características favorecem tanto a reprodutibilidade dos experimentos quanto a comparação com estudos anteriores que utilizam a mesma plataforma veicular como base de análise. Como resultado, obtém-se uma sequência temporal de corrente elétrica demandada da bateria (positiva em descarga para tração e negativa em recarga pela frenagem regenerativa) correspondente ao ciclo de condução fornecido. Essa ferramenta é capaz de simular rapidamente milhares de segundos de condução, fornecendo um perfil de solicitação de potência da bateria realista em diversos cenários (urbano, rodoviário, agressivo, etc.), o que a torna ideal para gerar dados de entrada do gêmeo digital [101, 102].

Em seguida, esse perfil de potência é aplicado em um modelo avançado de bateria por meio da biblioteca de Modelagem Matemática de Baterias em Python (PyBaMM - Python Battery Mathematical Modelling) ^[103]. Em particular, utilizou-se um modelo do tipo Doyle-Fuller-Newman (DFN) por ser um modelo eletroquímico de ordem completa, que representa detalhadamente os processos físico-químicos dentro de uma célula de íons de lítio ^[83]. O modelo DFN do PyBaMM resolve as equações de conservação de carga e massa nos eletrodos (negativo e positivo) e no eletrólito, bem como as cinéticas de reação nas interfaces, como apresentado na Seção 3.4.2, fornecendo uma representação da dinâmica de tensão e do SOC da bateria. O problema de valor inicial resultante foi resolvido com o **CasadiSolver** do PyBaMM, configurado em modo safe, o que aciona verificações adicionais de convergência. Para a discretização espacial, definiu-se uma malha uniforme com que distribui 30 pontos nos domínios planares dos eletrodos negativo (x_n) , separador (x_s) e eletrodo positivo (x_p) , enquanto os domínios radiais das partículas esféricas recebem 10 pontos $(r_n e r_p)$.

A configuração do modelo DFN no PyBaMM foi feita com os parâmetros

eletroquímicos de uma célula de íons de lítio do tipo 21700 obtidos do trabalho de O'Kane et al. (2022) ^[104–106]. Esses parâmetros incluem propriedades geométricas e físico-químicas medidas experimentalmente para células comerciais, e foram implementados no PyBaMM por meio do conjunto OKane2022, disponível diretamente na biblioteca ^[107]. Os detalhes completos da configuração podem ser encontrados no material suplementar disponibilizado pelos autores ^[108]. No entanto, partes desse conteúdo foram também traduzidas livremente e incluídas no Anexo A, a fim de facilitar a consulta para o leitor e garantir a reprodutibilidade do modelo utilizado neste trabalho.

Ao utilizar como entrada a potência demandada pelo ciclo de condução gerada pelo FASTSim, o modelo DFN implementado no PyBaMM permite simular a resposta eletroquímica da bateria, fornecendo como saída a evolução da tensão terminal ao longo do tempo, a dinâmica de variáveis internas — como as concentrações de íons — e, caso um submodelo térmico esteja ativado, o perfil de temperatura da célula. Os parâmetros do modelo (capacidade, resistências, propriedades de difusão, etc.) podem ser ajustados para representar uma bateria veicular típica. Dessa forma, gera-se um banco de dados sintético porém fisicamente coerente – por isso denominado pseudo-sintético – que servirá de referência para o desenvolvimento e validação do gêmeo digital.

Dentre as principais vantagens dessa abordagem, destaca-se a capacidade de simular cenários diversos de forma controlada e reprodutível, incluindo diferentes perfis de condução – por exemplo, ciclos padronizados como o Ciclo de Condução do Dinamômetro Urbano (UDDS - Urban Dynamometer Driving Schedule), o Teste de Economia de Combustível em Rodovias (HWFET - Highway Fuel Economy Test) e o Procedimento de Teste Federal Suplementar US06 (US06 - Supplemental Federal Test Procedure US06), ou trajetórias reais coletadas de veículos em campo – e diferentes condições da bateria como temperaturas distintas ou níveis de degradação variáveis.

O ciclo UDDS avalia o desempenho de veículos em trajetos urbanos, caracterizados por baixas velocidades médias e frequentes paradas, com ênfase no consumo de energia e nas emissões. O ciclo HWFET, por outro lado, representa condições de condução em rodovias, nas quais predominam velocidades mais elevadas e constantes. O ciclo US06 impõe condições operacionais mais severas, com altas velocidades e acelerações intensas, sendo utilizado para testar a segurança veicular e a capacidade de resposta do sistema de propulsão em cenários dinâmicos e exigentes ^[96,109–111]. Cada velocidade de perfil de condução está ilustrado na Figura 4.1.





Fonte: Autoria própria.

O uso de modelos físico-matemáticos garante que os dados retenham fidelidade às leis que governam o desempenho da bateria, em contraste com dados sintéticos produzidos por processos aleatórios não estruturados — isto é, amostras aleatórias geradas sem embasamento físico ou representação explícita das dinâmicas do sistema veicular. Além disso, conhecendo-se as variáveis internas do modelo (como o SOC eletroquímico, não acessível diretamente em experimentos reais), torna-se possível avaliar com rigor os erros dos estimadores do gêmeo digital. Por fim, a geração de dados sintéticos possibilita a obtenção de informações valiosas antes da realização de testes em laboratório. Essa abordagem é especialmente vantajosa para reduzir a quantidade de experimentos necessários, concentrando-se nos mais promissores e, consequentemente, diminuindo a demanda por testes laboratoriais, que costumam exigir muitos recursos.

Além disso, em aplicacões veiculares práticas, os *ripples* de corrente gerados pelos conversores de potência possuem características operacionais relevantes ^[112, 113]. Esses ripples são importantes para análises detalhadas, pois podem influenciar o desempenho do sistema e a acurácia das medições. No entanto, para os objetivos deste estudo, optou-se por desconsiderar explicitamente os ripples de corrente e a caracterização aprofundada do ruído dos sensores, uma vez que a resolução adequada desses efeitos exigiria taxas de amostragem da ordem de dezenas a centenas de kHz — o que elevaria significativamente o consumo da Unidade Central de Processamento (CPU - Central Processing Unit), memória e energia em sistemas embarcados veiculares, tornando inviável o escopo de provas de conceito em tempo real — e demandaria um esforço experimental extenso para calibrar e modelar componentes de ruído térmico, de quantização e de deriva térmica, sem trazer ganho direto ao objetivo principal de avaliar o desempenho do estimador de SOC em condições operacionais típicas [114, 115]. Em vez disso, optou-se por considerar exclusivamente o ruído de medição, assumindo-se que este segue uma distribuição gaussiana com média zero, com desvios-padrão definidos como 5 mA para as medições de corrente e 1 mV para as medições de tensão, que são representativos das condições reais de medição em aplicações veiculares $^{[116-118]}$.

Na Figura 4.2 estão ilustrados os perfis de corrente para cada tipo de perfil de condução padronizado apresentado na Figura 4.1, exibidos sem ruído, para um único ciclo. Para garantir um maior nível de descarga da bateria e avaliar consistentemente o comportamento do gêmeo digital, cada ciclo foi repetido sequencialmente por 30 vezes durante os testes realizados.



Figura 4.2: Perfis de corrente dos programas de condução padronizados para um ciclo único.

Fonte: Autoria própria.

4.1.1 Modelagem de Baterias com PyBaMM

O PyBaMM é uma ferramenta de código aberto, desenvolvida em Python, que permite a simulação e análise de modelos eletroquímicos de baterias de modo flexível e eficiente. Seu principal diferencial é oferecer uma arquitetura modular para a implementação de diferentes modelos, métodos numéricos e estratégias de resolução de forma integrada, facilitando tanto a colaboração entre pesquisadores quanto a comparação direta de modelos ou algoritmos distintos ^[103]. Essa ferramenta adota uma arquitetura baseada em árvores de expressões simbólicas para representar equações, processadas em um pipeline modular que abrange: definição do modelo e geometria, atribuição de parâmetros, discretização espacial, solução numérica e pós-processamento. Essa estrutura facilita a inserção de novos modelos ou submodelos e realiza diferenciação simbólica automática, otimizando a geração de jacobianos e acelerando a resolução numérica.

Para utilizar o PyBaMM, basta instalar o *framework* via pip ou conda (junto de suas dependências, como numpy, scipy e casadi), importar o pacote em Python e escolher um modelo pré-definido ou criar um novo. Além disso, a ferramenta oferece um banco interno com parâmetros experimentais de diversas células, possibilitando simular perfis reais de potência, como os gerados pelo FASTSim, produzindo dados pseudo-sintéticos detalhados ^[107]. O acesso direto às variáveis internas facilita ainda a validação de algoritmos para estimativa e controle utilizados em gêmeos digitais.

Em suma, a adoção do PyBaMM oferece uma plataforma robusta e extensível para simular fenômenos eletroquímicos em baterias de íons de lítio, facilitando a comparação de diferentes cenários e a incorporação de novos efeitos físicos. Essa flexibilidade o torna especialmente atrativo no contexto de geração de dados pseudo-sintéticos controlados, onde se busca reprodutibilidade, fidelidade física e possibilidade de escalonamento para diversos perfis e configurações de bateria ^[103].

4.1.2 Simulação de Perfis de Condução com FASTSim

O Future Automotive Systems Technology Simulator (FASTSim) ^[101, 102] é uma ferramenta de alto nível, desenvolvida pelo National Renewable Energy Laboratory (NREL), que permite estimar rapidamente o desempenho, a eficiência e o custo de diferentes configurações de veículos. Projetado com foco em agilidade e facilidade de uso, o FASTSim fornece uma abordagem simplificada para comparar os trens de força (powertrains) dos veículos e avaliar o impacto de melhorias tecnológicas sobre veículos leves ou pesados ao longo de ciclos de condução temporais.

O FASTSim modela componentes-chave do veículo, como trem de força, motor, bateria, armazenamento de combustível e sistema de frenagem regenerativa, a partir de parâmetros básicos (massa, potência, eficiência, entre outros). Em cada passo de tempo do ciclo de condução, a ferramenta calcula as forças resistivas (arrasto aerodinâmico, atrito de rolamento, inclinação) e as limitações de eficiência e potência de cada componente, estimando o consumo de energia (elétrica ou combustível) e a regeneração de carga. Essa abordagem baseado em potência requer menos detalhes que modelos termodinâmicos completos, tornando o processo mais rápido e simples, sem comprometer significativamente a precisão $^{[102]}$.

Ademais, essa ferramenta pode ser empregada tanto para ciclos de condução padronizados (por exemplo, UDDS, HWFET, US06) quanto para trajetos reais medidos em campo. O usuário fornece o perfil de velocidade/tempo (e, opcionalmente, a inclinação da via), as características do veículo (coeficiente de arrasto, área frontal, massa do conjunto, parâmetros do trem de força) e as condições de simulação. Com isso, o FASTSim permite a obtenção rápida do perfil de potência requerido pela bateria ao longo do ciclo de condução, gerando esses dados em escalas de tempo da ordem de segundos a minutos. Essa agilidade faz com que o FASTSim seja ideal para rodar cenários em larga escala — por exemplo, explorando o desempenho de veículos com diferentes níveis de potência ou estados de carga ao longo de múltiplos ciclos de condução.

O principal objetivo ao empregar o FASTSim neste estudo é obter o perfil de potência exigido da bateria em situações reais ou simuladas de condução veicular. Esses perfis são então utilizados como entrada para o modelo físico-químico avançado (implementado no PyBaMM), responsável por calcular a tensão, o SOC e outras variáveis internas da bateria de forma detalhada. Dessa forma, combinam-se a rapidez e o realismo do FASTSim em prever a solicitação do trem de força com a fidelidade físico-eletroquímica do PyBaMM, resultando em dados pseudo-sintéticos que refletem cenários de uso realista de veículos ^[102].

Entre as principais vantagens do uso do FASTSim, destaca-se a facilidade de configuração, uma vez que a ferramenta apresenta uma interface intuitiva e exige um conjunto reduzido de parâmetros de entrada. Sua elevada eficiência computacional permite simular milhares de segundos de condução em poucos instantes, viabilizando a análise de diversos cenários operacionais, como ciclos urbanos, rodoviários ou de condução agressiva. O modelo também oferece elevada flexibilidade, ao aceitar tanto ciclos de condução padronizados quanto trajetos reais, possibilitando a personalização de parâmetros veiculares, como massa, coeficiente de arrasto aerodinâmico e potência de tração. Além disso, os perfis de potência gerados podem ser facilmente integrados a modelos mais complexos, como o modelo DFN no PyBaMM, ampliando sua aplicabilidade em estudos avançados de simulação eletroquímica.

Ao combinar a velocidade de simulação do FASTSim com a precisão do modelo DFN no

PyBaMM, cria-se uma solução completa para geração de dados pseudo-sintéticos, mantendo controle sobre parâmetros de interesse e garantindo fidelidade física suficiente para estudar o comportamento da bateria em diferentes condições de uso veicular.

4.2 Estrutura do Gêmeo Digital

O gêmeo digital desenvolvido consiste em um conjunto de módulos interconectados que, em conjunto, replicam virtualmente o comportamento da bateria do veículo elétrico e estimam seus estados. A Figura 4.3 ilustra a arquitetura proposta e as interações entre os módulos. O gêmeo digital se comunica com o BMS do veículo para receber como entrada os dados provenientes do veículo e de seu ambiente de operação – notadamente corrente elétrica da bateria, tensão entre os terminais da bateria, e temperatura ambiente. Adicionalmente, parâmetros fixos do veículo (capacidade nominal da bateria, massa do veículo, etc.) e do pacote de baterias (número de células, química, características de degradação) são armazenados no gêmeo para uso nos modelos.



Figura 4.3: Estrutura do gêmeo digital proposto

No gêmeo digital estão implementados os modelos e estimadores da bateria, cuja função é reproduzir o comportamento eletroquímico, elétrico e térmico do sistema de armazenamento, bem como estimar seus estados internos. Esses estimadores processam as entradas fornecidas e geram estimativas das variáveis internas, como o SOC e SOT, além de possibilitarem previsões relacionadas à autonomia e prognósticos do sistema. Além disso, o gêmeo digital dispõe de um módulo específico para armazenamento dos resultados das estimativas e de dados históricos. Para gerenciar a troca de dados entre esses módulos, o bloco de Gerenciamento do DT é utilizado, organizando quais dados entram e saem de cada módulo, garantindo a sincronização temporal e assegurando a consistência e integridade das informações trocadas internamente. Esse gerenciamento permite uma operação eficiente e coordenada dos diferentes componentes do gêmeo digital, facilitando a análise em tempo real e o armazenamento estruturado dos resultados obtidos.

4.3 Modelo eletroquímico da bateria

O modelo usado para representar eletricamente e quimicamente a bateria foi o RV-ECMT, uma variação do RV-ECM com ajuste térmico. Apesar da praticidade do ECM puro, foi demonstrado no artigo derivado desse trabalho a maior precisão do modelo RV-ECM em condições dinâmicas de descarga ^[119]. A principal motivação para incluir essa componente térmica é o fato de que diversos parâmetros eletroquímicos — como coeficientes de difusão — exibem dependência significativa com a temperatura de operação da célula ^[41,42]. Em termos práticos, isso implica que o desempenho, a vida útil e a segurança das baterias podem sofrer variações substanciais conforme a temperatura aumenta ou diminui, afetando a cinética das reações eletroquímicas e até mesmo o transporte de íons no interior dos eletrodos. Dessa forma, a modelagem termicamente ajustada permite capturar essas variabilidades de forma mais fidedigna, resultando em previsões mais confiáveis de tensões e correntes em diferentes cenários de operação.

Para construir o modelo, é necessário gerar dados sintéticos para identificação de parâmetros e obtenção das curvas necessárias, detalhadas a seguir. Foram realizadas simulações para uma célula LG M50 21700 ^[105], cujas características são apresentadas na Tabela 4.1, utilizando o software PyBaMM.

Item	Condição / Nota	Especificação	
Capacidada	Carga/doscarga padrão	Nominal: 18,20 Wh ($\approx 5 Ah$)	
Capacidade	Carga/descarga padrao	Mínima: 17,60 Wh	
Tensão Nominal	Média	3,63 V	
	Corrente constante	0.3C (1.455 mA)	
Carga Padrão	Tensão constante	$4,2 \mathrm{V}$	
	Corrente de corte	50 mA	
Tensão Máxima de Carga	-	$4{,}20\pm0{,}05~{\rm V}$	
Corrente Máxima de Carga	0–25°C	0,3C (1.455 mA)	
Corrente Maxima de Carga	$25-50^{\circ}\mathrm{C}$	0,7C (3.395 mA)	
Doscarga Padrão	Corrente constante	0,2C (970 mA)	
Descarga Facilao	Tensão de corte	2,50 V	
	$-30\sim-20^{\circ}\mathrm{C}$	0,2C (970 mA)	
Corrente Máxima de Descarga	$-20 \sim 5^{\circ}\mathrm{C}$	0,3C (1.455 mA)	
	$5 \sim 45^{\circ} \mathrm{C}$	1,5C (7.275 mA)	
	$45 \sim 60^{\circ} \mathrm{C}$	1,5C (7.275 mA)	

Tabela 4.1: Especificações da célula de íons de lítio LG M50 21700

Fonte: Datasheet do fabricante ^[120].

Estimativa de Parâmetros do Modelo RV

O experimento para obtenção dos parâmetros do modelo de difusão simplificado é descrito a seguir.

Testes de Descarga Constante:

- A célula é descarregada em diferentes taxas de corrente constante, variando de 0,1C
 a 1,5 C, até atingir uma tensão de 2,5 V em diferentes temperaturas ambientes de −10°C até 50°C com passo de 5°C.
- Os dados de duração da descarga são registrados com 10 amostras por segundo.

Estimativa de Parâmetros:

Os parâmetros do modelo RV, $\alpha \in \beta$, são estimados resolvendo o problema de otimização (4.1) usando um conjunto de correntes constantes para cada temperatura $I[1], \ldots, I[N]$ até a descarga completa da célula, obtendo uma série de medições da duração da descarga $L[1], \ldots, L[N]$:

$$\left[\hat{\alpha},\hat{\beta}\right] = \arg\min_{\alpha,\beta} \left(\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} \left(I_b[k] - \hat{I}[k|\alpha,\beta]\right)^2\right),\tag{4.1}$$

sujeito a:

 $\alpha \in \mathbb{R}^+ \cup \{0\},$ $\beta \in \mathbb{R}^+ \cup \{0\},$

onde $\hat{I}[k]$ é dado por:

$$\hat{I}[k] = \frac{\alpha}{L[k] + 2\sum_{m=1}^{m=M} \frac{1 - e^{-\beta^2 m^2 L[k]}}{\beta^2 m^2}}.$$
(4.2)

Neste trabalho, a estimativa de $\hat{I}[k]$ foi realizada com M = 10, uma escolha que proporciona uma aproximação adequada, conforme demonstrado por ^[85–87].

Uma vez encontrados os valores de α e β para cada temperatura testada, é realizada a interpolação para obter as funções $\alpha(T_s)$ e $\beta(T_s)$, permitindo estimar os parâmetros do modelo para qualquer temperatura dentro da faixa de operação da célula. A interpolação pode ser feita utilizando métodos polinomiais, *splines* cúbicas ou regressão não linear, dependendo da suavidade desejada e da precisão necessária para representar a variação dos parâmetros com a temperatura.

A relação interpolada dos parâmetros com a temperatura é expressa como:

$$\alpha(T_s) = f_\alpha(T_s), \quad \beta(T_s) = f_\beta(T_s), \tag{4.3}$$

onde $f_{\alpha}(T_s)$ e $f_{\beta}(T_s)$ representam as funções de interpolação obtidas a partir dos valores discretos de α e β para cada temperatura medida. Essas funções permitem ajustar o modelo de difusão para diferentes condições térmicas, garantindo uma melhor estimativa do comportamento da bateria em cenários variados.

4.3.1 A Tensão de Circuito Aberto

O experimento para obtenção de dados da curva $v_{oc}(soc, T_s)$ é descrito abaixo.

Procedimento

1. Recarga:

- A célula é carregada até 4,2V com Corrente Constante (CC Constant Current) de 0,7C.
- Aplica-se uma Tensão Constante (CV *Constant Voltage*) de 4,2 V até que a corrente caia abaixo de 50 mA.

2. Período de Repouso

• A célula permanece em repouso por 2 horas para garantir a estabilização da tensão.

3. Descarga

• A célula é descarregada até a tensão de 2,5V com corrente de 0,05C.

4. Aquisição de Dados

• Os dados de tensão e corrente são registrados ao longo do processo de carga e descarga a uma taxa de 10 amostras por segundo.

5. Ajuste de temperatura

• Os passos de 1 a 4 são repetidos para as temperaturas de $-10^{\circ}C$ até $50^{\circ}C$ com passo de $5^{\circ}C$.

6. Média das Curvas

 Para cada curva de carga e descarga, o SOC é calculado por meio do modelo eletroquímico simplificado. Com isso, obtêm-se dados organizados de tensão, SOC e temperatura, os quais podem ser interpolados para compor superfícies contínuas. A partir desses dados, aplicam-se interpoladores baseados em *splines* bivariadas, que permitem reconstruir a função $v_{oc}(soc, T_s)$ de forma suave e fisicamente coerente em toda a faixa de operação. Dessa forma, realiza-se a interpolação dos dados para os perfis de carga $f_{chg}(soc, T_s)$ e descarga $f_{dhg}(soc, T_s)$, de modo a capturar com maior precisão as sutis diferenças entre as curvas de histerese observadas nos dados. Essas funções são então combinadas por média ponto a ponto, resultando na curva $v_{oc}(soc, T_s)$, que representa uma aproximação simétrica das características de carga e descarga em função do estado de carga e da temperatura. Essa abordagem é especialmente relevante em aplicações veiculares, nas quais os ciclos de recarga e descarga ocorrem com alta frequência, exigindo uma representação equilibrada do comportamento eletroquímico em ambas as direções de fluxo de corrente. Essa relação é expressa matematicamente por:

$$v_{oc}(soc[k], T_s[k]) = \frac{f_{chg}(soc[k], T_s[k]) + f_{dhg}(soc[k], T_s[k])}{2}.$$
 (4.4)

4.3.2 Estimativa de Parâmetros do ECM

O experimento para obtenção dos parâmetros do circuito elétrico equivalente é descrito abaixo.

1. Teste de Descarga Pulsada

 A célula é submetida a uma série de descargas pulsadas de 1,5 C por 10 segundos, seguidas por um período de repouso de 90 segundos.

2. Problema de Otimização

 Os parâmetros do ECM (R₀, R_{p1}, C_{p1}) são estimados usando um algoritmo de otimização formulado como:

$$\hat{\theta} = \arg\min_{\theta} \left(\frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} \left(v_b[k] - \hat{v}_b[k|\theta] \right)^2 \right),$$

onde:

- $-\theta$: vetor dos parâmetros do ECM,
- $-v_b$: tensão medida,
- $-\hat{v}_b$: tensão prevista pelo modelo.

3. Restrições

- Todos os parâmetros são restringidos a valores positivos por razões físicas.
- O algoritmo de otimização utilizado foi um Algoritmo Genético (GA Genetic Algorithm), uma técnica inspirada na evolução natural que busca encontrar soluções ótimas em espaços de busca complexos, uma vez que o problema de calibração do modelo ECM, acoplado à dinâmica térmica, apresenta superfície de custo não convexa, com múltiplos ótimos locais, planicidades extensas e custo definido apenas numericamente ^[121]. Métodos baseados em gradiente tendem, portanto, a estagnar ou requerem boa inicialização. Assim, o algoritmo realiza uma busca global estocástica sem derivadas; é robusto a superfícies ruidosas ou descontínuas; permite impor positividade por meio da codificação dos genes; explora paralelismo natural na avaliação de toda a população em diferentes conjuntos de dados experimentais. Para a implementação do GA, foi empregada a biblioteca de Algoritmos Evolutivos Distribuídos em Python (DEAP Distributed Evolutionary Algorithms in Python) ^[122], que oferece uma estrutura modular e eficiente para o desenvolvimento de algoritmos evolutivos personalizados.
- A configuração detalhada dos operadores genéticos, parâmetros de codificação e critérios de seleção utilizados neste trabalho encontra-se apresentada na Tabela 4.2. A população foi composta por 50 indivíduos, buscando um equilíbrio entre diversidade de soluções e custo computacional. O número total de gerações foi fixado em 20, o que resulta em aproximadamente 10³ simulações por conjunto de dados. A função de aptidão adotada foi a Raiz quadrada do erro médio (RMSE *Root Mean-Square Error*), visando minimizar a diferença entre a tensão simulada pelo PyBaMM (v_{PyBaMM}) e a tensão estimada pelo modelo (v_{modelo}). O processo de seleção utilizou o método de torneio com

grupos de três indivíduos, implementado pela função selTournament da biblioteca DEAP. O cruzamento foi realizado com o operador cxBlend, utilizando um valor $\alpha_{GA} = 0.5$. A mutação foi conduzida com o operador mutGaussian, considerando média nula, desvio padrão $\sigma_{GA} = 0.05$ e probabilidade individual de mutação igual a 0.2. Os genes do indivíduo correspondem às raízes quadradas dos parâmetros R_0 , $R_1 \in C_1$, amostradas de distribuições uniformes contínuas, de modo que $R_0 \sim \mathcal{U}(10^{-6},1)$, $R_1 \sim \mathcal{U}(10^{-6},4) \in C_1 \sim \mathcal{U}(10^{-6},100)$. O mapeamento fenotípico corresponde à aplicação do quadrado nos genes, assegurando coerência física nos parâmetros. Por fim, o critério de parada baseou-se em número fixo de gerações, com registro dos valores estatísticos de desempenho (média, desvio padrão, mínimo e máximo) a cada iteração evolutiva.

Tabela 4.2: Configuração do GA utilizado na calibração do ECM

Elemento	Valor / Justificativa			
Tamanho da população	50 indivíduos (equilíbrio entre diversidade e custo)			
Número de gerações	$20 \Rightarrow \sim 10^3 \text{ simulações/dataset}$			
Função de aptidão	RMSE para minimizar o erro entre v_{PyBaMM} e v_{modelo}			
Seleção	Torneio, tamanho 3 (selTournament)			
Cruzamento	cxBlend ($\alpha_{GA} = 0.5$)			
Mutação	mutGaussian ($\mu=0,\sigma_{GA}=0.05,\mathrm{indpb}=0.2$)			
Genes	$\sqrt{R_0} \sim \mathcal{U}(10^{-6}, 1) \Omega^{1/2}; \sqrt{R_1} \sim \mathcal{U}(10^{-6}, 4) \Omega^{1/2}; \sqrt{C_1} \sim \mathcal{U}(10^{-6}, 100) \mathrm{F}^{1/2}$			
Mapeamento fenótipo	$R_0=(\sqrt{R_0})^2,\;R_1=(\sqrt{R_1})^2,\;C_1=(\sqrt{C_1})^2$ (garante $R_0,R_1,C_1>0)$			
Critério de parada	$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$			
	Fonte: Autoria própria.			

4. Ajuste de temperatura

• Os passos de 1 a 3 são repetidos para as temperaturas de $-10^{\circ}C$ até $50^{\circ}C$ com passo de $5^{\circ}C$.

• Com os valores dos parâmetros obtidos, usa-se a interpolação polinomial para encontrar as funções $R_0(T_s), R_1(T_s), C_1(T_s)$.

4.4 Parâmetros do modelo térmico

Identificar experimentalmente os parâmetros térmicos é importante devido à complexidade estrutural interna das células. Técnicas como testes laboratoriais offline e algoritmos adaptativos online (por exemplo, mínimos quadrados recursivos com fator de esquecimento) são comuns para acompanhar mudanças ao longo da vida útil das baterias, especialmente na resistência interna. Nestes testes, uma corrente pulsada é aplicada à célula enquanto mede-se a temperatura da superfície, a temperatura ambiente e a corrente [91,93,94,123]

Em Zatta et al. (2024) ^[123], foi realizada uma caracterização experimental abrangente de células comerciais de íons de lítio, com a identificação inicial do modelo elétrico por meio de um ECM. Em seguida, modelou-se o comportamento térmico utilizando um modelo de segunda ordem, que foi simplificado para um modelo de primeira ordem ao se adotar a aproximação $C_s \approx 0$, desprezando a inércia térmica da superfície da célula, mas ainda fornecendo as temperaturas $T_c \in T_s$. Posteriormente, a validação do modelo térmico foi feita com o teste de Perfil de Carga de Alta Potência (HPL - *High-Power Load*), caracterizado por picos de corrente de descarga de até 10 C ^[124]. Com os resultados obtidos, foi observado um erro relativo da estimativa da temperatura da superfície menor que 5% da temperatura medida.

Dessa forma, optou-se por utilizar os parâmetros identificados por Zatta et al. (2024), uma vez que o estudo empregou células comerciais semelhantes àquelas utilizadas na presente pesquisa. Os parâmetros térmicos estão presentes na Tabela 4.3.

Tabela 4.3: Parâmetros térmicos.

$R_c (K/W)$	$C_c (J/K)$	$R_o (K/W)$
0.10	70.2	4.94

Fonte: Adaptado de Zatta et al. $(2024)^{[123]}$.

4.5 Filtro de Kalman Estendido (EKF) para os modelos ECMT e RV–ECMT

O procedimento de estimação é idêntico para os modelos de bateria ECMT e RV–ECMT: emprega–se um EKF, conforme as equações descritas na Seção 3.4.3, cuja matriz de estado $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{n_i}$ e cujos blocos de ruído variam na dimensão n_i de cada modelo, conforme apresentado na Tabela 4.4.

Tabela 4.4: Estrutura dos vetores de estado e dos blocos de \mathbf{Q} para cada modelo.

Modelo	x	Dim.	\mathbf{Q} (bloco)		
ECMT	$[i_{\mathrm{P}}, soc, T_{cs}, T_{ss}]^{\top}$	4	$\mathrm{diag}(\mathbf{ECM}_\mathbf{Q}, \mathbf{TH}_\mathbf{Q})$		
RV-ECMT	$[i_P, \mathbf{x}_{\mathrm{dif}}^{\top}, T_{cs}, T_{ss}]^{\top}$	M+4	$\mathrm{diag}(\mathbf{IP}_\mathbf{Q},\!\mathbf{RV}_\mathbf{Q},\!\mathbf{TH}_\mathbf{Q})$		
Fonte: Autoria própria.					

Os \mathbf{Q} blocos listados na Tabela 4.4 são convertidos em uma única matriz de covariância do processo, $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{n_i \times n_i}$, simplesmente inserindo-se, na diagonal principal, o *quadrado* dos parâmetros ajustados pelo GA. Os blocos são:

$$\mathbf{ECM}_{\mathbf{Q}} = \operatorname{diag}(q_1^2, q_2^2), \qquad \mathbf{TH}_{\mathbf{Q}} = \operatorname{diag}(th_1^2, th_2^2),$$

$$\mathbf{IP}_{\mathbf{Q}} = \operatorname{diag}(q_1^2), \qquad \mathbf{RV}_{\mathbf{Q}} = \operatorname{diag}(rv_1^2, \dots, rv_{M+1}^2),$$

em que:

- ECM_Q representa o ruído de processo do bloco elétrico do modelo ECMT. Os parâmetros q₁ e q₂ são os desvios-padrão associados, respectivamente, às dinâmicas do ramo RC de polarização i_P e do SOC;
- TH_Q representa o ruído de processo do bloco térmico, sendo th_1 e th_2 os desvios-padrão dos estados de temperatura centro-superfície T_{cs} e superfície-ambiente T_{ss} ;
- IP_Q representa o ruído de processo do bloco elétrico do modelo RV-ECMT, com parâmetro q₁ associado à dinâmica do ramo RC de polarização i_P;

RV_Q corresponde ao bloco difusivo do modelo RV, formado por M + 1 estados, com cada rv_i (i = 1,...,M+1) sendo o desvio-padrão associado ao respectivo estado difusivo.

A matriz de medição é $\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{p \times n_i}$, com duas variantes: (i) somente tensão terminal $(p = 1, \mathbf{R} = r^2)$; (ii) tensão + temperatura superficial $(p = 2, \mathbf{R} = [r_1^2, r_2^2]^{\top})$.

Todos esses desvios–padrão fazem parte do vetor de genes \mathbf{x}_{GA} e são elevados ao quadrado para preencher a diagonal de \mathbf{Q} .

Sintonia via Algoritmo Genético

As matrizes $\mathbf{Q} \in \mathbf{R}$ são ajustadas por um GA para minimizar o RMSE entre o SOC estimado e o referenciado pelo PyBaMM. Define-se o vetor de genes:

$$\mathbf{x}_{\mathrm{GA}} = [gen_Q, gen_R],$$

com os parâmetros que se deseja otimizar. Os intervalos de busca adotados são:

$$q_i, r_i \sim \mathcal{U}(10^{-3}, 1) \quad (i = 1, 2),$$

 $rv_i \sim \mathcal{U}(10^{-3}, 500) \quad (i = 1, \dots, M + 1),$
 $th_i \sim \mathcal{U}(10^{-4}, 10) \quad (i = 1, 2).$

No GA, a função de avaliação: atualiza o EKF com as matrizes **Q** e **R**; executa a estimação nos dados do PyBaMM; calcula o RMSE do SOC estimado; devolve o RMSE (critério de minimização).

Utilizam-se seleção do melhor individuo por torneio (tamanho 3), crossover cxBlend ($\alpha_{GA} = 0.5$) e mutação gaussiana mutGaussian ($\sigma_{GA} = 0.05$). A convergência ocorre quando atinge-se o número máximo de iterações com 100 indivíduos e 20 gerações.

4.6 Métricas de Desempenho

O SOC estimado por cada configuração do EKF é comparado com um valor de referência calculado no PyBaMM. Esse valor de referência é obtido a partir da concentração de lítio no ponto x = L da malha unidimensional do eletrodo negativo—isto é, na extremidade do coletor de corrente. Assim,

$$soc_{ref}[k] = \frac{c_L[k] - c_L^{0\%}}{c_L^{100\%} - c_L^{0\%}},$$
(4.5)

em que $c_L[k]$ é a concentração de lítio avaliada no ponto x = L e no instante k, enquanto $c_L^{0\%}$ e $c_L^{100\%}$ são as concentrações estequiométricas correspondentes aos estados completamente descarregado e completamente carregado, respectivamente.

O desempenho é avaliado utilizando as seguintes métricas:

• Erro Quadrático Médio (RMSE - Root Mean-Square Error):

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^{N_{err}} (\hat{soc}[k] - soc_{ref}[k])^2}{N_{err}}}$$

• Erro Absoluto Médio (MAE - Mean Absolute Error):

$$MAE = \frac{\sum_{k=1}^{N_{err}} |\hat{soc}[k] - soc_{ref}[k]|}{N_{err}}$$

4.7 Estimativa de alcance (autonomia) e chegada ao destino

Existem diversos fatores que podem afetar o consumo de energia de um veículo elétrico, influenciando diretamente seu alcance máximo. Entre eles, destaca-se o estilo de condução, pois uma condução agressiva, com acelerações rápidas, tende a aumentar o consumo de energia e reduzir a autonomia. Além disso, as condições de estrada e clima também exercem influência, uma vez que dirigir em terreno montanhoso ascendente ou enfrentar chuvas intensas e ventos fortes eleva o gasto energético. O peso do veículo é outro aspecto relevante, pois veículos mais pesados demandam mais energia para se deslocar, e o uso de acessórios, como ar-condicionado, aquecimento e iluminação, igualmente impacta o consumo ^[125]. Com o intuito de estimar a autonomia desses veículos, as fabricantes costumam empregar duas abordagens principais: a estimativa baseada em ciclos de condução padronizados e aquela fundamentada no histórico de consumo. Ambas recorrem à estimativa da energia disponível na bateria, comumente fornecida pelo BMS, mas diferem no cálculo do consumo [126].

Na abordagem baseada em ciclos de condução padronizados, o VE é submetido a perfis de velocidade previamente definidos, representativos de situações reais, enquanto seu consumo de energia é registrado. Entretanto, devido à variação dos diversos fatores que influenciam o consumo, os ciclos de condução reais podem divergir de forma considerável dos adotados nos testes, resultando em estimativas imprecisas ^[127].

Já a estimativa fundamentada no histórico de consumo calcula a média de energia gasta nos últimos quilômetros percorridos e a projeta para estimar o consumo futuro. Conhecendo o SOC e a capacidade total do banco (em Wh ou kWh), estima-se a energia disponível. Multiplica-se então o inverso do consumo recente (km/Wh) pela energia disponível, obtendo-se uma autonomia preliminar. No entanto, dependendo da extensão do trecho analisado, essa abordagem pode exibir grandes variações ou, em contrapartida, não refletir de maneira fiel o consumo recente ^[128].

Para refinar esse cálculo, podem-se utilizar dados de rota fornecidos por ferramentas de mapa (por exemplo, distância total, elevação e possíveis limites de velocidade). Com essas informações, simula-se ou ajusta-se o consumo energético do trajeto específico, levando em conta trechos de alta velocidade (maior arrasto aerodinâmico), topografia (maior gasto em subidas e recuperação parcial em descidas) e possíveis variações de temperatura que afetam o desempenho da bateria.

Com a autonomia calculada, é possível verificar se o destino desejado é alcançável nas condições atuais de bateria. Caso a distância do trajeto supere a autonomia estimada, é possível alertar o condutor sobre a necessidade de recarga no percurso. Se a autonomia for suficiente, o sistema pode informa a previsão de SOC ao chegar, permitindo ao motorista decidir sobre possíveis desvios ou estratégias de condução mais econômicas. Adicionalmente, podem-se estimar o tempo de viagem combinando-se as informações de distância, velocidade média prevista e eventuais fatores de trânsito.

4.8 Considerações Finais

Neste capítulo, foi apresentada a metodologia utilizada para o desenvolvimento do gêmeo digital da bateria, incluindo a geração de dados pseudo-sintéticos, a modelagem eletroquímica e térmica da bateria, e a implementação de estimadores baseados no EKF. A construção de um conjunto de dados sintético foi viabilizada pela integração entre o FASTSim e o PyBaMM, permitindo a simulação de diferentes perfis de condução e condições operacionais da bateria. Além disso, foram detalhados os métodos para estimativa de parâmetros do modelo RV-ECM, incluindo a caracterização da curva de tensão de circuito aberto e a identificação dos componentes do circuito equivalente por meio de otimização. A abordagem adotada garante que os modelos representem fielmente a dinâmica da bateria, possibilitando a estimativa de estados críticos como SOC e temperatura interna.

Adicionalmente, foram discutidas as estratégias de sintonia do EKF, incluindo a utilização de algoritmos genéticos para a calibração das matrizes de covariância, de forma a minimizar os erros na estimativa de SOC. Também foram apresentados os métodos de previsão de autonomia e chegada ao destino, levando em consideração fatores como histórico de consumo, relevo do trajeto e velocidade média esperada. A integração dessas estimativas ao gêmeo digital permite que o sistema forneça previsões mais precisas e adaptáveis às condições reais de operação.

Com a base metodológica definida, o próximo capítulo apresenta os resultados obtidos com a estimativa dos estados da bateria utilizando os modelos ECMT e RV-ECMT. Além disso, serão analisados os testes de validação do modelo, destacando o desempenho das estratégias de estimação sob diferentes perfis de condução e condições operacionais.

Capítulo 5

Resultados

O presente capítulo tem como objetivo apresentar e analisar os resultados obtidos a partir da implementação e validação do modelo RV-ECMT, bem como da aplicação dos estimadores de estado no contexto do gêmeo digital para baterias. Primeiramente, são descritos os testes de validação dos modelos de bateria utilizando dados pseudo-sintéticos gerados conforme a metodologia discutida no capítulo anterior. Em seguida, avalia-se o desempenho dos Filtros de Kalman Estendidos (EKF) aplicados à estimação do Estado de Carga (SOC) sob diferentes condições operacionais, incluindo ciclos de condução padronizados. Os resultados quantitativos, como erros médios e métricas de desempenho, são discutidos para comparar a eficácia dos diferentes modelos e algoritmos utilizados.

5.1 Estimação dos parâmetros de difusão

As correntes utilizadas na estimação dos parâmetros $\alpha \in \beta$ do modelo de difusão para temperatura de 25 °C estão ilustradas na Figura 5.1. Os resultados do problema de otimização abordado na Seção 4.3 estão presentes na Tabela 5.1.

Figura 5.1: Correntes de teste de descarga em corrente constante.



Fonte: Autoria própria.

Tabela 5.1: Valores dos parâmetros α e β para diferentes temperaturas.

Parâmetro	Temperatura (°C)						
	-10	-5	0	5	10	15	20
α	18236,45	18267,14	18291,75	$18311,\!53$	18327,38	18340,04	$18350,\!15$
β	0,192008	0,191008	0,199008	0,207008	0,215008	0,224008	0,232008

Parâmetro	Temperatura (°C)					
	25	30	35	40	45	50
α	18358,19	18364,63	18369,78	18373,93	18377,30	18380,05
eta	0,241008	0,249008	$0,\!258007$	0,267007	$0,\!275007$	$0,\!285007$
Easter Asteria asteria						

Fonte: Autoria própria.

Após determinar os pares (α, β) em cada temperatura de ensaio, interpolou-se esses pontos mediante um polinômio de terceiro grau para obter as funções contínuas $\alpha(T_s)$ e $\beta(T_s)$. A escolha de um polinômio cúbico equilibra, de um lado, a flexibilidade necessária para reproduzir a tendência não linear observada nos dados e, de outro, o número reduzido de parâmetros (apenas quatro coeficientes), o que diminui o risco de sobreajuste (*overfitting*). Ademais, a avaliação de termos até o terceiro grau é computacionalmente leve, facilitando a implementação em tempo real nos algoritmos de estimação. Essa abordagem permite estimar os parâmetros para temperaturas intermediárias não diretamente testadas, garantindo uma melhor representação da dependência térmica do modelo de difusão.

A Figura 5.2 apresenta os resultados da interpolação polinomial para os parâmetros estimados. Observa-se que os valores ajustados seguem uma tendência coerente com o comportamento esperado, indicando que o modelo captura adequadamente a variação térmica de $\alpha \in \beta$.



Figura 5.2: Interpolação polinomial dos parâmetros $\alpha(T_s) \in \beta(T_s)$.

Fonte: Autoria própria.

Os polinômios cúbicos ajustados são expressos pelas seguintes equações:

$$\alpha(T_s) = 6,6907 \times 10^{-4} T_s^3 - 8,6549 \times 10^{-2} T_s^2 + 4,4481 T_s + 1,8291 \times 10^4, \quad (5.1)$$

$$\beta(T_s) = -2,3077 \times 10^{-7} T_s^3 + 1,9720 \times 10^{-5} T_s^2 + 1,2675 \times 10^{-3} T_s + 2,0002 \times 10^{-1}.$$
 (5.2)

A interpolação polinomial utilizada garante que as funções $\alpha(T_s)$ e $\beta(T_s)$ possam ser aplicadas diretamente no modelo de difusão para qualquer temperatura dentro da faixa analisada. Além disso, a suavidade da curva obtida pelos polinômios cúbicos evita oscilações abruptas, proporcionando uma transição mais natural entre os valores experimentais.

5.2 Estimação da curva de Tensão de Circuito Aberto

A tensão de circuito aberto v_{oc} da bateria é uma função do SOC e da temperatura, tornando sua representação tridimensional essencial para capturar a dependência dessas variáveis. Para obter essa relação de forma precisa e contínua, foi utilizada a interpolação por *spline* bivariado, permitindo gerar superfícies suaves que representam $v_{oc}(soc, T_s)$ em toda a faixa de operação. A superfície interpolada foi encapsulada em uma rotina genérica que pode ser invocada, sem ajustes adicionais, tanto pelo simulador do modelo ECMT quanto pelo modelo RV-ECMT. As curvas resultantes para os perfis de carga e descarga estão ilustradas nas Figuras 5.3 e 5.4. Além disso, a *spline* também foi utilizado para calcular a derivada parcial de v_{oc} em relação ao SOC, conforme mostrado nas Figuras 5.5 e 5.6.

O uso da interpolação por *spline* apresenta vantagens significativas em relação a métodos polinomiais tradicionais. Primeiramente, ele evita oscilações indesejadas em regiões onde os dados apresentam variações bruscas, garantindo uma representação mais fiel da curva real da bateria. Além disso, a obtenção da derivada da função é direta e sem necessidade de diferenciação numérica, reduzindo erros e simplificando os cálculos.

As superfícies obtidas para a tensão de circuito aberto indicam uma dependência clara da temperatura, sendo que em temperaturas mais elevadas a tensão tende a ser ligeiramente maior para um mesmo valor de SOC. A diferença entre os perfis de carga e descarga também é evidente, destacando o efeito da histerese eletroquímica. A Tabela 5.2 apresenta os coeficientes das splines ajustadas.

Figura 5.3: Superfície 3D de tensão de circuito aberto estimada com spline para carga.



Fonte: Autoria própria.



Figura 5.4: Superfície 3D de tensão de circuito aberto estimada com *spline* para descarga.

Fonte: Autoria própria.



Figura 5.5: Derivada parcial da tensão de circuito aberto em relação ao SOC para carga.

Fonte: Autoria própria.


Figura 5.6: Derivada parcial da tensão de circuito aberto em relação ao SOC para descarga.

Fonte: Autoria própria.

Parâmetro	Splines de Carga	Splines de Descarga
	[-2,122, -2,122, -2,122,	[-2,122, -2,122, -2,122,
Nég (m)	-2,122, -2,122, -2,122,	-2,122, -2,122, -2,122,
MOS(X)	90,289, 90,289, 90,289,	100, 100, 100,
	90,289, 90,289, 90,289]	$100,\ 100,\ 100]$
	[-10, -10, -10,	[-10, -10, -10,
Nóg (v)	-10, -10, 50,	-10, 50, 50,
(y)	50, 50, 50,	50, 50, 50,
	50, 50]	50]
	[2,855, 2,787, 2,687,	
	2,708, 2,689, 4,444,	[2,590, 2,660, 2,664,
	4,544, 4,633, 4,629,	2,670, 4,680, 4,753,
	4,637, 2,524, 2,389,	4,797, 4,788, 2,222,
Coeficientes	2,332, 2,400, 2,409,	2,124, 2,083, 2,082,
	4,790, 4,773, 4,523,	4,627, 4,801, 4,855,
	4,479, 4,415, 3,490,	4,862, 3,795, 3,767,
	3,589, 3,815, 3,859,	3,757, 3,749, 4,123,
	3,898, 4,426, 4,287,	4,174, 4,194, 4,195]
	4,116, 4,148, 4,121	

Tabela 5.2: Parâmetros das Splines

Fonte: Autoria própria.

A análise da derivada da tensão de circuito aberto $\left(\frac{\partial v_{oc}}{\partial soc}\right)$ é especialmente útil para aplicações em filtros de estimativa de SOC, pois fornece uma relação direta entre variações na tensão e no SOC. Essa informação é fundamental para modelos que utilizam o EKF, pois a matriz de observação do filtro contém essa derivada como um de seus elementos principais. Com o *spline*, essa derivada é obtida de maneira suave e contínua, sem necessidade de aproximações diferenciais, o que melhora a precisão das estimativas.

5.3 Estimação dos parâmetros elétricos

A identificação dos parâmetros elétricos dos modelos ECMT e RV-ECMT foi realizada utilizando um perfil de corrente pulsada, conforme ilustrado na Figura 5.7. A resposta de tensão em vermelho evidencia o processo de difusão, caracterizado pelo aumento gradual da tensão após uma breve descarga em azul. Os parâmetros R_0 , R_1 e C_1 foram estimados para ambos os modelos em diferentes temperaturas (de -10 a 50°C de 5°C em 5°C), a fim de capturar a influência térmica no comportamento dinâmico da impedância da bateria e estão presentes na Tabela 5.3.

Figura 5.7: Perfil de corrente amostrado e tensão resultante para identificação dos parâmetros elétricos do modelo RV-ECMT.



Fonte: Autoria própria.

Modelo	Temperatura ($^{\circ}C$)	$R_{0}\left(\Omega ight)$	$R_{1}\left(\Omega ight)$	$C_{1}\left(F\right)$
	-10	$1,0006 \times 10^{-1}$	$1,0090 \times 10^{-1}$	$1{,}7320\times10^3$
	-5	$1,0148 \times 10^{-1}$	$1,0066 \times 10^{-1}$	$4{,}4277\times10^{3}$
	0	$7,\!4283 imes 10^{-2}$	$7,\!3820 imes 10^{-2}$	$1{,}6966\times10^{3}$
	5	$7,\!3279 imes 10^{-2}$	$7,\!5064 imes 10^{-2}$	$1{,}7127\times10^{3}$
	10	$5,5071 imes 10^{-2}$	$5,\!4626 imes 10^{-2}$	$2{,}2305\times10^3$
	15	$5,3184 \times 10^{-2}$	$5,\!6162 imes 10^{-2}$	$2{,}0686\times10^3$
RV-ECMT	20	$3,7396 imes 10^{-2}$	$3,\!3594\times10^{-2}$	$2{,}9677\times10^{3}$
	25	$2,0883 \times 10^{-2}$	$3,0210 \times 10^{-2}$	$6{,}3278\times10^{3}$
	30	$1,8671 \times 10^{-2}$	$2,7654 \times 10^{-2}$	$3,5085 \times 10^3$
	35	$1,\!6754 \times 10^{-2}$	$2,5431 \times 10^{-2}$	$2{,}4309\times10^{3}$
	40	$1,5950 \times 10^{-2}$	$2,\!4332 \times 10^{-2}$	$3{,}8246\times10^{3}$
	45	$1,\!4910 imes 10^{-2}$	$2,\!2946 imes 10^{-2}$	$5{,}2206 imes10^3$
	50	$1,3795 imes 10^{-2}$	$2,2624 \times 10^{-2}$	$4{,}7072\times10^{3}$
	-10	$9,9052 \times 10^{-2}$	$1,0754 \times 10^{-1}$	$1,1380 \times 10^3$
	-5	$9,1428 \times 10^{-2}$	$8,5004 \times 10^{-2}$	$1{,}2572\times10^{3}$
	0	$7,5935 imes 10^{-2}$	$7,5593 imes 10^{-2}$	$1{,}5691\times10^{3}$
	5	$6,\!6397 imes 10^{-2}$	$6,3277 imes 10^{-2}$	$1{,}8453\times10^{3}$
	10	$5,\!6170 imes 10^{-2}$	$5,\!6275 imes 10^{-2}$	$2{,}1177\times10^{3}$
	15	$4,3706 \times 10^{-2}$	$5,5370 imes 10^{-2}$	$1{,}8232\times10^{3}$
ECMT	20	$2{,}2722\times10^{-2}$	$3,\!5892 imes 10^{-2}$	$2{,}1138\times10^3$
	25	$2,\!1334 \times 10^{-2}$	$3,3326 \times 10^{-2}$	$2{,}1973\times10^{3}$
	30	$1,9737 \times 10^{-2}$	$3,0121 \times 10^{-2}$	$2{,}3622\times10^3$
	35	$1,8840 \times 10^{-2}$	$2,7677 \times 10^{-2}$	$7{,}4198\times10^{3}$
	40	$1{,}6979\times10^{-2}$	$2{,}6001\times10^{-2}$	$2{,}6040\times10^3$
	45	$1{,}6007\times10^{-2}$	$2{,}4460\times10^{-2}$	$2{,}8389\times10^3$
	50	$1{,}4455\times10^{-2}$	$2{,}4274\times10^{-2}$	$2{,}9899\times10^3$

Tabela 5.3: Parâmetros identificados dos modelos RV-ECMT e ECMT para diferentes temperaturas.

Fonte: Autoria própria.

Para garantir a continuidade e a suavidade da variação térmica dos parâmetros, os valores identificados foram ajustados por meio de um polinômio de grau 3, permitindo a obtenção

das funções $R_0(T_s)$, $R_1(T_s)$ e $C_1(T_s)$, que estão ilustradas na Figura 5.8. Entretanto, a inspeção dos dados revelou a presença de um valor atípico (*outlier*) nos dados de estimação dos capacitores, caracterizado por um valor de $C_1 > 7000$ F para o modelo ECMT em $35^{\circ}C$ e $C_1 > 4000$ F em $-5^{\circ}C$ e $C_1 > 6000$ F em $35^{\circ}C$ para o modelo RV-ECMT. Esses pontos, nitidamente incompatíveis com a tendência física esperada, foram removidos antes do ajuste, a fim de evitar distorções na interpolação de $C_1(T_s)$ e preservar a consistência dos modelos.

Figura 5.8: Ajuste de curvas $R_0(T_s)$, $R_1(T_s) \in C_1(T_s)$ para os modelos RV-ECMT e ECMT.



Fonte: Autoria própria.

As equações ajustadas para o modelo RV-ECMT são expressas por:

$$R_{0\,RV}(T_s) = 5,5321 \times 10^{-7} T_s^3 - 7,3888 \times 10^{-6} T_s^2 - 2,3167 \times 10^{-3} T_s + 8,1657 \times 10^{-2},$$
(5.3)

$$R_{1\,RV}(T_s) = 2,9276 \times 10^{-7} T_s^3 + 9,5083 \times 10^{-6} T_s^2 - 2,3267 \times 10^{-3} T_s + 8,0760 \times 10^{-2},$$
(5.4)

$$C_{1\,RV}(T_s) = 5,7800 \times 10^{-3} T_s^3 + 5,8221 \times 10^{-1} T_s^2 + 2,0337 \times 10^1 T_s + 1,8028 \times 10^3,$$
(5.5)

e para o modelo ECMT:

$$R_{0CC}(T_s) = 3,4533 \times 10^{-7} T_s^3 + 9,5678 \times 10^{-6} T_s^2 - 2,5057 \times 10^{-3} T_s + 7,6213 \times 10^{-2},$$
(5.6)

$$R_{1CC}(T_s) = -1,4516 \times 10^{-7} T_s^3 + 3,5340 \times 10^{-5} T_s^2 - 2,4474 \times 10^{-3} T_s + 7,6253 \times 10^{-2},$$
(5.7)

$$C_{1CC}(T_s) = 1,4238 \times 10^{-2} T_s^3 - 9,3265 \times 10^{-1} T_s^2 + 3,9716 \times 10^1 T_s + 1,5928 \times 10^3.$$
(5.8)

Com essa interpolação, é possível estimar os parâmetros elétricos para temperaturas intermediárias dentro da faixa analisada, garantindo uma modelagem contínua da variação térmica do sistema. Esse ajuste permite a aplicação do modelo RV-ECMT em condições variadas, reduzindo a necessidade de reidentificação experimental dos parâmetros para cada temperatura específica.

5.4 Desempenho no cenário de descarga do VE

Para avaliar o desempenho dos estimadores, foram realizados testes sob diferentes perfis de condução. Como exemplo, na Figura 5.9 estão apresentados os resultados obtidos para o teste HWFET a $25^{\circ}C$, mostrando a evolução do SOC estimado pelos EKFs formulados para os modelos ECMT e RV-ECMT em comparação com o valor de referência obtido pela simulação eletroquímica, sem utilizar a medição de temperatura da superfície da bateria. O erro de estimação correspondente é exibido na Figura 5.10, permitindo visualizar as oscilações e desvios ao longo do ciclo. Neste teste específico, o SOC inicial real era de 100%, enquanto a condição inicial do filtro foi definida com 50%.



Figura 5.9: Resultados da estimação do SOC para o padrão HWFET a $25^{\circ}C$.

Figura 5.10: Gráfico do erro na estimação do SOC para o padrão HWFET a $25^{\circ}C$.



Fonte: Autoria própria.

Para uma análise mais ampla, os testes foram repetidos considerando as variações sem e com a medição da temperatura de superfície da célula para outros perfis de condução, nas temperaturas de $-10^{\circ}C$ a $50^{\circ}C$ com passo de $5^{\circ}C$, permitindo verificar a robustez dos estimadores sob diferentes condições térmicas. Nas Tabelas 5.4 e 5.7 estão apresentados, respectivamente, as métricas de erro por perfil de condução e de forma global integrando todos os ensaios, para os modelos sem e com a medição da temperatura de superfície da célula. Por sua vez, as Tabelas 5.5 e 5.6 contêm os resultados correspondentes por faixa de temperatura para os modelos sem e com essa medição, respectivamente.

Com as tabelas, analisa-se:

- Desempenho por perfil de condução aponta o modelo com menor erro em cada ciclo de operação (UDDS, HWFET e US06);
- Desempenho por temperatura identifica o modelo mais preciso em cada faixa térmica;
- *Desempenho global* revela o estimador de SOC com melhor acurácia média em todo o conjunto de testes.

Modelo	Perfil	RMSE $(\%)$	MAE $(\%)$
	UDDS	2,9372	2,3021
ECMT (\mathbf{H}_{CCT})	HWFET	3,3140	2,7955
(001,v)	US06	9,9655	7,3786
	UDDS	3,3766	2,8059
$(\mathbf{H}_{\mathrm{DV}})$	HWFET	7,7201	4,0030
(/////.//)	US06	$5,\!6097$	3,6489
	UDDS	2,6351	2,2600
ECMT $(\mathbf{H}_{CCT}, \mathbf{ut})$	HWFET	3,2934	2,7987
(001,00)	US06	8,7939	7,1858
	UDDS	$4,\!1566$	3,3145
(\mathbf{H}_{PVT})	HWFET	3,5011	2,8484
(IK <i>VI</i> , <i>vt</i>)	US06	4,2359	$3,\!1969$

Tabela 5.4: Métricas de erro por perfil de condução com e sem medição da temperatura de superfície da célula.

Fonte: Autoria própria.

T (°C)	ECMT $(\mathbf{H}_{CCT,v})$		RV–ECMT $(\mathbf{H}_{RVT,v})$	
	RMSE $(\%)$	MAE (%)	RMSE $(\%)$	MAE (%)
-10	13,7820	$10,\!4765$	8,4435	4,9922
-5	14,7942	11,2320	$7,\!6517$	$4,\!3976$
0	$5,\!9155$	4,2029	$12,\!4463$	$5,\!5514$
5	$5,\!1343$	3,3261	3,8146	2,8642
10	$4,\!2578$	3,2222	4,3421	2,8481
15	$3,\!1061$	2,6488	$5,\!5823$	3,0974
20	$3,\!2378$	2,7133	$6,\!4303$	$3,\!9032$
25	$3,\!0888$	2,6444	$5,\!8987$	$3,\!3768$
30	$3,\!1123$	$2,\!6593$	4,7528	$3,\!2359$
35	$3,\!1290$	$2,\!6710$	3,2636	2,7482
40	4,3363	$2,\!8199$	$3,\!2372$	2,7471
45	$3,\!1745$	2,7109	3,2624	2,7720
50	3,2038	2,7367	$3,\!2686$	2,7834

Tabela 5.5: Métricas de erro organizadas por temperatura sem medição da temperatura de superfície da célula.

Fonte: Autoria própria.

T (°C)	ECMT $(\mathbf{H}_{CCT,vt})$		RV–ECMT $(\mathbf{H}_{RVT,vt})$	
	RMSE (%)	MAE (%)	RMSE (%)	MAE (%)
-10	$12,\!1576$	9,7405	$5,\!3392$	4,0357
-5	12,7450	10,2069	5,1624	3,8686
0	6,3208	5,2689	5,7386	$3,\!9196$
5	$4,\!1587$	$3,\!4987$	4,3608	3,2649
10	$3,\!1952$	2,7427	$3,\!4859$	2,7919
15	3,0648	2,6466	$3,\!6530$	2,8656
20	$3,\!0875$	$2,\!6638$	$3,\!5508$	2,9341
25	$3,\!1498$	$2,\!6819$	3,4186	2,8625
30	$3,\!1408$	$2,\!6968$	$3,\!4478$	2,8306
35	$3,\!1537$	$2,\!6895$	3,3371	2,7941
40	$3,\!2092$	2,7320	$3,\!4037$	2,7776
45	$3,\!1571$	$2,\!6953$	3,2724	2,7704
50	3,2366	2,7618	3,3682	$2,\!8435$

Tabela 5.6: Métricas de erro organizadas por temperatura com medição da temperatura de superfície da célula.

Fonte: Autoria própria.

Tabela 5.7: Métricas de erro globais para cada modelo com e sem medição da temperatura de superfície da célula.

Modelo	RMSE (%)	MAE $(\%)$
ECMT	5 4056	4 1587
$(\mathbf{H}_{CCT,v})$	0,1000	1,1001
RV-ECMT	5 5688	3 4860
$(\mathbf{H}_{RVT,v})$	9,9088	5,4000
ECMT	1 9059	4 0789
$(\mathbf{H}_{CCT,vt})$	4,5055	4,0105
RV-ECMT	3 0645	3 1100
$(\mathbf{H}_{RVT,vt})$	5,9045	5,1199
E	A	•

Fonte: Autoria própria.

Analisando a Tabela 5.5, é possível notar que as maiores imprecisões aparecem nas temperaturas mais baixas. Tanto o ECMT quanto o RV-ECMT apresentam valores de RMSE superiores a 8 % e MAE acima de 5 % em $-10^{\circ}C$. Essas métricas caem para a faixa de 3%-4% quando a operação ocorre para temperaturas maiores ou iguais a $10^{\circ}C$. Esse comportamento demonstra a limitação dos modelos em condições muito frias, nas quais a dinâmica interna da bateria se torna mais complexa de representar.

Ao analisar o desempenho por ciclo de condução, apresentado na Tabela 5.4, destaca-se o perfil dinâmico US06 por apresentar os maiores valores nas métricas de erro. Nesse perfil, o modelo RV-ECMT apresenta erros na faixa de 3% a 5%, desempenho superior ao do ECMT, que registrou erros entre 7% e 9%, tanto nas versões com quanto nas versões sem medição da temperatura superficial da célula. O melhor resultado do RV-ECMT nesse cenário indica que a inclusão do termo de difusão simplificado ajuda a capturar mais fielmente as variações rápidas de corrente de acelerações e frenagens bruscas.

Ademais, a inclusão da medição da temperatura superficial da célula promoveu uma melhoria significativa em praticamente todas as métricas avaliadas, como observado nas Tabelas 5.4, 5.5 e 5.6, com algumas reduções de erro chegando a aproximadamente 55%, como para o RMSE do perfil HWFET com o modelo RV-ECMT.

Considerando o conjunto completo de temperaturas e ciclos, porém, o desempenho global dos modelos é próximo, como ilustrado na Tabela 5.7. Para os modelos sem a medição da temperatura superficial da célula, observa-se que, em média, o ECMT apresenta uma ligeira vantagem em termos de RMSE, indicando menor dispersão quadrática dos erros. Por outro lado, o RV-ECMT mostra uma leve superioridade na métrica MAE, revelando menor erro absoluto médio. Já nos modelos com a medição da temperatura superficial, o RV-ECMT supera claramente o ECMT, alcançando erros cerca de 1 ponto percentual menores, por exemplo, o ECMT apresenta RMSE de aproximadamente 4,9%, enquanto o RV-ECMT atinge 4%. Em síntese, os modelos demonstram adequação para a estimativa do SOC em aplicações veiculares, destacando-se o modelo RV-ECMT com medição da temperatura superficial da célula, que oferece maior precisão.

Em relação à estimativa da temperatura da superfície da célula (T_s) , na Tabela 5.8 estão apresentadas as métricas de erro para os modelos sem e com a medição da temperatura de superfície da célula. Observa-se que, na ausência da medição da temperatura da célula, as métricas situam-se em torno de 3 a 5 °C. Entretanto, quando essa medição está disponível, o erro reduz-se significativamente, atingindo valores próximos a 0,1 °C.

Modelo	RMSE (° C)	MAE (° C)	
ECMT	3 1767	2 6230	
$(\mathbf{H}_{CCT,v})$	5,1707	2,0230	
RV-ECMT	5 6722	1 9308	
$(\mathbf{H}_{RVT,v})$	5,0122	4,5500	
ECMT	0 1218	0 1023	
$(\mathbf{H}_{CCT,vt})$	0,1210	0,1025	
RV-ECMT	0 1961	0 1080	
$(\mathbf{H}_{RVT,vt})$	0,1201	0,1089	
Font	Fonte: Autoria própria.		

Tabela 5.8: Erros globais e médios dos modelos ECMT e RV-ECMT para a estimativa de temperatura sem e com a medição da temperatura de superfície da célula.

5.5 Desempenho na estimação de alcance

Na Tabela 5.9 são apresentadas as métricas de erro obtidas para a tarefa de estimação do alcance dos veículos, considerando diferentes janelas de histórico de distância percorrida (25 km, 50 km e 100 km) e o erro global agregado para os casos sem e com medição da temperatura de superfície da célula.

Modelo	Janela (km)	MAE (km)	RMSE (km)
	25	45,7834	51,4022
ECMT	50	$41,\!5919$	46,8135
$(\mathbf{H}_{CCT,v})$	100	40,1824	45,2284
_	Global	42,5192	47,8147
	25	$35,\!6723$	41,5407
RV-ECMT	50	33,6028	39,6464
$(\mathbf{H}_{RVT,v})$	100	$33,\!4157$	39,9584
	Global	$34,\!2303$	40,3818
	25	46,8367	51,7532
$\begin{array}{l} \text{ECMT} \\ \left(\mathbf{H}_{CCT,vt} \right) \end{array}$	50	43,2873	48,1528
	100	$42,\!3519$	47,2430
	Global	$44,\!1586$	49,0496
	25	37,3797	42,4688
$\begin{array}{l} \text{RV-ECMT} \\ (\mathbf{H}_{RVT,vt}) \end{array}$	50	34,8500	39,5890
	100	34,2804	39,1451
	Global	35,5034	40,4010

Tabela 5.9: Métricas de erro para a estimação de alcance sem e com medição da temperatura de superfície da célula.

Observa-se na Tabela 5.9 que os menores erros de estimação de alcance foram obtidos para janelas de histórico maiores. Esse comportamento é esperado, pois janelas mais longas suavizam variações transitórias de consumo energético, proporcionando uma previsão mais estável e precisa do alcance residual. Além disso, o modelo RV-ECMT apresentou consistentemente os menores valores de erro, tanto em termos de MAE quanto de RMSE, em comparação ao modelo ECMT. Esse resultado reforça a capacidade do modelo proposto em capturar dinâmicas internas relevantes da bateria, mesmo em condições de operação variáveis, e em fornecer estimativas de autonomia mais confiáveis para aplicações veiculares práticas.

Além disso, considerando que o teste empregado — composto por 30 repetições de cada ciclo — resulta em uma distância percorrida da ordem de 400 km, os erros absolutos médios observados correspondem a aproximadamente 10% de erro relativo na estimação do alcance.

5.6 Observabilidade dos modelos

A análise de observabilidade foi realizada em todos os pontos de operação (corrente, SOC, tensão e temperatura) amostrados nos perfis de condução UDDS, HWFET e US06, para as duas formulações de modelo: o ECMT e o RV-ECMT.

Para o ECMT, cuja dimensão do espaço de estados é n = 4, a matriz de observabilidade discreta apresentou posto completo em praticamente 100% linearizações avaliadas, com exceções em alguns instantes na qual a matriz de observabilidade apresentou rank(\mathbf{O}) = 3 < 4, correspondendo a apenas 0,0004% dos pontos de um perfil de condução. Essa perda pontual é atribuída a colinearidade numérica transitória e não compromete a estimabilidade, pois: não existe região contínua de não-observabilidade; os modos envolvidos permanecem estáveis; a excitação subsequente e o ruído de processo restauram o posto completo imediatamente. Dessa forma, assume-se o ECMT como completamente observável para fins de projeto do EKF.

O modelo RV-ECMT possui n = 14 estados quando M = 10: um associado ao circuito equivalente; dois às temperaturas e M + 1 = 11 à estados de difusão. A classificação da matriz de observabilidade resulta em posto $r \in [9, 11]$ para todos os pontos amostrados, revelando cinco modos não observáveis ou temporariamente não observáveis, que correspondem a dinâmicas internas de difusão. Apesar da observabilidade parcial, o EKF de ordem completa pode ser formulado porque os modos não observáveis são estáveis, uma vez que os autovalores para esses modos permanecem estritamente dentro do círculo unitário, logo seus erros não divergem. Em consequência, o EKF mantém estimativas consistentes para todas as 14 componentes do vetor de estado, mesmo na ausência de medições diretas para os cinco modos não observáveis. Ademais, resultados de simulação demonstram que a estimativa de SOC e de temperatura de superfície não sofre degradação significativa quando comparada ao ECMT totalmente observável, corroborando a robustez do filtro frente à observabilidade parcial.

5.7 Visão geral do Gêmeo Digital desenvolvido

A Figura 5.11 organiza logicamente os componentes que compõem o DT proposto, salientando o fluxo bidirecional de informações entre o sistema físico e o sistema virtual.

Figura 5.11: Arquitetura de alto nível do gêmeo digital para o sistema de armazenamento de energia veicular. A área delimitada em azul corresponde ao domínio virtual do DT, enquanto a região tracejada em laranja representa o domínio físico do veículo.



Fonte: Autoria própria.

Fluxo de informações

- Entradas provenientes do veículo: corrente da bateria i_b [A], tensão do terminal v_b [V], temperatura ambiente T_{amb} [°C] e velocidade do veículo v [km h⁻¹]. Quando disponível, inclui-se também a medição da temperatura da superfície da célula T_s [°C].
- Saídas principais do DT: estado de carga SOC, ∈ [0,1], estado de temperatura SOT(T_c, T_s) [°C] (núcleo e superfície) e estimativa de alcance d_{rem} [km].

Componentes internos do DT

1. EKF + RV-ECMT

Bloco de estimação que combina um EKF com o modelo RV-ECMT. Esse modelo eletroquímico simplificado, acoplado à dinâmica térmica, permite estimar de forma conjunta $[SOC, T_c, T_s]$.

2. Gerenciamento do DT

Orquestra o fluxo de dados entre o estimador, o módulo de estimativa de alcance e o banco de dados, além de encaminhar comandos ou alertas ao veículo.

3. Estimativa de alcance

Recebe o *SOC*, velocidade e capacidade efetiva da bateria para calcular em tempo real o alcance residual, utilizando a média de consumo energético dentro de uma janela de distância histórica percorrida.

4. Armazenamento de dados

Banco dedicado que registra séries temporais das variáveis medidas, estados estimados e parâmetros fornecidos pelo veículo ou pelo fabricante. Esse armazenamento possibilita auditoria, recalibração e treinamento de modelos preditivos de degradação e desempenho.

O conjunto dessas funcionalidades faz com que o gêmeo digital opere como uma cópia virtual do sistema físico, fornecendo estimativas em tempo real essenciais para o gerenciamento de energia, diagnóstico preventivo e planejamento de rotas do veículo elétrico.

5.8 Considerações Finais

Os resultados apresentados neste capítulo demonstram a eficácia dos modelos ECMT e RV-ECMT na estimação do SOC sob diferentes condições operacionais. As modelagens elétrica, de difusão e térmica permitiram compor um modelo capaz de capturar as variações dinâmicas da bateria, oferecendo uma estimativa do SOC ao longo dos testes mais precisa para testes agressivos, como o US06. Além disso, a integração de um polinômio cúbico para interpolação dos parâmetros térmicos R_0 , R_1 e C_1 e de difusão $\alpha \in \beta$, bem como a aplicação do *spline* para estimar a função de circuito aberto $v_{oc}(soc, T_s)$ e sua derivada, foram essenciais para garantir uma representação contínua e realista do comportamento da bateria.

O uso do *spline* para estimar $v_{oc}(soc, T_s)$ também trouxe vantagens significativas sobre métodos polinomiais tradicionais. Enquanto aproximações polinomiais podem apresentar oscilações não desejadas, especialmente em regiões de transição de SOC, a abordagem por *spline* permitiu obter uma representação mais suave e contínua da curva de circuito aberto. Além disso, a derivada de v_{oc} foi diretamente obtida por meio do próprio *spline*, eliminando a necessidade de diferenciação numérica e garantindo maior estabilidade nas estimativas.

Os testes de estimação do SOC para os diferentes ciclos de condução padronizados (UDDS, HWFET e US06) confirmaram a adequação dos modelos para aplicações em veículos elétricos, com erros médios globais da ordem de 5% nas condições testadas. O erro de estimação variou de acordo com o perfil de condução, sendo maior em ciclos caracterizados por variações bruscas de corrente devido às acelerações intensas, como no HWFET e US06. Esse resultado sugere que, para cenários altamente dinâmicos, técnicas complementares, como filtragem adaptativa ou fusão de sensores, poderiam ser incorporadas para aprimorar ainda mais a precisão da estimação.

Em suma, os resultados obtidos indicam que o modelo RV-ECMT apresenta uma boa capacidade de generalização e robustez para aplicações de gêmeos digitais em veículos elétricos. No entanto, há a necessidade de refinamentos adicionais, como melhorias na sintonia do filtro, realização de validação em outras temperaturas e adicionar considerações sobre a degradação da célula com a estimação do SOH.

Capítulo 6

Conclusões e Trabalhos Futuros

Este trabalho propôs o desenvolvimento de um gêmeo digital para baterias de veículos elétricos, integrando modelos eletroquímicos simplificados e técnicas de estimação de estados. Os principais resultados e contribuições podem ser resumidos da seguinte forma:

Modelagem e estimação de SOC: o modelo RV-ECMT proposto, que combina a dinâmica eletroquímica simplificada com circuito elétrico equivalente e efeitos térmicos, juntamente com um Filtro de Kalman Estendido, demonstrou capacidade na estimação do SOC considerando efeitos térmicos. Isso representa um avanço significativo em comparação ao estudo feito no artigo do trabalho publicado, que não fazia uso de parâmetros dependentes da temperatura ^[119]. Por meio dos testes com ciclos padronizados (UDDS, HWFET e US06), obteve-se um erro quadrático médio global inferior a 4% quando há disponibilidade da medição da temperatura superficial da célula, validando assim a eficácia do modelo em condições dinâmicas típicas de operação de veículos elétricos.

Geração de dados pseudo-sintéticos: a abordagem utilizando o FASTSim e o PyBaMM permitiu a geração de dados fisicamente consistentes, simulando perfis de condução realistas e respostas eletroquímicas detalhadas. Isso facilitou a validação dos modelos sem dependência exclusiva de dados experimentais, reduzindo custos e tempo de desenvolvimento. O uso de dados pseudo-sintéticos apresenta vantagens importantes em comparação ao uso exclusivo de dados experimentais: (i) permite a geração controlada e diversificada de cenários operacionais, cobrindo uma ampla gama de condições de temperatura, perfil de corrente e estados de carga, sem a necessidade da realização extensiva de ensaios físicos; (ii) garante maior reprodutibilidade, uma vez que os perfis simulados podem ser reproduzidos com precisão para comparação de diferentes modelos; e (iii) possibilita a injeção sistemática de ruídos e incertezas de medição, testando a robustez dos algoritmos de estimação de estados em condições realistas mas parametrizáveis. Dessa forma, a geração de dados pseudo-sintéticos acelera o ciclo de desenvolvimento, viabiliza estudos de sensibilidade e reduz os riscos associados a limitações experimentais, como falhas de instrumentação ou variabilidade entre amostras.

Arquitetura modular: a estrutura proposta do gêmeo digital permitiu a integração de modelos térmicos, elétricos e eletroquímicos, o que poderia ser adaptado para implementação em sistemas de gerenciamento de baterias existentes, aprimorando estimativas de estado. Entre os módulos desenvolvidos no gêmeo digital, destacam-se: o módulo do estimador EKF + RV-ECMT, bloco responsável pela estimação em tempo real do estado de carga (SOC) e dos estados térmicos internos (T_c , T_s) da célula, combinando um Filtro de Kalman Estendido com o modelo RV-ECMT; o módulo de gerenciamento do Gêmeo Digital, que orquestra o fluxo de dados entre os diversos componentes internos, gerenciando entradas, saídas, alarmes e comunicação com o sistema embarcado do veículo; o módulo de estimativa de alcance, responsável pelo cálculo contínuo da autonomia remanescente do veículo, utilizando o histórico de consumo energético e o estado atual de carga; e o módulo de armazenamento de dados, que é o banco dedicado ao registro de séries temporais de variáveis medidas, estados estimados e parâmetros aprendidos ou fornecidos pelo fabricante.

Essa organização modular não apenas aumenta a flexibilidade e escalabilidade do gêmeo digital, como também abre caminho para a evolução contínua da plataforma, permitindo incorporar novos modelos físicos, algoritmos de estimação avançados e recursos de inteligência artificial de forma estruturada.

6.1 Sugestões de Trabalhos Futuros

Com base nos resultados obtidos e nas limitações identificadas, propõem-se as seguintes direções para pesquisas futuras:

- Tratamento da observabilidade parcial dos modelos ECMT e RV-ECMT: para o modelo ECMT, observou-se uma condição específica onde a observabilidade é de aproximadamente 99,9996%, indicando possíveis problemas pontuais de aproximação numérica. É importante investigar a identificação automática dessas condições e desenvolver algoritmos específicos para tratar tais casos no observador/estimador. No caso do RV-ECMT, no qual apenas 9 dos 14 estados são observáveis, sugere-se aplicar a decomposição de Kalman, separando explicitamente os modos observáveis e não observáveis, para então desenvolver o observador diretamente sobre a parte observável do sistema.
- Adição de efeitos de envelhecimento no modelo da bateria: incorporar mecanismos de envelhecimento no modelo do gêmeo digital, como perda de capacidade (*capacity fade*) e aumento de resistência interna, permitirá a estimativa contínua do Estado de Saúde (SOH *State of Health*). A modelagem do envelhecimento contribuirá para previsões mais realistas da autonomia e da vida útil da bateria, além de possibilitar a aplicação de estratégias de manutenção preditiva.
- Exploração de diferentes químicas de baterias: expandir o escopo do gêmeo digital para contemplar diferentes químicas de baterias e futuras tecnologias de alta densidade energética. Isso exigirá a reparametrização dos modelos elétrico, térmico e de difusão, garantindo a aplicabilidade da metodologia a diferentes plataformas de veículos elétricos.
- Análise e modelagem de abusos térmicos, elétricos e mecânicos: o desenvolvimento de modelos capazes de prever comportamentos sob condições de abuso como sobrecarga, curto-circuito, esmagamento mecânico e superaquecimento permitirá que o gêmeo digital auxilie também na detecção precoce de riscos de falha catastrófica, como a avalanche térmica (*thermal runaway*). Essa expansão é crucial para aumentar a segurança operacional de sistemas de armazenamento de energia.
- Uso de redes generativas para criação de novos cenários de teste: a aplicação de redes generativas, como as Redes Adversariais Generativas (GANS -

Generative Adversarial Networks) ou Autocodificadores Variacionais (VAEs -*Variational Autoencoders*), poderá expandir o conjunto de cenários operacionais disponíveis para o treinamento e validação do gêmeo digital. Essa abordagem permitirá a geração de perfis realistas de consumo energético, trajetórias de temperatura e padrões de carga/descarregamento em condições extremas ou raramente observadas em dados reais, aumentando a robustez e a capacidade de generalização do modelo.

- Inclusão de efeitos de topografia e condições climáticas na estimação de alcance: a melhoria da precisão na previsão da autonomia poderá ser alcançada pela inclusão de fatores ambientais, como variações de inclinação do terreno, resistência do vento e temperatura ambiente. Integrar essas variáveis permitirá que o gêmeo digital adapte dinamicamente a estimativa de alcance às condições reais de operação, aumentando a confiabilidade do sistema para o usuário final.
- Validação em ambientes operacionais reais: a realização de campanhas de validação utilizando dados reais coletados de frotas de veículos elétricos será fundamental para comprovar a robustez dos modelos e estimadores desenvolvidos. Ensaios em condições urbanas e rodoviárias, sob diferentes perfis climáticos e de tráfego, permitirão o ajuste fino dos parâmetros e a identificação de limitações práticas que não podem ser totalmente capturadas por simulações.

Referências bibliográficas

1 IPCC. Book. *Climate Change 2022: Impacts, Adaptation and Vulnerability*. Cambridge, UK and New York, USA: Cambridge University Press, 2022. 3-33 p. (Summary for Policymakers). ISBN 9781009325844.

2 International Energy Agency (IEA). *Global EV Outlook 2024*. 2024. Acessado em: 20 de jan. de 2024. Disponível em: https://www.iea.org/reports/global-ev-outlook-2024>.

3 REITZ, R. D. et al. Ijer editorial: The future of the internal combustion engine. *International Journal of Engine Research*, v. 21, n. 1, 2019. Disponível em: https://doi.org/10.1177/1468087419877990>.

4 BIEKER, Georg. A global comparison of the life-cycle greenhouse gas emissions of combustion engine and electric passenger cars. *communications*, v. 49, n. 30, p. 847129–102, 2021.

5 UNEP. *Emissions Gap Report 2023*. United Nations Environment Programme, 2023. Disponível em: https://www.unep.org/resources/emissions-gap-report-2023.

6 FRIEDLINGSTEIN, P. et al. Global carbon budget 2023. *Earth System Science Data*, v. 15, n. 12, p. 5301–5369, 2023. Disponível em: ">https://essd.copernicus.org/articles/15/5301/2023/>.

8 SANGUESA, Julio A. et al. A review on electric vehicles: Technologies and challenges. *Smart Cities*, v. 4, n. 1, p. 372–404, 2021. ISSN 2624-6511. Disponível em: https://www.mdpi.com/2624-6511/4/1/22.

9 ALANAZI, Fayez. Electric vehicles: Benefits, challenges, and potential solutions for widespread adaptation. *Applied Sciences*, v. 13, n. 10, 2023. ISSN 2076-3417. Disponível em: <https://www.mdpi.com/2076-3417/13/10/6016>.

10 D'ADAMO, Idiano; ROSA, Paolo. A structured literature review on obsolete electric vehicles management practices. *Sustainability*, v. 11, n. 23, 2019. ISSN 2071-1050. Disponível em: https://www.mdpi.com/2071-1050/11/23/6876>.

11 CIEZ, Rebecca E.; WHITACRE, J. F. Examining different recycling processes for lithium-ion batteries. *Nature Sustainability*, v. 2, n. 2, p. 148–156, 2019. ISSN 2398-9629. Disponível em: https://doi.org/10.1038/s41893-019-0222-5>.

12 AGUSDINATA, Datu Buyung; LIU, Wenjuan. Global sustainability of electric vehicles minerals: A critical review of news media. *The Extractive Industries and Society*, v. 13, p. 101231, 2023. ISSN 2214-790X. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2214790X23000229.

13 MEEGODA, Jay N.; MALLADI, Sarvagna; ZAYAS, Isabel C. End-of-life management of electric vehicle lithium-ion batteries in the united states. *Clean Technologies*, v. 4, n. 4, p. 1162–1174, 2022. ISSN 2571-8797. Disponível em: https://www.mdpi.com/2571-8797/4/4/71.

14 LAI, Xin et al. Comprehensive assessment of carbon emissions and environmental impacts of sodium-ion batteries and lithium-ion batteries at the manufacturing stage. *Journal of Cleaner Production*, v. 423, p. 138674, 2023. ISSN 0959-6526. Disponível em: <<u>https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0959652623028329</u>>.

15 WESSEL, Jacob et al. Integrated material-energy-quality assessment for lithiumion battery cell manufacturing. *Procedia CIRP*, v. 98, p. 388–393, 2021. ISSN 2212-8271. The 28th CIRP Conference on Life Cycle Engineering, March 10 – 12, 2021, Jaipur, India. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/s2212827121001529>.

16 OU, Shiqi. Estimate long-term impact on battery degradation by considering electric vehicle real-world end-use factors. *Journal of Power Sources*, v. 573, p. 233133, 2023. ISSN 0378-7753. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378775323005086>.

17 LEE, Ungki; KANG, Namwoo; LEE, Yoon Koo. Shared autonomous electric vehicle system design and optimization under dynamic battery degradation considering varying load conditions. *Journal of Cleaner Production*, v. 423, p. 138795, 2023. ISSN 0959-6526. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0959652623029530>.

18 CHE, Yunhong et al. Predictive health assessment for lithium-ion batteries with probabilistic degradation prediction and accelerating aging detection. *Reliability Engineering & System Safety*, v. 241, p. 109603, 2024. ISSN 0951-8320. Disponível em: <<u>https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0951832023005173</u>>.

19 KUMAR, Madhav et al. Comprehensive review of electric vehicle technology and its impacts: Detailed investigation of charging infrastructure, power management, and control techniques. *Applied Sciences*, v. 13, n. 15, 2023. ISSN 2076-3417. Disponível em: https://www.mdpi.com/2076-3417/13/15/8919.

20 NAZARI, Fatemeh; MOHAMMADIAN, Abolfazl. Exploring the Role of Perceived Range Anxiety in Adoption Behavior of Plug-in Electric Vehicles. 2025. Disponível em: https://arxiv.org/abs/2308.10313>.

21 KUMAR, Rajeev Ranjan; CHAKRABORTY, Abhishek; MANDAL, Prasenjit. Promoting electric vehicle adoption: Who should invest in charging infrastructure? *Transportation Research Part E: Logistics and Transportation Review*, v. 149, p. 102295, 2021. ISSN 1366-5545. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1366554521000697>.

22 SHRESTHA, Sirapa et al. Measures to resolve range anxiety in electric vehicle users. International Journal of Low-Carbon Technologies, v. 17, p. 1186–1206, 11 2022. ISSN 1748-1317. Disponível em: https://doi.org/10.1093/ijlct/ctac100.

23 RAINIERI, Giuseppe; BUIZZA, Chiara; GHILARDI, Alberto. The psychological, human factors and socio-technical contribution: A systematic review towards range anxiety of battery electric vehicles' drivers. *Transportation Research Part F: Traffic Psychology and Behaviour*, v. 99, p. 52–70, 2023. ISSN 1369-8478. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1369847823002012>.

24 LIU, Xinglong et al. Comprehensive assessment for different ranges of battery electric vehicles: Is it necessary to develop an ultra-long range battery electric vehicle? *iScience*, v. 26, n. 6, p. 106654, 2023. ISSN 2589-0042. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2589004223007319.

25 PICATOSTE, Aitor; JUSTEL, Daniel; MENDOZA, Joan Manuel F. Circularity and life cycle environmental impact assessment of batteries for electric vehicles: Industrial challenges, best practices and research guidelines. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 169, p. 112941, 2022. ISSN 1364-0321. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S136403212200822X>.

26 LAI, Xin et al. Critical review of life cycle assessment of lithium-ion batteries for electric vehicles: A lifespan perspective. *eTransportation*, v. 12, p. 100169, 2022. ISSN 2590-1168. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2590116822000157.

27 ZHANG, Hongliang et al. Life cycle environmental impact assessment for batterypowered electric vehicles at the global and regional levels. *Scientific Reports*, v. 13, n. 1, p. 7952, 2023. ISSN 2045-2322. Disponível em: https://doi.org/10.1038/s41598-023-35150-3>.

28 FAN, Tao et al. Life cycle assessment of electric vehicles' lithium-ion batteries reused for energy storage. *Journal of Energy Storage*, v. 71, p. 108126, 2023. ISSN 2352-152X. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352152X23015232>.

29 EATY, Naga Durga Krishna Mohan; BAGADE, Priyanka. Digital twin for electric vehicle battery management with incremental learning. *Expert Systems with Applications*, v. 229, p. 120444, 2023. ISSN 0957-4174. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0957417423009466>.

30 NASERI, F. et al. Digital twin of electric vehicle battery systems: Comprehensive review of the use cases, requirements, and platforms. *Renewable and Sustainable Energy*

Reviews,v. 179, p. 113280, 2023. ISSN 1364-0321. Disponível em:
 < https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364032123001363>.

31 WANG, Yujie et al. Digital twin and cloud-side-end collaboration for intelligent battery management system. *Journal of Manufacturing Systems*, v. 62, p. 124–134, 2022. ISSN 0278-6125. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0278612521002284>.

32 WANG, Yujie; KANG, Xu; CHEN, Zonghai. A survey of digital twin techniques in smart manufacturing and management of energy applications. *Green Energy and Intelligent Transportation*, v. 1, n. 2, p. 100014, 2022. ISSN 2773-1537. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2773153722000147>.

33 SEMERARO, Concetta et al. Data-driven invariant modelling patterns for digital twin design. *Journal of Industrial Information Integration*, v. 31, p. 100424, 2023. ISSN 2452-414X. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/s2452414X22000917).

34 WANG, Wenwen et al. Application of digital twin in smart battery management systems. *Chinese Journal of Mechanical Engineering*, v. 34, n. 1, p. 57, 2021. ISSN 2192-8258. Disponível em: https://doi.org/10.1186/s10033-021-00577-0.

35 SEMERARO, Concetta et al. Digital twin in battery energy storage systems: Trends and gaps detection through association rule mining. *Energy*, v. 273, p. 127086, 2023. ISSN 0360-5442. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/s0360544223004802.

36 SEMERARO, Concetta et al. Guidelines for designing a digital twin for li-ion battery: A reference methodology. *Energy*, v. 284, p. 128699, 2023. ISSN 0360-5442. Disponível em: <<u>https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360544223020935</u>.

37 YUAN, Zhuchen et al. Fault data generation of lithium ion batteries based on digital twin: A case for internal short circuit. *Journal of Energy Storage*, v. 64, p. 107113, 2023. ISSN 2352-152X. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352152X23005108.

38 SCHMITT, Jakob; HORSTKÖTTER, Ivo; BäKER, Bernard. State-of-health estimation by virtual experiments using recurrent decoder-encoder based lithium-ion digital battery twins trained on unstructured battery data. *Journal of Energy Storage*, v. 58, p. 106335, 2023. ISSN 2352-152X. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352152X22023246>.

39 ALAMIN, Khaled Sidahmed Sidahmed et al. A machine learning-based digital twin for electric vehicle battery modeling. In: 2022 IEEE International Conference on Omnilayer Intelligent Systems (COINS). [s.n.], 2022. p. 1–6. Disponível em: https://doi.org/10.1109/COINS54846.2022.9854960>.

40 DINEVA, Adrienn. Evaluation of advances in battery health prediction for electric vehicles from traditional linear filters to latest machine learning approaches. *Batteries*,

v. 10, n. 10, 2024. ISSN 2313-0105. Disponível em
: $<\!https://www.mdpi.com/2313-0105/10/10/356\!>.$

41 HALIM, Ahmed Abd El Baset Abd El et al. Development of robust and accurate thermo-electrochemical models for lithium-ion batteries. *e-Prime - Advances in Electrical Engineering, Electronics and Energy*, v. 6, p. 100342, 2023. ISSN 2772-6711. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2772671123002371.

42 RENIERS, Jorn M.; HOWEY, David A. Digital twin of a mwh-scale grid battery system for efficiency and degradation analysis. *Applied Energy*, v. 336, p. 120774, 2023. ISSN 0306-2619. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0306261923001381.

43 BHATTI, Ghanishtha; MOHAN, Harshit; Raja Singh, R. Towards the future of smart electric vehicles: Digital twin technology. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 141, p. 110801, 2021. ISSN 1364-0321. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364032121000964>.

44 GENG, Jingxuan et al. Assessment of vehicle-side costs and profits of providing vehicle-to-grid services. *eTransportation*, p. 100303, 2023. ISSN 2590-1168. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2590116823000784>.

45 LEE, Sangyoon; CHOI, Dae-Hyun. Dynamic pricing and energy management for profit maximization in multiple smart electric vehicle charging stations: A privacy-preserving deep reinforcement learning approach. *Applied Energy*, v. 304, p. 117754, 2021. ISSN 0306-2619. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0306261921010977>.

46 CEDILLO, Mónica Hernández et al. Dynamic pricing and control for ev charging stations with solar generation. *Applied Energy*, v. 326, p. 119920, 2022. ISSN 0306-2619. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0306261922011771.

47 MEGHANA, Pulimamidi; YAMMANI, Chandrasekhar; SALKUTI, Surender Reddy. Blockchain technology based decentralized energy management in multi-microgrids including electric vehicles. *Journal of Intelligent & Fuzzy Systems*, IOS Press, v. 42, n. 2, p. 991–1002, 2022. ISSN 1875-8967. Disponível em: https://doi.org/10.3233/JIFS-189766>.

48 XIE, Jiahang et al. Dual digital twin: Cloud–edge collaboration with lyapunovbased incremental learning in ev batteries. *Applied Energy*, v. 355, p. 122237, 2024. ISSN 0306-2619. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S030626192301601X>.

49 YI, Yahui et al. Digital twin-long short-term memory (LSTM) neural network based real-time temperature prediction and degradation model analysis for lithium-ion battery. *Journal of Energy Storage*, v. 64, p. 107203, 2023. ISSN 2352-152X. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352152X2300600X>.

50 TANG, Hao et al. Design of power lithium battery management system based on digital twin. *Journal of Energy Storage*, v. 47, p. 103679, 2022. ISSN 2352-152X. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352152X21013542>.

51 WRIGHT, Louise; DAVIDSON, Stuart. How to tell the difference between a model and a digital twin. Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences, Springer, v. 7, n. 1, p. 13, 2020. ISSN 2213-7467. Disponível em: https://doi.org/10.1186/s40323-020-00147-4.

52 BHATTI, Ghanishtha; MOHAN, Harshit; Raja Singh, R. Towards the future of smart electric vehicles: Digital twin technology. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 141, p. 110801, 2021. ISSN 1364-0321. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364032121000964>.

53 BELINGARDI, Giovanni; SCATTINA, Alessandro. Battery pack and underbody: Integration in the structure design for battery electric vehicles—challenges and solutions. *Vehicles*, v. 5, n. 2, p. 498–514, 2023. ISSN 2624-8921. Disponível em: https://www.mdpi.com/2624-8921/5/2/28.

54 VEZA, Ibham et al. Electric vehicle (EV) and driving towards sustainability: Comparison between EV, HEV, PHEV, and ICE vehicles to achieve net zero emissions by 2050 from EV. *Alexandria Engineering Journal*, v. 82, p. 459–467, 2023. ISSN 1110-0168. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1110016823009055>.

55 MAJID, M.A.; J, Charles Rajesh Kumar; AHMED, Arbaz. Advances in electric vehicles for a self-reliant energy ecosystem and powering a sustainable future in india. *e-Prime - Advances in Electrical Engineering, Electronics and Energy*, v. 10, p. 100753, 2024. ISSN 2772-6711. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2772671124003334>.

56 NTOMBELA, Mlungisi; MUSASA, Kabeya; MOLOI, Katleho. A comprehensive review for Battery Electric Vehicles (BEV) drive circuits technology, operations, and challenges. *World Electric Vehicle Journal*, v. 14, n. 7, 2023. ISSN 2032-6653. Disponível em: https://www.mdpi.com/2032-6653/14/7/195>.

57 MAłEK, Arkadiusz; CABAN, Jacek; WOJCIECHOWSKI Łukasz. Charging electric cars as a way to increase the use of energy produced from RES. *Open Engineering*, v. 10, n. 1, p. 98–104, 2020. Disponível em: https://doi.org/10.1515/eng-2020-0009>.

58 SAE Electric Vehicle and Plug in Hybrid Electric Vehicle Conductive Charge Coupler. 2017. SAE International Standard. Disponível em: ">https://www.sae.org/standards/content/j1772_201710/>.

59 PRAMUANJAROENKIJ, Anchasa; KAKAç, Sadık. The fuel cell electric vehicles: The highlight review. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 48, n. 25, p. 9401–9425, 2023. ISSN 0360-3199. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319922053368>.

60 MAWUNTU, Nadya Novarizka et al. Modeling of the battery pack and battery management system towards an integrated electric vehicle application. *Energies*, v. 16, n. 20, 2023. ISSN 1996-1073. Disponível em: https://www.mdpi.com/1996-1073/16/20/7165.

61 LIN, Jiayuan et al. A review on recent progress, challenges and perspective of battery thermal management system. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 167, p. 120834, 2021. ISSN 0017-9310. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931020337728>.

62 SINGH, Abhishek; PAL, Kirti; VISHWAKARMA, C.B. State of charge estimation techniques of Li-ion battery of electric vehicles. *e-Prime - Advances in Electrical Engineering, Electronics and Energy*, v. 6, p. 100328, 2023. ISSN 2772-6711. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2772671123002231.

63 YU, Quanqing et al. State of health estimation method for lithium-ion batteries based on multiple dynamic operating conditions. *Journal of Power Sources*, v. 582, p. 233541, 2023. ISSN 0378-7753. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378775323009175>.

64 DIVYASHREE, S; MADHAVAN, Prassanna; RANJEEV, A. Battery management system integrated with CAN BUS safety control environment for electric vehicle. *Int J Eng Tech Res Technol*, v. 9, n. 9, 2020. Disponível em: https://doi.org/10.17577/IJERTV9IS090500>.

65 QU, X. et al. Lithium-ion battery performance degradation evaluation in dynamic operating conditions based on a digital twin model. *Microelectronics Reliability*, v. 114, p. 113857, 2020. ISSN 0026-2714. 31st European Symposium on Reliability of Electron Devices, Failure Physics and Analysis, ESREF 2020. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0026271420304765>.

66 BHOWMICK, Sharad. Tesla Model S battery system: An engineer's perspective. *Circuit Digest*, 2021. Acessado em: 2024-03-27. Disponível em: https://circuitdigest.com/article/tesla-model-s-battery-system-an-engineers-perspective>.

67 GREBTSOV, Dmitrii K. et al. Electric vehicle battery technologies: Chemistry, architectures, safety, and management systems. *World Electric Vehicle Journal*, v. 15, n. 12, 2024. ISSN 2032-6653. Disponível em: https://www.mdpi.com/2032-6653/15/12/568>.

68 BYD Company. BYD's Revolutionary Blade Battery: All You Need Know. 2023.Disponível em: <https://www.byd.com/eu/blog/ toBYDs-revolutionary-Blade-Battery-all-you-need-to-know>.

69 Contemporary Amperex Technology Co., Limited. *Innovative Technology*. Disponível em: <<u>https://www.catl.com/en/research/technology</u>/>.

70 PAMPEL, Florian; PISCHINGER, Stefan; TEUBER, Moritz. A systematic comparison of the packing density of battery cell-to-pack concepts at different degrees of implementation. *Results in Engineering*, v. 13, p. 100310, 2022. ISSN 2590-1230. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2590123021001110>.

72 WANG, Gongquan et al. Numerical investigation on thermal runaway propagation and prevention in cell-to-chassis lithium-ion battery system. *Applied Thermal Engineering*, v. 236, p. 121528, 2024. ISSN 1359-4311. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359431123015570>.

em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927796X24000275>.

73 XU, Jingjing et al. High-energy lithium-ion batteries: Recent progress and a promising future in applications. *ENERGY & ENVIRONMENTAL MATERIALS*, v. 6, n. 5, p. e12450, 2023. E12450 EEM-2022-0387.R1. Disponível em: https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/eem2.12450>.

74 AROTE, Sandeep A. Lithium-ion and Lithium–Sulfur Batteries. IOP Publishing, 2022. (2053-2563). ISBN 978-0-7503-4881-2. Disponível em: <https://dx.doi.org/10.1088/978-0-7503-4881-2>.

75 PLETT, Gregory L. Battery management systems, Volume I: Battery modeling. Norwood, MA: Artech House, 2015. v. 1.

76 FAN, Guodong et al. Nondestructive diagnostics and quantification of battery aging under different degradation paths. *Journal of Power Sources*, v. 557, p. 232555, 2023. ISSN 0378-7753. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/s0378775322015324>.

77 LIU, Yongtao et al. Review on degradation mechanism and health state estimation methods of lithium-ion batteries. *Journal of Traffic and Transportation Engineering (English Edition)*, v. 10, n. 4, p. 578–610, 2023. ISSN 2095-7564. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2095756423000818>.

78 FOTOUHI, Abbas et al. A review on electric vehicle battery modelling: From lithiumion toward lithium-sulphur. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 56, p. 1008– 1021, 2016. ISSN 1364-0321. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364032115013921.

79 LIU, Fang et al. A review of multi-state joint estimation for lithium-ion battery: Research status and suggestions. *Journal of Energy Storage*, v. 73, p. 109071, 2023. ISSN 2352-152X. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352152X23024696>.

80 HOU, Junjian et al. A review of critical state joint estimation methods of lithium-ion batteries in electric vehicles. *World Electric Vehicle Journal*, v. 13, n. 9, 2022. ISSN 2032-6653. Disponível em: https://www.mdpi.com/2032-6653/13/9/159>.

81 SMITH, Kandler; WANG, Chao-Yang. Solid-state diffusion limitations on pulse operation of a lithium ion cell for hybrid electric vehicles. *Journal of Power Sources*, v. 161, n. 1, p. 628–639, 2006. ISSN 0378-7753. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378775306006161.

82 ZHOU, Jiaping; XING, Bo; WANG, Chunyang. A review of lithium ion batteries electrochemical models for electric vehicles. *E3S Web of Conferences*, v. 185, p. 04001, 01 2020. Disponível em: https://doi.org/10.1051/e3sconf/202018504001.

83 DOYLE, Marc; FULLER, Thomas F.; NEWMAN, John. Modeling of galvanostatic charge and discharge of the lithium/polymer/insertion cell. *Journal of The Electrochemical Society*, The Electrochemical Society, Inc., v. 140, n. 6, p. 1526, jun 1993. Disponível em: <<u>https://dx.doi.org/10.1149/1.2221597</u>.

WEI, Zhongbao et al. Load current and state-of-charge coestimation for current sensorfree lithium-ion battery. *IEEE Transactions on Power Electronics*, v. 36, n. 10, p. 10970– 10975, 2021. Disponível em: <<u>https://doi.org/10.1109/TPEL.2021.3068725</u>>.

85 RAKHMATOV, Daler; VRUDHULA, Sarma. Energy management for batterypowered embedded systems. *ACM Transactions on Embedded Computing Systems*, Association for Computing Machinery, v. 2, n. 3, p. 277–324, ago. 2003. ISSN 1539-9087. Disponível em: https://doi.org/10.1145/860176.860179>.

86 RAKHMATOV, D.N.; VRUDHULA, S.B.K. An analytical high-level battery model for use in energy management of portable electronic systems. In: *IEEE/ACM International Conference on Computer Aided Design. ICCAD 2001. IEEE/ACM Digest of Technical Papers (Cat. No.01CH37281).* [s.n.], 2001. p. 488–493. Disponível em: https://doi.org/10.1109/ICCAD.2001.968687>.

87 TAVARES, Augusto HBM et al. A model for a lithium-polymer battery based on a lumped parameter representation of the charge diffusion. *Journal of Control, Automation and Electrical Systems*, Springer, p. 1–14, 2024. Disponível em: https://doi.org/10.1007/s40313-024-01081-1.

88 YU, Quan-Qing et al. A comparative study on open circuit voltage models for lithiumion batteries. *Chinese Journal of Mechanical Engineering*, v. 31, n. 1, p. 65, 2018. ISSN 2192-8258. Disponível em: https://doi.org/10.1186/s10033-018-0268-8>.

89 YU, Peng et al. Study of hysteresis voltage state dependence in lithium-ion battery and a novel asymmetric hysteresis modeling. *Journal of Energy Storage*, v. 51, p. 104492, 2022. ISSN 2352-152X. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352152X22005138.

90 ALIPOUR, Mohammad et al. A review on temperature-dependent electrochemical properties, aging, and performance of lithium-ion cells. *Batteries*, v. 6, n. 3, 2020. ISSN 2313-0105. Disponível em: https://www.mdpi.com/2313-0105/6/3/35.

91 LIN, Xinfan et al. Online parameterization of lumped thermal dynamics in cylindrical lithium ion batteries for core temperature estimation and health monitoring. *IEEE Transactions on Control Systems Technology*, v. 21, n. 5, p. 1745–1755, 2013. Disponível em: https://doi.org/10.1109/TCST.2012.2217143>.

92 SUGANYA, R.; JOSEPH, L.M.I. Leo; KOLLEM, Sreedhar. Understanding lithiumion battery management systems in electric vehicles: Environmental and health impacts, comparative study, and future trends: A review. *Results in Engineering*, v. 24, p. 103047, 2024. ISSN 2590-1230. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2590123024013021.

93 PANG, Hui et al. A novel extended kalman filter-based battery internal and surface temperature estimation based on an improved electro-thermal model. *Journal of Energy Storage*, v. 41, p. 102854, 2021. ISSN 2352-152X. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352152X21005776>.

94 DAI, Haifeng et al. Adaptive kalman filtering based internal temperature estimation with an equivalent electrical network thermal model for hard-cased batteries. *Journal of Power Sources*, v. 293, p. 351–365, 2015. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2015.05.087>.

95 BERNARDI, Domenick; PAWLIKOWSKI, Edward; NEWMAN, John. A general energy balance for battery systems. *Journal of the Electrochemical Society*, v. 132, n. 1, p. 5–12, 1985. Disponível em: https://doi.org/10.1149/1.2113792>.

96 CAI, Ming; CHEN, Weijie; TAN, Xiaojun. Battery state-of-charge estimation based on a dual unscented kalman filter and fractional variable-order model. *Energies*, v. 10, n. 10, 2017. ISSN 1996-1073. Disponível em: https://www.mdpi.com/1996-1073/10/10/1577.

97 ZHANG, Jian et al. New energy vehicle battery soc evaluation method based on robust extended kalman filterd. *Journal of Physics: Conference Series*, IOP Publishing, v. 2196, n. 1, p. 012037, feb 2022. Disponível em: https://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/2196/1/012037>.

98 DU, Jianhua et al. Estimation of battery state of charge based on changing window adaptive extended kalman filtering. *Journal of Energy Storage*, v. 103, p. 114325, 2024. ISSN 2352-152X. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.est.2024.114325>.

99 BECKER, Alex. Kalman Filter from the Ground Up. Alex Becker, 2023. ISBN 978-965-598-439-2. Disponível em: https://www.kalmanfilter.net/book.html.

100 ZARCHAN, Paul; MUSOFF, Howard; LU, Frank K. Fundamentals of Kalman Filtering: A Practical Approach. Reston, VA, USA: American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2009. v. 232. (Progress in Astronautics and Aeronautics, v. 232). ISBN 978-1-60086-718-7. Disponível em: https://doi.org/10.2514/4.867200>.

101 National Renewable Energy Laboratory. *FASTSim Documentation: Future Automotive Systems Technology Simulator*. Golden, CO, USA, 2021. Disponível em: <<u>https://nrel.github.io/fastsim/></u>.

102 BROOKER, Aaron et al. Fastsim: A model to estimate vehicle efficiency, cost and performance. In: *SAE 2015 World Congress Exhibition*. SAE International, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.4271/2015-01-0973>.

103 SULZER, Valentin et al. Python Battery Mathematical Modelling (PyBaMM). *Journal of Open Research Software*, Jun 2021. Disponível em: https://doi.org/10.5334/jors.309>.

104 O'KANE, Simon E. J. et al. Lithium-ion battery degradation: how to model it. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, v. 24, p. 7909–7922, 2022. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1039/D2CP00417H>.

105 CHEN, Chang-Hui et al. Development of experimental techniques for parameterization of multi-scale lithium-ion battery models. Journal of the Electrochemical Society, v. 167, n. 8, p. 080534,jan 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1149/1945-7111/ab9050>.

106 O'KANE, Simon E. J. et al. Physical origin of the differential voltage minimum associated with lithium plating in li-ion batteries. *Journal of The Electrochemical Society*, IOP Publishing, v. 167, n. 9, p. 090540, may 2020. Disponível em: https://dx.doi.org/10.1149/1945-7111/ab90ac>.

107 TEAM, PyBaMM. Parameter Sets — PyBaMM Documentation. 2025. Disponível em: <https://docs.pybamm.org/en/stable/source/api/parameters/parameter_sets.html>. Acesso em: 30 de nov. de 2023.

108 O'KANE, Simon E. J. et al. *Lithium-ion battery degradation: how to model it -Supplementary Information.* 2022. Disponível em: https://www.rsc.org/suppdata/d2/cp/d2cp00417h1.pdf>.

109 SZYBIST, James P. et al. What fuel properties enable higher thermal efficiency in spark-ignited engines? *Prog. Energy Combust. Sci.*, v. 82, p. 100876, 2021. ISSN 0360-1285. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.pecs.2020.100876>.

110 XU, Bin; ARJMANDZADEH, Ziba. Parametric study on thermal management system for the range of full (tesla model s)/ compact-size (tesla model 3) electric vehicles. *Energy Convers. Manag.*, v. 278, p. 116753, 2023. ISSN 0196-8904. Disponível em: <<u>https://doi.org/10.1016/j.enconman.2023.116753</u>.

111 ZAFAR, Muhammad Hamza et al. A novel hybrid deep learning model for accurate state of charge estimation of li-ion batteries for electric vehicles under high and low temperature. *Energy*, v. 292, p. 130584, 2024. ISSN 0360-5442. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.energy.2024.130584>.

112 UDDIN, Kotub et al. The effects of high frequency current ripple on electric vehicle battery performance. *Applied Energy*, v. 178, 2016. ISSN 0306-2619. Disponível em: <<u>https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2016.06.033</u>>.

113 MANDRIOLI, Riccardo et al. Phase and neutral current ripple analysis in three-phase four-wire split-capacitor grid converter for ev chargers. *Electronics*, v. 10, n. 9, 2021. ISSN 2079-9292. Disponível em: https://doi.org/10.3390/electronics10091016>.

114 AMAMRA, Sid-Ali et al. Electric vehicle battery performance investigation based on real world current harmonics. *Energies*, v. 13, n. 2, 2020. ISSN 1996-1073. Disponível em: <<u>https://doi.org/10.3390/en13020489</u>>.

115 GOLDAMMER, Erik et al. The impact of an overlaid ripple current on battery aging: The development of the sicwell dataset. *Batteries*, v. 8, n. 2, 2022. ISSN 2313-0105. Disponível em: https://doi.org/10.3390/batteries8020011.

116 LELIE, Markus et al. Battery management system hardware concepts: An overview. *Applied Sciences*, v. 8, n. 4, 2018. ISSN 2076-3417. Disponível em: https://doi.org/10.3390/app8040534>.

117 WEI, Zhongbao et al. Future smart battery and management: Advanced sensing from external to embedded multi-dimensional measurement. *Journal of Power Sources*, v. 489, p. 229462, 2021. ISSN 0378-7753. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.jpowsour. 2021.229462>.

118 HAUSER, A.; KUHN, R. 11 - High-voltage battery management systems (BMS) for electric vehicles. In: SCROSATI, Bruno; GARCHE, Jürgen; TILLMETZ, Werner (Ed.). Advances in Battery Technologies for Electric Vehicles. Woodhead Publishing, 2015, (Woodhead Publishing Series in Energy). p. 265–282. ISBN 978-1-78242-377-5. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B978178242377500011X>.

119 OLIVEIRA, Sávio A et al. State of charge estimators for lithium-ion batteries based on a comparative study of extended kalman filter. In: *Proceedings of the 2024 Brazilian Automation Conference (CBA)*. [s.n.], 2024. Disponível em: https://www.sba.org.br/ cba2024/papers/paper_1031.pdf>.

120 LG Chem. Lithium Ion INR21700 M50, LG Chem Product Specification Datasheet. 2020. Disponível em: https://www.dnkpower.com. Acesso em: 30 de nov. de 2023.

121 MITCHELL, Melanie. An Introduction to Genetic Algorithms. The MIT Press, 1996. ISBN 9780262280013. Disponível em: https://doi.org/10.7551/mitpress/3927.001. 0001>.

122 FORTIN, Félix-Antoine et al. DEAP: Evolutionary algorithms made easy. *Journal of Machine Learning Research*, v. 13, p. 2171–2175, jul 2012. Disponível em: https://www.jmlr.org/papers/v13/fortin12a.html.

123 ZATTA, Nicola et al. Holistic testing and characterization of commercial 18650 lithium-ion cells. *Batteries*, v. 10, n. 7, p. 248, 2024. Disponível em: https://doi.org/10.3390/batteries10070248>.

124 EKSTRöM, Henrik; FRIDHOLM, Björn; LINDBERGH, Göran. Comparison of lumped diffusion models for voltage prediction of a lithium-ion battery cell during dynamic loads. *Journal of Power Sources*, v. 402, p. 296–300, 2018. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2018.09.020>.

125 SKUZA, A; JURECKI, R S. Analysis of factors affecting the energy consumption of an ev vehicle - a literature study. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, v. 1247, n. 1, p. 012001, 2022. Disponível em: https://doi.org/10.1088/1757-899x/1247/1/012001>.

126 CALEARO, Lisa et al. Agnostic battery management system capacity estimation for electric vehicles. *Energies*, v. 15, p. 9656, 12 2022. Disponível em: https://doi.org/10.3390/en15249656>.

127 SUN, Zhicheng et al. Real-world driving cycles adaptability of electric vehicles. *World Electric Vehicle Journal*, v. 11, n. 1, 2020. ISSN 2032-6653. Disponível em: <https://www.mdpi.com/2032-6653/11/1/19>.

128 MAO, Lang et al. A multi-mode electric vehicle range estimator based on driving pattern recognition. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science*, v. 236, n. 6, p. 2677–2697, 2022. Disponível em: https://doi.org/10.1177/09544062211032994>.

Anexo A — Tradução parcial do material suplementar de O'Kane et al. (2022)

Tradução livre de parte do material suplementar associado ao artigo: O'Kane, S. E. J. et al. Lithium-ion battery degradation: how to model it. Physical Chemistry Chemical Physics, v. 24, p. 7909–7922, 2022. Material suplementar original disponível em: https://www.rsc.org/suppdata/d2/cp/d2cp00417h/d2cp00417h1.pdf>.

Equações do modelo DFN

As equações básicas do modelo Doyle–Fuller–Newman (DFN) são apresentadas na Tabela S1. A notação é idêntica à utilizada por O'Kane (2020) et al. ^[1], com duas modificações: (i) o termo $N_{\rm sr}$ agora representa reações secundárias em geral, em vez de apenas deposição de lítio metálico, e (ii) a queda de potencial $\eta_{\rm SEI}$, associada à resistência da camada SEI, foi adicionada à equação de Butler–Volmer.

Parâmetros dos eletrodos

As curvas de potencial de circuito aberto $U_{\pm}(c_s^*)$ foram medidas por Chen et al. $(2020)^{[2]}$ a 25 °C. Para ambos os eletrodos, utilizaram-se medições em célula de três eletrodos. No eletrodo negativo de grafite+SiO_x, observou-se histerese significativa; assim, o ramo de descarga do potencial de circuito aberto é usado no modelo, conforme adotado no modelo

Variável	Equação
$\phi_{\rm s}(x,t)$	$\sigma_{\pm} \frac{\partial^2 \phi_{\rm s}}{\partial x^2} = j_{\rm tot}$
$\phi_{\rm e}(x,t)$	$-\kappa_{\rm eff}(c_{\rm e},T)\frac{\partial^2 \phi_{\rm e}}{\partial x^2} + \frac{2RT}{F}\kappa_{\rm eff}(c_{\rm e},T)(1-t^+)\frac{\partial^2 \ln c_{\rm e}}{\partial x^2} = j_{\rm tot}$
$c_{\rm e}(x,t)$	$\frac{\partial(\epsilon c_{\rm e})}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \Big(D_{\rm eff}(c_{\rm e},T) \frac{\partial c_{\rm e}}{\partial x} \Big) + \Big(\frac{1-t^+}{F}\Big) j_{\rm tot}$
$c_{\mathrm{a}}(x,r,t)$	$\frac{\partial c_{\mathbf{a}}}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \Big(D_{\pm}(T) r^2 \frac{\partial c_{\mathbf{a}}}{\partial r} \Big)$
$c_{\rm s}(x,t)$	$\frac{\partial c_{\rm s}}{\partial r} = -\frac{N_{\rm int}}{D_{\pm}(T)}$
$j_{ m tot}$	$j_{\rm tot} = F a_{\pm} \left(N_{\rm int} + \sum N_{\rm sr} \right)$
N_{int}	$N_{\rm int} = 2k_{\pm}(T) \sqrt{\frac{c_{\rm e}}{c_{\rm eq}}(c_{\rm m\pm} - c_{\rm s})c_{\rm s}} \sinh\!\left(\frac{F\eta}{2RT}\right)$
η	$\eta = \phi_{\rm s} - \phi_{\rm e} - U_{\pm}(c_{\rm s}) - \eta_{\rm SEI}$

Tabela S1: Equações do modelo Doyle–Fuller–Newman (DFN).

PyBaMM de Chen et al. (2020).

Os demais parâmetros dos eletrodos foram obtidos das Tabelas VII e IX de Chen et al. (2020) ^[2] e estão apresentados na Tabela S2. Os coeficientes de difusão em fase sólida D_{\pm} requerem atenção especial, pois O'Kane et al. (2020) ^[1] identificaram D_{-} como um parâmetro crítico para a deposição e remoção de lítio. Chen et al. (2020) ^[2] realizaram medições detalhadas de D_{\pm} em função da concentração de Li⁺, mas essas dependências não foram implementadas no PyBaMM. Em vez disso, a difusividade do eletrodo negativo D_{-} é tratada apenas como função da temperatura.

Os parâmetros dependentes da temperatura $D_{\pm}(c_{\rm a}^*,T)$ e $k_{\pm}(T)$ seguem uma dependência de Arrhenius:

$$D_{\pm}(T) = D_{\pm}(T_{\rm med}) \exp\left(\frac{E_{D\pm}}{RT_{\rm med}} - \frac{E_{D\pm}}{RT}\right),\tag{S1}$$

$$k_{\pm}(T) = k_{\pm}(T_{\text{med}}) \exp\left(\frac{E_{k\pm}}{RT_{\text{med}}} - \frac{E_{k\pm}}{RT}\right),\tag{S2}$$

onde $E_{D\pm}$ e $E_{k\pm}$ são energias de ativação e T_{med} é a temperatura na qual as medições detalhadas foram realizadas, neste caso, 298,15 K (25 °C).
No entanto, Chen et al. (2020) ^[2] não relataram dados de difusividade dependentes da temperatura. Para o eletrodo negativo, assume-se uma dependência de Arrhenius com energia de ativação de 30 300 J mol⁻¹, conforme Ecker et al. (2015) ^[3], valor consistente com outras referências ^[4,5]. Para o eletrodo positivo (NMC 811), não há dados disponíveis, mas Cabañero et al. (2018) ^[6] reportaram uma energia de ativação de 25 000 J mol⁻¹ para o material NCA, que é semelhante, sendo este valor adotado.

Tabela S2: Parâmetros dos eletrodos no início de vida. Todos os valores foram extraídos das Tabelas VII e IX de Chen et al. (2020)^[2], salvo indicação contrária.

Símbolo	Definição	Eletrodo –	Eletrodo +
A	Área superficial planar (m^2)	$0,\!1027$	0,1027
a_{\pm}	${ m \acute{A}rea/volume}~({ m m}^{-1})$	$3,\!84 \times 10^5$	$3,\!82 imes 10^5$
$c_{\rm m\pm}$	Concentração máx. Li $^+$ (mol m $^{-3}$)	$33\ 133$	63 104
$c_{0\pm}$	Concentração inicial Li ⁺ (mol m ⁻³)	29 866	$17 \ 038$
D_{\pm}	Coeficiente de difusão de Li ⁺ a 25 °C (m² s ⁻¹)	$3,3 \times 10^{-14}$	4×10^{-15}
$E_{D\pm}$	Energia de ativação para difusão de Li^+ (J ${\rm mol^{-1}})$	30 300 ^[3]	$25 000^{[6]}$
$E_{k\pm}$	Energia de ativação para constante de taxa (J mol ⁻¹)	35000	17 800
k_{\pm}	Constante de (des)intercalação a 25 °C (m s ⁻¹)	$2{,}12\times10^{-10}$	$1{,}12\times10^{-9}$
r_{\pm}	Raio da partícula do eletrodo (m)	$5,\!86 imes10^{-6}$	$5,\!22 \times 10^{-6}$
δ_{\pm}	Espessura do eletrodo (m)	$8{,}52\times10^{-5}$	$7{,}56\times10^{-5}$
$\epsilon_{ m e}$	Fração volumétrica do eletrólito	$0,\!25$	$0,\!335$
ϵ_{a}	Fração volumétrica do material ativo	0,75	$0,\!665$
σ_{\pm}	Condutividade do eletrodo (S m^{-1})	215	$0,\!18$

Parâmetros do eletrólito

A condutividade efetiva $\kappa_{\text{eff}}(c_{\text{e}},T)$ e o coeficiente de difusão efetivo $D_{\text{eff}}(c_{\text{e}},T)$ do eletrólito, considerando a fração volumétrica ϵ_{e} , relacionam-se aos valores em eletrólito puro $\kappa(c_{\text{e}},T)$ e $D_{\text{e}}(c_{\text{e}},T)$ por:

$$\kappa_{\rm eff}(c_{\rm e},T) = \epsilon_{\rm e}^{1,5} \kappa(c_{\rm e},T), \quad D_{\rm eff}(c_{\rm e},T) = \epsilon_{\rm e}^{1,5} D_{\rm e}(c_{\rm e},T).$$
(S3)

Ambos $\kappa(c_{\rm e},T)$ e $D_{\rm e}(c_{\rm e},T)$ apresentam dependência de Arrhenius:

$$\kappa(c_{\rm e},T) = \kappa(c_{\rm e},T_{\rm med}) \exp\left(\frac{E_{\kappa}}{RT_{\rm med}} - \frac{E_{\kappa}}{RT}\right),\tag{S4}$$

$$D_{\rm e}(c_{\rm e},T) = D_{\rm e}(c_{\rm e},T_{\rm med}) \exp\left(\frac{E_{\kappa}}{RT_{\rm med}} - \frac{E_{\kappa}}{RT}\right),\tag{S5}$$

onde E_{κ} é a energia de ativação para κ e $D_{\rm e}$, e $T_{\rm med}$ é a temperatura de referência das medições detalhadas (neste caso, 298,15 K). A condutividade $\kappa(c_{\rm e}, T_{\rm ref})$ é descrita por um polinômio cúbico ^[2]:

$$\kappa(c_{\rm e}, T_{\rm ref}) = 1,297 \times 10^{-10} c_{\rm e}^3 - 7,94 \times 10^{-5} c_{\rm e}^{1,5} + 3,329 \times 10^{-3} c_{\rm e},\tag{S6}$$

e o coeficiente de difusão $D_{\rm e}(c_{\rm e},T_{\rm ref})$ por um polinômio quadrático^[2]:

$$D_{\rm e}(c_{\rm e}, T_{\rm ref}) = 8,794 \times 10^{-17} c_{\rm e}^2 - 3,972 \times 10^{-13} c_{\rm e} + 4,862 \times 10^{-10}.$$
 (S7)

Nas equações (S6) e (S7), κ tem unidades de S m⁻¹, $D_{\rm e}(c_{\rm e},T)$ tem unidades de m² s⁻¹ e $c_{\rm e}$ tem unidades de mol m⁻³. Os demais parâmetros foram extraídos da Tabela VII de Chen et al. (2020) ^[2] e estão listados na Tabela S3.

Tabela S3: Outros parâmetros utilizados no modelo. Todos os valores foram extraídos de Chen et al.^[2], salvo indicação contrária.

Símbolo	Definição	Valor
$c_{ m eq}$	Concentração de Li ⁺ em equilíbrio no eletrólito (mol ${\rm m}^{-3})$	1000
E_{κ}	Energia de ativação para condutividade do eletrólito (J $\mathrm{mol}^{\text{-}1})$	17 100 ^[3]
F	Constante de Faraday (C mol^{-1})	96 485
$Q_{ m nom}$	Capacidade nominal (mAh)	5000
R	Constante universal dos gases $(J \text{ K}^{-1} \text{ mol}^{-1})$	8,314
t^+	Número de transporte de Li^+	0,2594
V_{\max}	Tensão limite superior (V)	4,2
V_{\min}	Tensão limite inferior (V)	$2,\!5$
$\delta_{ m s}$	Espessura do separador (m)	$1,\!2\!\times\!10^{-5}$
$\epsilon_{ m e}$	Porosidade do separador	$0,\!47$

Parâmetros de degradação

Os parâmetros relacionados à degradação da bateria não foram medidos por Chen et al. (2020)^[2]. Os parâmetros de degradação padrão do PyBaMM foram obtidos de diversas fontes e estão listados na Tabela S4. Alguns parâmetros de degradação foram variados em estudos paramétricos, e seus valores padrão são apresentados na Tabela S5, exceto nos estudos onde esses parâmetros foram alterados.

Modelo de crescimento de SEI em duas camadas (limitado por difusão)

Nos modelos de SEI com duas camadas, a espessura total do SEI L_{SEI} é dividida em duas espessuras: L_{inner} (camada interna) e L_{outer} (camada externa). Assume-se que o solvente difunde apenas pela camada externa, de modo que as condições de contorno para a concentração de solvente c_{sol} são:

$$N_{\rm sol} = -D_{\rm sol}(T) \frac{\partial c_{\rm sol}}{\partial l},\tag{S8}$$

$$c_{\rm sol} = 0 \quad \text{em} \quad l = L_{\rm inner},\tag{S9}$$

$$c_{\rm sol} = c_{\rm sol,0} \quad \text{em} \quad l = L_{\rm outer}.$$
 (S10)

A solução é:

$$c_{\rm sol} = \frac{lc_{\rm sol,0}}{L_{\rm outer}},\tag{S11}$$

$$N_{\rm sol} = -\frac{c_{\rm sol,0} D_{\rm sol}(T)}{L_{\rm outer}},\tag{S12}$$

$$N_{\text{inner}} = -\frac{1}{2}N_{\text{sol}} = \frac{c_{\text{sol},0}D_{\text{sol}}(T)}{L_{\text{outer}}},\tag{S13}$$

$$N_{\text{outer}} = -\frac{1}{2}N_{\text{sol}} = \frac{c_{\text{sol},0}D_{\text{sol}}(T)}{L_{\text{outer}}},$$
(S14)

assumindo que as duas camadas crescem na mesma taxa. São necessárias duas equações diferenciais, uma para cada camada:

$$\frac{\partial L_{\text{inner}}}{\partial t} = -\frac{1}{4} N_{\text{sol}} \bar{V}_{\text{SEI}} = \frac{c_{\text{sol},0} D_{\text{sol}}(T) \bar{V}_{\text{SEI}}}{4L_{\text{outer}}},\tag{S15}$$

$$\frac{\partial L_{\text{outer}}}{\partial t} = -\frac{1}{4} N_{\text{sol}} \bar{V}_{\text{SEI}} = \frac{c_{\text{sol},0} D_{\text{sol}}(T) \bar{V}_{\text{SEI}}}{4L_{\text{outer}}}.$$
(S16)

Em todas as outras equações, L_{SEI} pode ser substituído por $L_{\text{inner}} + L_{\text{outer}}$. Por exemplo:

$$\eta_{\rm SEI} = \rho_{\rm SEI} (L_{\rm inner} + L_{\rm outer}) \frac{j_{\rm tot}}{a_-}.$$
 (S17)

121

		Eletrodo Negativo		Eletrodo Positivo	
Símbolo	Definição	Valor	Ref.	Valor	Ref.
$c_{\rm sol,0}$	Concentração de solvente em massa $(mol m^{-3})$	2636	[7]		
$\bar{V}_{ m SEI}$	Volume molar parcial do SEI $(m^3 mol^{-1})$	$9{,}585\times10^{-5}$	[8]		
$ ho_{ m SEI}$	Resistividade do SEI (Ωm)	2×10^5	[8]		
$L_{\rm SEI,0}$	Espessura inicial do SEI (m)	5×10^{-9}	[8]		
$E_{\rm sol}$	Energia de ativação para difusão de solvente (J mol ⁻¹)	37 000	[9]		
$lpha_{ m a,Li}$	Coeficiente de transferência anódico para remoção de lítio	0,35	Assumido		
$\alpha_{ m c,Li}$	Coeficiente de transferência catódico para deposição de lítio	0,65	Assumido		
E	Módulo de Young (Pa)	1.5×10^{10}	[10]	$3,75 \times 10^{11}$	[10]
ν	Razão de Poisson	0,3	[10]	0,2	[10]
Ω	Volume molar parcial $(m^3 mol^{-1})$	$3,1 \times 10^{-6}$	[10]	$1,25 \times 10^{-5}$	[11]
$l_{ m cr,0}$	Comprimento inicial da fratura (m)	2×10^{-5}	[12]	2×10^{-5}	[12]
$w_{ m cr}$	Largura inicial da fratura (m)	$1{,}5\times10^{-5}$	[12]	$1,5 \times 10^{-5}$	[12]
$ ho_{ m cr}$	Número de fraturas por unidade de área (m^{-2})	$3,\!18 imes 10^{15}$	[12]	$3,\!18 imes 10^{15}$	[12]
$b_{ m cr}$	Fator de correção da intensidade de tensão	1,12	[12]	1,12	[12]
$m_{ m cr}$	Termo exponencial da lei de Paris	2,2	[12]	2,2	[12]
$\sigma_{ m c}$	Tensão crítica para fratura da partícula (Pa)	6×10^7	Assumido	$3,75 imes 10^8$	Assumido
m_2	Termo exponencial para perda de material ativo	2	Assumido	2	Assumido

Tabela S4: Parâmetros de degradação utilizados no modelo, exceto aqueles variados nos estudos paramétricos (Tabela S5).

Tabela S5: Parâmetros de degradação variados nos estudos paramétricos, com seus valores padrão.

	Eletrodo Negativo		Eletrodo Positivo	
Definição	Valor Padrão	Ref.	Valor Padrão	Ref.
Difusividade do solvente no SEI (m ² s ⁻¹)	$2,5 \times 10^{-22}$	[13]		
Constante de taxa de deposição/remoção de lítio (m s ⁻¹)	10^{-9}	Assumido		
Constante de taxa para formação de lítio morto (s^{-1})	10^{-6}	Assumido		
Taxa de fratura da lei de Paris	$3,9 \times 10^{-20}$	[12]	$3,9 \times 10^{-20}$	[12]
Termo proporcional para perda de material ativo	0,001	Assumido	0,001	Assumido
	Definição Difusividade do solvente no SEI (m ² s ⁻¹) Constante de taxa de deposição/remoção de lítio (m s ⁻¹) Constante de taxa para formação de lítio morto (s ⁻¹) Taxa de fratura da lei de Paris Termo proporcional para perda de material ativo	Eletrodo NDefiniçãoValor PadrãoDifusividade do solvente no SEI (m² s⁻¹) $2,5 \times 10^{-22}$ Constante de taxa de deposição/remoção de lítio (m s⁻¹) 10^{-9} Constante de taxa para formação de lítio morto (s⁻¹) 10^{-6} Taxa de fratura da lei de Paris $3,9 \times 10^{-20}$ Termo proporcional para perda de material ativo $0,001$	Eletrodo NegativoDefiniçãoValor PadrãoRef.Difusividade do solvente no SEI (m² s⁻¹) $2,5 \times 10^{-22}$ [13]Constante de taxa de deposição/remoção de lítio (m s⁻¹) 10^{-9} AssumidoConstante de taxa 10^{-6} AssumidoConstante de taxa 10^{-6} [12]Taxa de fratura da lei de Paris $3,9 \times 10^{-20}$ [12]Termo proporcional para perda de material ativo $0,001$ Assumido	Eletrodo NegativoEletrodo HDefiniçãoValor PadrãoRef.Valor PadrãoDifusividade do solvente no SEI (m² s⁻¹) $2,5 \times 10^{-22}$ [13]-Constante de taxa de deposição/remoção de lítio (m s⁻¹) 10^{-9} Assumido-Constante de taxa 10^{-6} AssumidoTaxa de fratura da lei de Paris $3,9 \times 10^{-20}$ [12] $3,9 \times 10^{-20}$ Termo proporcional para perda de material ativo $0,001$ Assumido $0,001$

Referências bibliográficas

1 O'KANE, Simon E. J. et al. Physical origin of the differential voltage minimum associated with lithium plating in li-ion batteries. *Journal of The Electrochemical Society*, v. 167, n. 9, p. 090540, 2020.

2 CHEN, Chang-Hui et al. Development of experimental techniques for parameterization of multi-scale lithium-ion battery models. *Journal of The Electrochemical Society*, v. 167, n. 8, p. 080534, 2020.

3 ECKER, Madeleine et al. Parameterization of a physico-chemical model of a lithium-ion battery. *Journal of The Electrochemical Society*, v. 162, n. 9, p. A1849–A1857, 2015.

4 KULOVA, T. L. et al. Temperature effect on the lithium diffusion rate in graphite. *Russian Journal of Electrochemistry*, v. 42, n. 3, p. 259–262, 2006.

5 SCHMALSTIEG, Johannes et al. Full cell parameterization of a high-power lithium-ion battery for a physico-chemical model: Part i. physical and electrochemical parameters. *Journal of The Electrochemical Society*, v. 165, n. 16, p. A3799–A3810, 2018.

6 CABANERO, Maria Angeles et al. Direct determination of diffusion coefficients in commercial li-ion batteries. *Journal of The Electrochemical Society*, v. 165, n. 5, p. A847–A855, 2018.

7 PLOEHN, Harry J.; RAMADASS, Premanand; WHITE, Ralph E. Solvent diffusion model for aging of lithium-ion battery cells. *Journal of The Electrochemical Society*, v. 151, n. 3, p. A456, 2004.

8 SAFARI, M. et al. Multimodal physics-based aging model for life prediction of li-ion batteries. *Journal of The Electrochemical Society*, v. 156, n. 3, p. A145, 2009.

9 WALDMANN, Thomas et al. Temperature dependent ageing mechanisms in lithium-ion batteries – a post-mortem study. *Journal of Power Sources*, v. 262, p. 129–135, 2014.

10 AI, Weilong et al. Electrochemical thermal-mechanical modelling of stress inhomogeneity in lithium-ion pouch cells. *Journal of The Electrochemical Society*, v. 167, n. 1, p. 013512, 2020.

11 XU, Rong et al. Heterogeneous damage in li-ion batteries: Experimental analysis and theoretical modeling. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, v. 129, p. 160–183, 2019.

12 PUREWAL, Justin et al. Degradation of lithium ion batteries employing graphite negatives and nickel-cobalt-manganese oxide + spinel manganese oxide positives: Part 2, chemical-mechanical degradation model. *Journal of Power Sources*, v. 272, p. 1154–1161, 2014.

13 SINGLE, Fabian; LATZ, Arnulf; HORSTMANN, Birger. Identifying the mechanism of continued growth of the solid–electrolyte interphase. *ChemSusChem*, v. 11, n. 12, p. 1950–1955, 2018.