



Multiphysikalische Batteriesimulation

Von der Makro- bis zur Mikroskala



Ed Fontes,
Comsol



Henrik Ekström,
Comsol

Für die Entwicklung neuer – und die Verbesserung etablierter – Batterietechnologien bieten Modellierung und Simulation effiziente und kostengünstige Ansätze. Welcher Ansatz der Richtige ist, hängt davon ab, welcher Aspekt einer Batterie das Ziel der Analyse und Verbesserung ist.

Modellierung und Simulation (M&S), die immer mit experimentellen Untersuchungen kombiniert werden sollten, folgen einem mehrstufigen Prozess: Nach der physikbasierten Modellbildung und Validierung können letztlich Vorhersagen getroffen werden, welche sogar über den ursprünglichen Validierungsbereich hinausgehen. Modelle werden im gesamten F&E Prozess verwendet, um virtuelle Experimente durchzuführen. Damit sind „Was-wäre-wenn“-Studien möglich, die zu einem tieferen Verständnis des untersuchten Batteriesystems führen und darüber hinaus innovative Ideen fördern. Die Modelle können für Prognosen, Design, Optimierung und Regelung von Batteriesystemen verwendet werden.

Batteriesysteme werden von unterschiedlichen Interessengruppen mit verschiedenen Zielen und Vorhaben untersucht. Bei einem Elektrofahrzeug z.B. können Aspekte wie Energiedichte, Leistungsdichte, Lebensdauer, Kosten und Nachhaltigkeit die technischen Grenzen und die damit verbundenen Ziele für alle Interessengruppen bestimmen. An Universitäten und Forschungsinstituten gibt es vermehrt Forschungsprogramme, die darauf abzielen, alle Aspekte der Batterienutzung grundlegend zu verstehen, darunter Materialforschung zu neuen elektrochemischen Reaktionen, das Design von Batteriezellen und -systemen sowie die Ökobilanzierung, einschließlich des Prozesses der Rohstoffge-

winnung, der Entsorgung und des Recyclings. Batteriehersteller untersuchen ähnliche Themen, allerdings mit einem größeren Fokus auf die Herstellbarkeit, Implementierung und Nutzung. OEM haben in der Regel einen starken Fokus auf die Einbettung von Batterien in ihr Design, aber auch auf die Ökobilanz.

Modellskalen

Je nach Interessengruppe und Vorhaben können M&S-Projekte auf unterschiedlichem Level durchgeführt werden. Dies kann die Modellierung von Prozessen auf unterschiedlichen Skalen beinhalten, von der molekularen Skala über die mikroskopische und die Zellskala bis zur Betrachtung ganzer Akkumodule.

Molekulardynamikmodelle werden von Materialwissenschaftlern, Elektrochemikern und Physikern verwendet, um neue chemische Effekte in Batterien zu erforschen und das Verhalten möglicher neuer Materialien und Reaktionen vorherzusagen, worauf in diesem Artikel nicht weiter eingegangen wird.

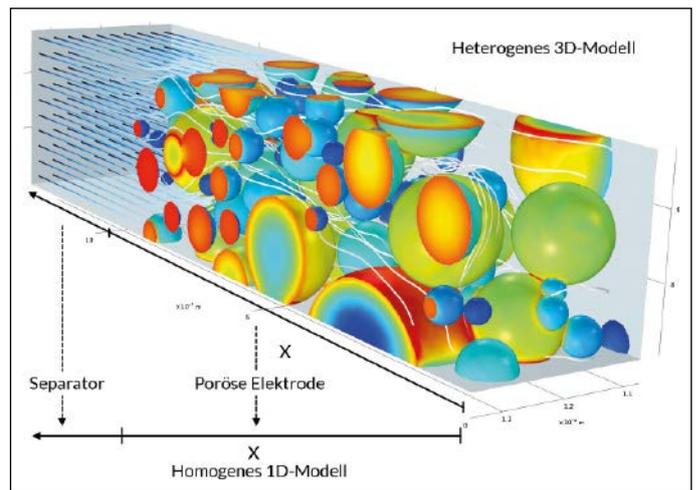
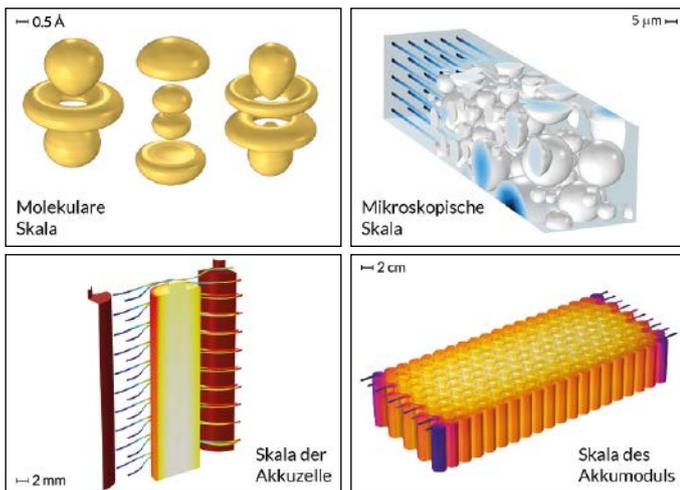
Mikroskala

Die Modellierung einer Batterie auf der mikroskopischen Skala umfasst die Chemie, die physikalischen Eigenschaften und die detaillierte Geometrie der porösen Struktur und des Porenelektrolyts. Die Eingabedaten für die mikroskopische Skala werden nicht selten durch die

molekulare Modellierung geliefert, z.B. Frequenzkonstanten, Elektrodenpotenziale, Transporteigenschaften und andere chemische und physikalische Eigenschaften von Batteriematerialien.

Modelle auf der Mikroskala müssen viele verschiedene Sachverhalte berücksichtigen, z.B. das elektrische Potenzial des elektronischen Leiters (der Elektrode), das ionische Potenzial des Porenelektrolyten sowie des freien Elektrolyten, die Konzentration der ionischen Spezies und der neutralen Spezies, die elektrochemischen und chemischen Reaktionen, die Temperaturverteilung und die mechanischen Verschiebungen aufgrund von thermischer Ausdehnung oder Ausdehnung durch den Transport chemischer Spezies. Mit anderen Worten: An einer genauen Beschreibung eines Batteriematerials sind mehrere physikalische Phänomene beteiligt.

Wesentliche Ergebnisse von Modellierungsprojekten sind Aussagen zu Mechanismen, welche die Leistung und Lebensdauer von Batterien bedingen. Dazu zählen quantitative Vorhersagen zu absoluten Leistungsgrenzen (Energiedichte und Leistungsdichte), zum Einfluss von Material- und Konstruktionsparametern, zur räumlichen und zeitlichen Verteilung von elektrochemischen Reaktionen und Temperaturen sowie zu Risiken für Kurzschlüsse, Ermüdung, vorzeitiges Versagen und die Bildung schädlicher Nebenprodukte. Des Weiteren erlauben Modelle die Bewertung des Gesundheitszustandes einer



Die Modellskalen reichen von Ångström (1e-10 m) bis zur Modulskala (1 m). Hier werden die Größenordnungen beispielhaft mit einer zylindrischen Li-Ionen-Zelle und einem Akkupack aus zylindrischen Zellen dargestellt.

Heterogenes Elektrodenmodell, gewonnen das aus Dünnschliffen einer Lithium-Ionen-Batterieelektrode gewonnen wird. Das heterogene Modell kann anschließend verwendet werden, um Effektivparameter zu berechnen, welche dann in einem homogenisierten 1D-Newman-Modell verwendet werden.

Batterie („state-of-health“, SOH). Leistungsabfall und Ausfall zeigen sich fast immer zuerst an Phänomenen auf der mikroskopischen Skala – lange bevor sich der SOH in der Gesamtleistung einer Zelle bemerkbar macht.

Batteriezellenskala mit Theorie poröser Elektroden

Nach der mikroskopischen Skala erfolgt die Untersuchung auf der Batteriezellenskala. Die porösen Elektroden werden dann als homogenisierte Platten beschrieben, wobei der Porenelektrolyt und die Elektrodenmaterialien im gleichen Punkt im Raum im Modell definiert sind. Die Struktur der Elektrode wird in dem Fall durch Effektivparameter wie Volumenanteil des Poren-

elektrolyts, Volumenanteil der Elektrode und Tortuosität beschrieben. Modelle dieser Art nutzen die sogenannte poröse Elektrodentheorie, die von Newman et.al. entwickelt wurde. Sie bildet die Grundlage für Batteriemodelle auf einer Skala knapp oberhalb der Mikroskala.

In diesem Maßstab untersucht man ähnliche Aspekte wie im Mikromaßstab, allerdings für eine oder mehrere Batteriezellen. Die Modelle liefern Informationen über den Einfluss verschiedener Materialien und Chemikalien auf die Leistung und Lebensdauer, die Porosität und spezifische Oberfläche der Elektroden und Materialien, die Dimensionen der Stromkollektoren, Elektroden und des Separators, die mechanischen Belastungen der Batteriezelle durch die

Geometrie und die Ausdehnung während des Entladens und Aufladens, die Auswirkungen des Wärmemanagementsystems und andere Einflussgrößen.

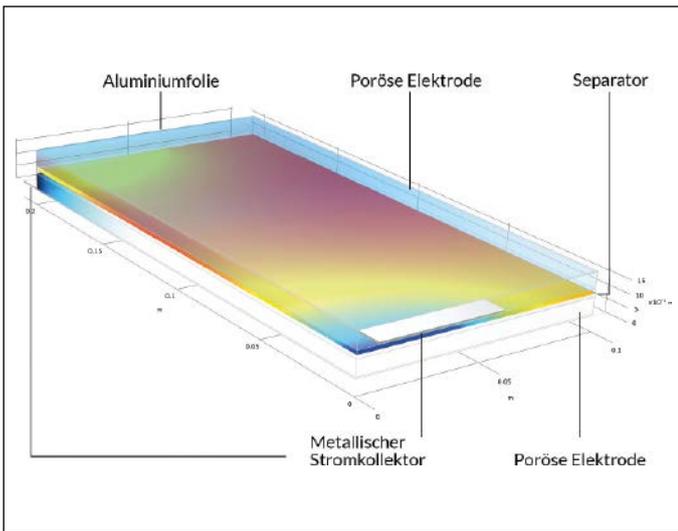
Das Ergebnis von M&S in diesem Maßstab sind quantitative Angaben über Leistung, Leistungsgrenzen und Lebensdauer. Diese lassen sich aus unterschiedlichen Ergebnisgrößen ableiten, wie Strom- und Potenzialverteilung, Temperaturverteilung, Metallabscheidung und Kurzschluss, Ermüdung und Rissbildung in den Elektroden aufgrund von Ausdehnung beim Laden und Entladen sowie Bildung von Nebenprodukten und Auftreten von Nebenreaktionen, die die Lebensdauer verringern. Merkmale und Eigenschaften sowie quantitativen Vorhersagen

LUM

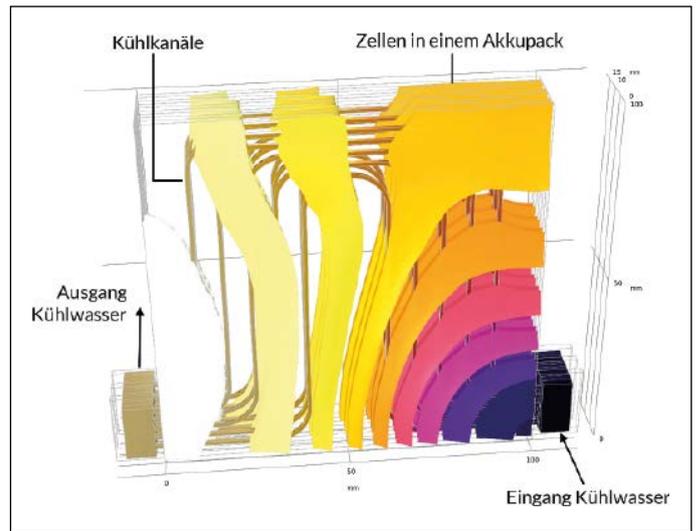
Treffen Sie LUM @ SEPAWA 2022
 >>> Stand D623 <<<

Beschleunigen Sie die Entwicklung Ihrer Kosmetik- & HPC-Formulierungen, reduzieren Sie Zeit & Kosten in der Stabilitätstestung & verstehen Sie umfassend die Partikeleigenschaften von Rohstoffen

www.lum-gmbh.de



Typisches High-Fidelity-Modell im Maßstab der Batteriezelle: Dargestellt ist die Stromdichteverteilung in der Mitte des Separators, ermittelt mit einem 3D-Newman-Modell einer Lithium-Ionen-Batterie-Pouch-Zelle.



Schnitt durch einen Akkupack, bestehend aus Lithium-Ionen-Planarzellen mit eingearbeiteten Kühlkanälen.

dieser Modelle können anhand der detaillierten mikroskopischen Modelle weiter validiert werden. Die Batteriezellenmodelle können mit den detaillierten mikroskopischen Eigenschaften der Batterie gekoppelt werden.

Modulskala

Akkumodule oder Akkupacks können aus Dutzenden bis Hunderten von Batteriezellen bestehen. Aktuell ist es noch nicht möglich, jede Batteriezelle mit der Theorie der porösen Elektroden in 3D zu modellieren. Stattdessen werden vereinfachte 0D- und 1D-Modelle für das elektrochemische Verhalten der einzelnen Zellen verwendet, welche an detaillierten Zellenmodellen validiert wurden und auf diese zurück gekoppelt werden können. Typische Ergebnisse solcher Modelle sind die räumlichen und zeitlichen Verteilungen von Temperatur, Stromdichte und Potenzial zwischen den einzelnen Zellen, deren Auswirkungen auf Ladung und Entladung, die mechanische Ausdehnung der verschiedenen Zellen sowie die Integrität des Moduls.

Darüber hinaus kann das Wärmemanagementsystem mit Kühl- und Heizkanälen in der Zelle, sowie konstruktive Details des externen Stromleitungssystems simuliert werden. Dies erlaubt schließlich das Design von Frühwarnsystemen, die den Ausfall von Batteriezellen und das thermische Durchgehen in einem Batteriesystem anzeigen können.

Fazit

Der Grad der Komplexität eines Batteriesystems hängt von dem Zweck des Batteriesystems selbst ab. Mikroskopische Modelle sind sehr anspruchsvoll und zielen auf ein detailliertes Verständnis des Herzstücks der Batterie ab. Ein Modell, das für die Steuerung eines Akkupacks als Teil eines Elektrofahrzeugantriebsstrangs verwendet wird, kann und darf nicht denselben Grad an Komplexität aufweisen. Stattdessen kann es sich um vereinfachte Modelle handeln, die die Physik des Batteriesystems nur näherungsweise beschreiben.

Multiphysikalische Modellierung und Simulation bieten eine geschlossene Kette zur qualitativen und quantitativen Validierung eines Batteriesystems von seinen Eigenschaften auf der Makroskala bis zum Herzstück der Batterie auf der Mikroskala.

Die Autoren

Ed Fontes, CTO, Comsol
Henrik Ekström,
 Technology Manager Electrochemistry, Comsol

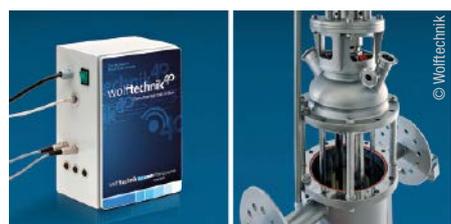
Bilder © Comsol

Diesen Beitrag können Sie auch in der Wiley Online Library als pdf lesen und abspeichern:
<https://dx.doi.org/10.1002/citp.202201024>

Kontakt
Comsol Multiphysics GmbH, Göttingen
 Tel.: +49 551 99721 - 0
 info@comsol.de · www.comsol.de

Filterkerzen mit Recyclinganteil

Wolftechnik bietet eine neue Tiefenfilterkerze zur Abtrennung von Feststoffen aus Flüssigkeiten vor. Das Besondere ist ihr Recyclinganteil von 20%. Trotzdem weist die WFMBR-Melt-Blow-Kerze identische technische Spezifikationen wie das Vorgängermodell auf. Die Filterkerze mit vier Filterstufen aus Polypropylen (PP) sichert durch ihren inneren Aufbau lange Standzeiten, eine hohe Schmutzaufnahmekapazität und einen geringen Differenzdruck. Der WTSRF-EHEDG, ein für den Chargenbetrieb in Pharma, Biotec und Lebensmittelindustrie ausgelegter selbstreinigender Filter im Hygienic Design, wurde jüngst mit einem neuen Magnetrührwerk ausgestattet,



das den bisherigen Elektroantrieb ersetzt, und ist nun Ex-Schutz geeignet. Spülen genügt bei diesem nach den Richtlinien der European Hygienic Engineering and Design Group (EHEDG) konstruierten Filter, die Bauteile müssen nicht zerlegt werden, um Produkte

in gleichbleibender Qualität und angemessener Haltbarkeit herzustellen. Kombiniert mit der Smarten Filterbox des Herstellers entsteht eine digital vernetzte „Filtration 4.0“. Die Box eignet sich auch für Bestandsanlagen mit den unterschiedlichsten Filtersystemen.

Kontakt
Wolftechnik Filtersysteme GmbH & Co. KG, Weil der Stadt
 Tel.: +49 7033 7014 - 26
 info@wolftechnik.de · www.wolftechnik.de