Offre de stage : Estimation des intervalles de confiance d'un modèle de vieillissement des batteries Li-on.

Université Paris-Saclay, CentraleSupélec (Gif-sur-Yvette, France). En partenariat avec SAFT (Bordeaux, France).

December 7, 2022

# 1 Contexte et description

La demande économique mondiale en accumulateurs électrochimiques est de plus en plus importante de nos jours. Cet essor est principalement dû à l'émergence des véhicules hybrides et électriques (Hybrid-Electric Vehicle, Plug-in Hybrid Electric Vehicle et Battery-Electric Vehicle) d'une part, et au marché de stockage de l'énergie en lien avec les énergies renouvelables et la gestion des réseaux électriques d'autre part. SAFT est particulièrement présent dans ce contexte en tant que précurseur du déploiement de batteries lithium. SAFT produit entre autres, des batteries lithium-ion à Poitiers, Nersac et Bordeaux.

Les batteries électrochimiques sont omniprésentes dans notre quotidien, que ce soit dans nos ordinateurs que nos téléphones portables. Parmi les différentes technologies disponibles, les accumulateurs lithium-ion offrent de nombreux avantages, en termes notamment d'énergie massique, de puissance massique et de leur faible auto-décharge. Ils ne présentent en outre pas d'effet mémoire. En contrepartie, ce type de batteries nécessite un système de gestion (BMS) pour des raisons de sécurité, mais également pour prévenir tout vieillissement prématuré. Afin de prédire la durée de vie des batteries, des modèles semi-empiriques ont été développés au cours de la dernière décennie [Mingant et al., 2021] [Redondo-Iglesias et al., 2017]. Ce type de modèles est basé sur des équations simplifiées décrivant des phénomènes physiques (loi d'Arrhenius, loi en racine carrée ou puissance par rapport au temps, etc.). Leur paramétrage fait appel à l'ajustement (ou « fitting ») de modèles sur des données expérimentales de tests de vieillissement accélérés réalisés en laboratoire. L'un des modèles d'intéret [Redondo-Iglesias et al., 2017] est formalisé comme suit :

$$Q_{loss}(t, SOC, T) := A_0 \times e^{-\frac{E_{a0} + c_S \times SOC}{k \times T}} t^Z$$
(1)

où,  $Q_{loss}$  est la perte de capacité en vieillissement calendaire, t le temps, SOC l'état de charge de la batterie, T la température de la batterie, k la constante de Boltzmann, et enfin  $A_0$ ,  $E_{a0}$ ,  $c_S$ , et Z sont des paramètres constants. Ces modèles semi-empiriques sont utilisés de deux manières :

- Estimation à horizon de temps fixés de la perte de capacité de la batterie (multi-horizon fore-casting)
- On peut vouloir estimer la durée de vie de la batterie, i.e., l'instant pour lequel une perte de capacité de x% a eu lieu (classiquement la durée de vie correspond à une perte de 20% de la capacité de la batterie (analyse de survie).

L'évaluation des performances de ces modèles de forecasting multi-horizon ou d'analyse de survie se limite essentiellement sur des métriques basiques, telles que l'erreur quadratique moyenne (RMSE) ou l'erreur absolue/relative (MAE). Malheureusement, ces dernières deviennent moins pertinentes lorsqu'il s'agit de prédire la durée de vie des batteries à des états de vieillissement très avancés.

# 2 Objectifs du stage

Durant le stage, **les objectifs** seront les suivants :

- Mettre en place une méthodologie permettant d'estimer des intervalles de confiance des paramètres des modèles physiques (1). On en déduira des intervalles de prédiction du modèle. Des données de littérature seront utilisées dans un premier temps [Mingant et al., 2021] [Redondo-Iglesias et al., 2017]. Ensuite, les données réelles des batteries SAFT seront mises à disposition pour consolider la méthodologie.
- Les données réelles étant en quantité limité, il serait intéressant d'étudier la question de la simulation de données ou de leur augmentation. Une brève étude des méthodes de la littérature sera à faire avant l'implémentation.
- Les méthodes de type régression quantile et leurs extensions [Koenker and Hallock, 2001, Meinshausen and Ridgeway Chen and Guestrin, 2016] seront ensuite explorées et comparées aux résultats obtenus lors du premier objectif seront analysés et critiqués.
- On s'intéressera aussi à l'approche basée sur la *conformal prediction*, purement empirique développée récemment [Shafer and Vovk, 2008, Romano et al., 2019].

Un deuxième aspect du travail visera à s'interesser à l'estimation de la durée de vie, soit en capitalisant sur la partie forecasting multi-horizon, soit en utilisant des modèles spécifiques, tel que les Survival Random Forest et les extensions qui utilisent la conformal prediction [Candès et al., 2021].

### 3 Profil du candidat

Le candidat idéal est motivé par les problématiques d'ingénierie ou de recherche appliquées dans le secteur de l'énergie et passionné par l'intelligence artificielle. Il possède une solide formation en apprentissage automatique ou statistique, en mathématiques appliquées, en informatique, en modélisation, en optimisation, et possède de bonnes capacités de rédaction scientifique et de communication orale. Une expérience et un goût avérés en programmation informatique (Python et/ou R et/ou Julia) et en analyse de données sont attendus. Les candidats doivent être en dernière année de master (M2) ou en dernière année d'école d'ingénieur (3A) dans l'un des domaines suivants : mathématiques appliquées, apprentissage automatique, IA, informatique ou domaines connexes. Une bonne maîtrise de la langue anglaise sera appréciée.

# 4 Encadrement, lieu, durée et rémunération

Le candidat stagiaire retenu sera rattaché au laboratoire de recherche de Mathématiques et d'Informatique pour les Systèmes Complexes (MICS) de l'Université Paris-Saclay. Le stage se déroulera donc à Gifsur-Yvette avec une possible mission de déplacement à Bordeaux pour visiter et échanger avec le centre de recherche mondial de SAFT. La durée du stage sera de 5 à 6 mois avec un début prévu en février ou mars 2023. La rémunération sera supérieure à celle d'une gratification de stage universitaire. Plus de détails seront donnés lors de l'entretien.

#### 5 Candidature

Les candidatures sont à envoyer le plus vite possible à myriam.tami@centralesupelec.fr, marianne.clausel@univ-lorraine.fr, georges.oppenheim@gmail.com, karrick.mergombeya@saftbatteries.com et sebastien.benjamin@saftbatteries.com. Le dossier de candidature doit contenir :

- Une lettre (ou mail) de motivation ;
- Un CV:
- Éventuellement un lien GitHub contenant les projets réalisés durant sa scolarité (non obligatoire mais préférable).

Les dossiers de candidature incomplets ne seront pas considérés.

### References

- [Candès et al., 2021] Candès, E. J., Lei, L., and Ren, Z. (2021). Conformalized survival analysis. arXiv preprint arXiv:2103.09763.
- [Chen and Guestrin, 2016] Chen, T. and Guestrin, C. (2016). Xgboost: A scalable tree boosting system. In *Proceedings of the 22nd acm sigkdd international conference on knowledge discovery and data mining*, pages 785–794.
- [Koenker and Hallock, 2001] Koenker, R. and Hallock, K. F. (2001). Quantile regression. *Journal of economic perspectives*, 15(4):143–156.
- [Meinshausen and Ridgeway, 2006] Meinshausen, N. and Ridgeway, G. (2006). Quantile regression forests. *Journal of machine learning research*, 7(6).
- [Mingant et al., 2021] Mingant, R., Petit, M., Belaïd, S., and Bernard, J. (2021). Data-driven model development to predict the aging of a li-ion battery pack in electric vehicles representative conditions. *Journal of Energy Storage*, 39:102592.
- [Redondo-Iglesias et al., 2017] Redondo-Iglesias, E., Venet, P., and Pelissier, S. (2017). Eyring acceleration model for predicting calendar ageing of lithium-ion batteries. *Journal of Energy Storage*, 13:176–183.
- [Romano et al., 2019] Romano, Y., Patterson, E., and Candes, E. (2019). Conformalized quantile regression. Advances in neural information processing systems, 32.
- [Shafer and Vovk, 2008] Shafer, G. and Vovk, V. (2008). A tutorial on conformal prediction. *Journal of Machine Learning Research*, 9(3).