Teil 2-Eingehenede Darstellung

Vorhaben: ILAB - Intelligentes Batterietestlabor
Ausführende Stelle: Universität Bayreuth
Förderkennzeichen: 03XP0467

Detaillierte Darstellung der Durchgeführten Arbeiten

Zusammenfassung

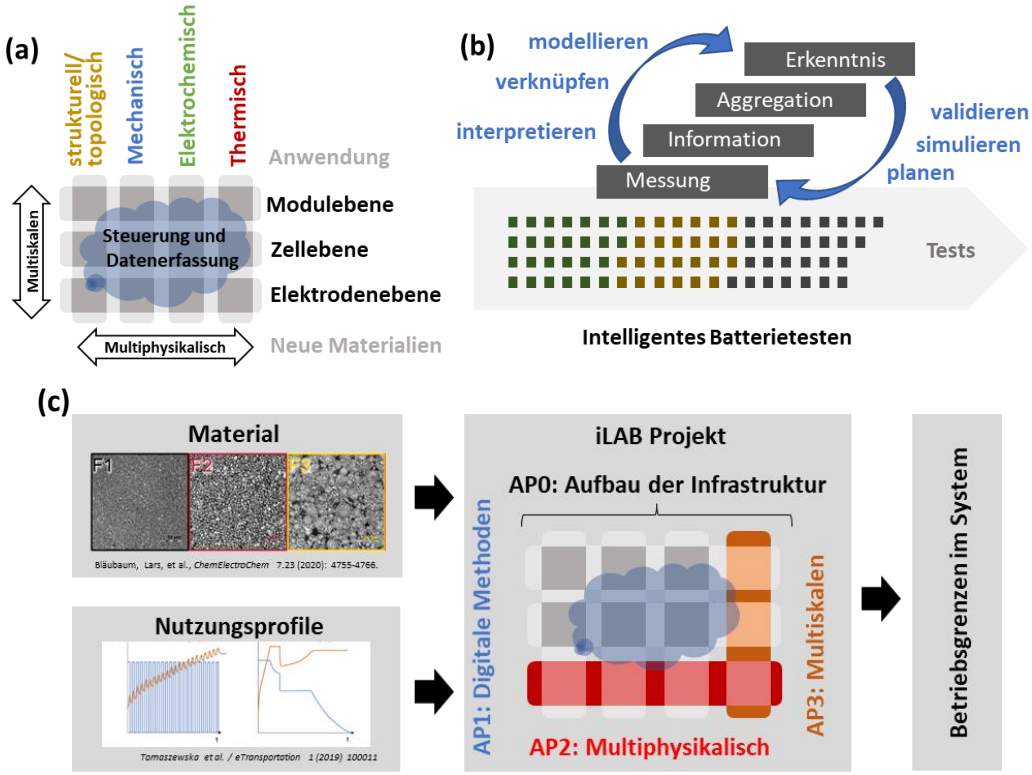


Abbildung 1: Motivation und Konzept des intelligenten Batterietestlabors: a) Multiskaliges und multiphysikalsiches Testen, b) Ablauf des Intelligenten Batterietestens c) Projektstruktur

Ziel des Projekts war der Aufbau eines intelligenten Batterietestlabors, in dem Batterien systematisch auf Elektroden-, Zell- und Modulebene sowie über verschiedene physikalische Domänen hinweg charakterisiert werden können (siehe Abbildung 1). Der zentrale Ansatz bestand darin, experimentelle Messungen, digitale Dokumentation, Messdatenbanken, automatisierte Datenschnittstellen, CAN-Bus-basierte Steuerung und computergestützte Modelle zu einer integrierten Forschungsinfrastruktur zusammenzuführen.

Im Verlauf des Projekts wurden wesentliche Hardware- und Softwarekomponenten implementiert. Dazu gehören Fernsteuereinheiten, Impedanz-Multiplexer auf Elektroden- und Zellebene, ein CAN-Bus-System für Mess- und Regelungsaufgaben, Messaufbauten für elektrochemische, strukturelle, thermische und mechanische Untersuchungen, ein digitales Laborbuch, eine Zeitreihen-Messdatenbank sowie Schnittstellen für den automatisierten Datentransfer. Parallel dazu wurden modellbasierte und datengetriebene Analysemethoden in die Plattform integriert, insbesondere das P2D-Modell, thermische Modelle, Ersatzschaltbildmodelle, KMC-Modelle sowie Workflows zur automatisierten Parametrierung.

Als wissenschaftlicher Demonstrationsfall wurde die Reduktion des experimentellen Aufwands bei der Bestimmung von Betriebsgrenzen und Ladeprotokollen ausgewählt. Zu diesem Zweck wurde das Boost-Charge-Protokoll auf unterschiedlichen Skalen und in mehreren Domänen untersucht. Die Ergebnisse zeigen, dass ILAB physikalische Experimente und In-silico-Untersuchungen miteinander verknüpfen kann und dadurch ein tieferes Verständnis des Batterieladevorgangs sowie eine effizientere Versuchsplanung ermöglicht.

Einleitung und Motivation

Die Entwicklung neuer Batteriesysteme ist ein mehrstufiger Prozess. Zunächst werden neue Materialien und Elektroden unter optimalen Bedingungen bewertet. Anschließend erfolgt die Charakterisierung in vollständigen Zellen und danach die Analyse von Modulen unter realitätsnahen Bedingungen. Jede dieser Stufen liefert wesentliche Informationen, die häufig getrennt erzeugt, gespeichert und ausgewertet werden. Dadurch entstehen Inkonsistenzen in der Datennachverfolgbarkeit, sodass Ergebnisse einer Ebene nur eingeschränkt auf andere Ebenen übertragen werden können.

Das ILAB-Projekt adressiert genau diese Herausforderung. Die im Projekt entwickelte Infrastruktur ist so ausgelegt, dass sie nicht nur für Batterietests, sondern auch für weitere Anwendungen genutzt werden kann. Sie ist als Bestandteil einer digitalen, wissensbasierten Prozesskette zu verstehen. Experimentelle Daten werden systematisch erfasst, mit zugehörigen Metadaten verknüpft und in einer Datenbank gespeichert. Anschließend werden die Daten mithilfe computergestützter Methoden analysiert. Dieser Ansatz bildet die Grundlage für reproduzierbare, nachvollziehbare und modellbasierte Forschung im Bereich der Batterietechnologie.

Die Motivation lässt sich besonders anschaulich am Beispiel der Bestimmung von Leistungsgrenzen darstellen (siehe Abbildung 2). Die Ladezeit einer Batterie hängt von verschiedenen Faktoren ab, beispielsweise von C-Rate, Temperatur, Ladezustand, Zellformat und Batteriealter. Für eine detaillierte Untersuchung aller möglichen Parameterkombinationen wäre eine umfassende Testmatrix erforderlich. ILAB verfolgt daher den Ansatz, gezielte Experimente mit Modellen und Simulationen zu kombinieren. Auf diese Weise können kritische Betriebsbereiche schneller identifiziert und der experimentelle Aufwand reduziert werden.

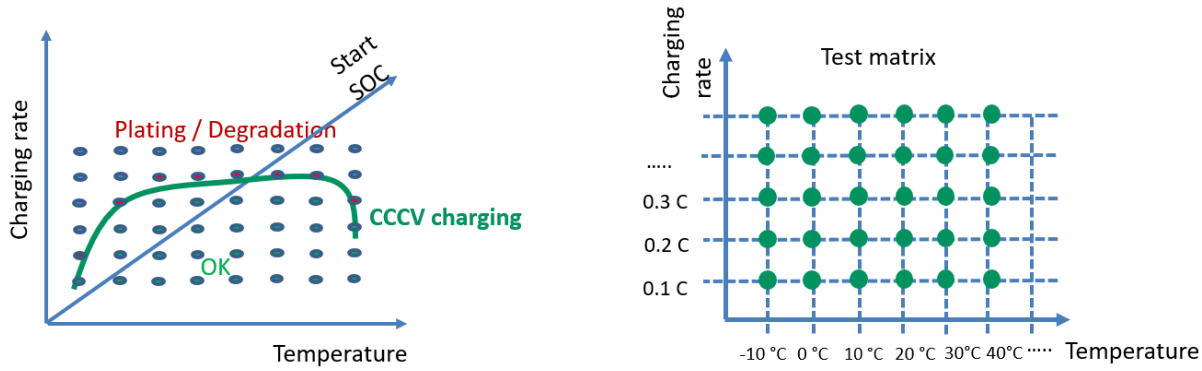


Abbildung 2: Projektanwendungsfall: Verkürzung von Entwicklungszyklen durch Reduktion der experimentellen Testmatrix bei der Bestimmung von Ladegrenzen.

Detaillierte Darstellung zu den durchgeführten Arbeiten

Das Projekt wurde in vier zentrale Arbeitspakete unterteilt. AP0 stellte die technische Grundlage bereit. In AP1 wurden computergestützte Analyse- und Modellierungsmethoden integriert. AP2 demonstrierte ein digital vernetztes multiphysikalisches Experiment. AP3 erweiterte die Untersuchung zu einem digital vernetzten multiskaligen Experiment. Die folgenden Abschnitte beschreiben die erzielten Ergebnisse entlang der Arbeitspakete.

AP0: Aufbau der IT-, Mess- und Regelungsinfrastruktur

AP0 diente dem Aufbau der technischen Infrastruktur. Dieses Arbeitspaket war besonders umfangreich, da viele Komponenten nicht als vollständig verfügbare Standardlösungen beschafft werden konnten. Stattdessen mussten Hardware- und Softwarekomponenten intern entwickelt, angepasst, getestet und in die Laborumgebung integriert werden. AP0 bildet daher die Grundlage für sämtliche experimentellen und digitalen Arbeiten in AP1 bis AP3.

UAP 0.1 Elektronische Komponenten und Multiplexer

Für die flexible Anbindung von Zyklisierern, Impedanzmessgeräten und Prüfkanälen wurden Fernsteuereinheiten und Multiplexer entwickelt (siehe Abbildung 3). Die Fernsteuereinheit dient primär der Steuerung der Multiplexer und Impedanzmessgeräte. Gleichzeitig stellt sie eine Benutzeroberfläche bereit und kann um weitere Funktionen erweitert werden. Die Multiplexer ermöglichen das automatische Umschalten zwischen elektrochemischer Prüfung und Impedanzmessung. Dadurch können hochwertige Impedanzmessgeräte effizient mit mehreren Prüfkanälen verbunden werden.

Die Umsetzung erfolgte auf Elektroden- und Zellebene. Besonders wichtig ist, dass der Schaltvorgang digital ausgelöst und dokumentiert werden kann. Damit wird die Messkette nicht nur automatisierbar, sondern auch nachvollziehbar. Diese Funktion stellt einen zentralen Baustein des intelligenten Batterietestlabors dar, da sie experimentelle Abläufe mit der digitalen Dokumentation verknüpft.

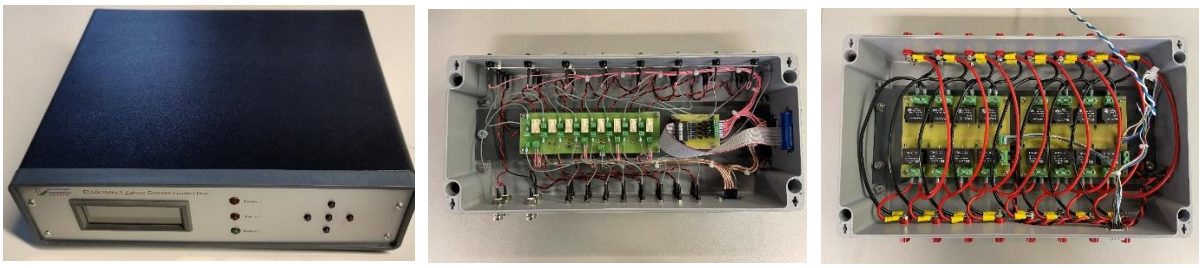


Abbildung 3: Fernsteuereinheit und Multiplexer auf Elektroden- und Zellebene zum automatisierten Umschalten zwischen Zyklisierung und Impedanzmessung.

UAP 0.2 CAN-Bus-System

Das CAN-Bus-System wurde als Kommunikations- und Regelungsinfrastruktur für Mess- und Regelungsaufgaben aufgebaut. Es ermöglicht die Integration von Prüfgeräten, Sensoren, Aktoren, Steuereinheiten, Analog-zu-CAN- und CAN-zu-Analog-Schnittstellen sowie modellbasierten Reglern (siehe Abbildung 4). Das System wurde in mehreren Entwicklungsstufen erweitert und erfolgreich getestet. Dadurch können Geräte nicht nur Daten austauschen, sondern auch automatisierte Abläufe auslösen.

Analog-zu-CAN- und CAN-zu-Analog-Schnittstellen ermöglichen darüber hinaus die Integration von Geräten, die CAN-Kommunikation nicht nativ unterstützen. Dies betrifft insbesondere Messgeräte für Industriesignale sowie Wärmeflusssensoren, NTC-Sensoren und weitere Sensortypen.

Ein typischer Ablauf besteht darin, dass ein Tester über CAN eine Impedanzmessung anfordert. Die Steuereinheit erkennt diese Anforderung, schaltet den Multiplexer auf den entsprechenden Kanal und initialisiert die Messung. Nach Abschluss der Messung wird der Tester informiert, sodass das Prüfprotokoll fortgesetzt werden kann. Damit wurde gezeigt, dass die CAN-Bus-Infrastruktur für automatisierte Messabläufe geeignet ist.

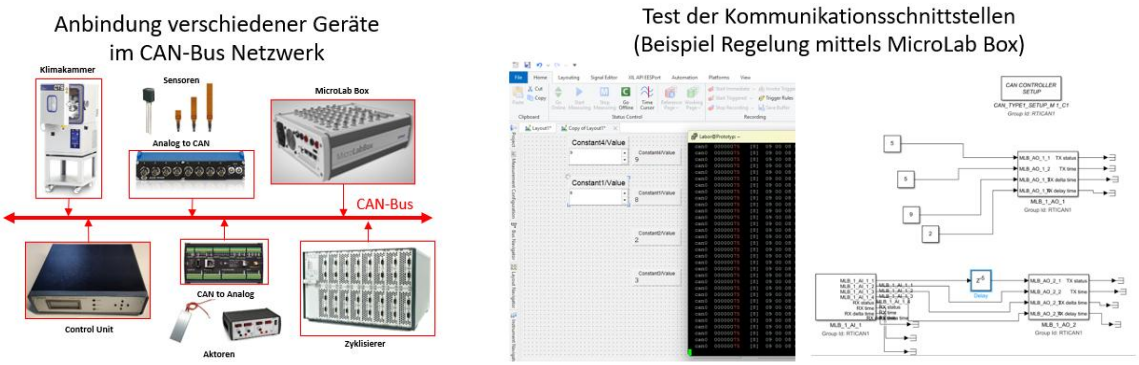


Abbildung 4: CAN-Bus-System zur Kommunikation zwischen Batterietestern, Sensoren, Aktoren, Steuereinheiten und modellbasierten Reglern.

UAP 0.3 Aufbau und Installation von Messgeräten

Im Rahmen des Projekts wurden Messgeräte und Messaufbauten für die Elektroden-, Zell- und Modulebene aufgebaut (siehe Abbildung 5). Dazu gehören Glovebox-Systeme für Montage und Demontage, ein Schweißgerät zum Aufbau einzelner Batteriemodule, elektrochemische Teststände, Klimakammern, digitale Mikroskopie, Computertomographie, Thermographie, Wärmeflussmessung, Dilatometer, ortsaufgelöste Druckmessung, eine Data-Science-Workstation, eine MicroLab Box sowie Benutzeroberflächen.

Für die strukturelle Charakterisierung wurde auf Elektrodenebene ein Mikroskopie-Setup und auf Zellebene ein Computertomographie-Setup (CT) etabliert. Mit dem CT-Setup wurden repräsentative Aufnahmen von Rund- und Knopfzellen erzeugt. Die thermische Charakterisierung erfolgt über ein Thermographie-Setup, das eine ortsaufgelöste thermische Charakterisierung ermöglicht. Ergänzend wurden Komponenten zur Applikation und Messung thermischer Randbedingungen integriert, darunter Wärmeflussmessung, elektrische

Beheizung, Heizen und Kühlen mit Peltier-Elementen sowie ein Flüssigkeitskühlkreislauf (siehe Abbildung 6). Für die mechanische Charakterisierung wurden Dilatometer auf Elektroden-, Zell- und Modulebene sowie ein Aufbau zur ortsaufgelösten Druckmessung implementiert (siehe Abbildung 7).

Abbildung 5: Messmöglichkeiten auf Modul-, Elektroden- und Zellebene als Grundlage für skalenübergreifende Batterietests.

Auf der thermischen Ebene wurden Thermographie, Wärmeflussmessung und definierte thermische Randbedingungen erfolgreich etabliert.

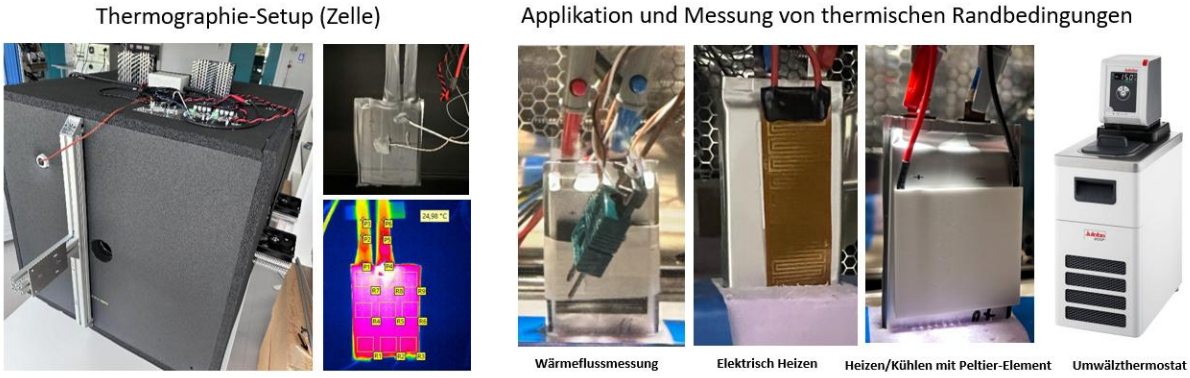


Abbildung 6: Thermographie-Setup, Wärmeflussmessung und Aktoren zur Einstellung thermischer Randbedingungen

Auf der mechanischen Ebene wurden Dilatometeraufbauten und druckempfindliche Folien vorbereitet und eingesetzt.

Abbildung 7: Mechanische Charakterisierung mittels Dilatometern auf Elektroden-, Zell- und Modulebene sowie ortsaufgelöste Druckmessung.

UAP 0.4 Datenbank und digitales Laborbuch

Im digitalen Laborbuch SciNote wurde eine Struktur zur digitalen Dokumentation experimenteller Abläufe angelegt. Protokolle, Inventar, Prüflinge, Geräte, Kanäle und Metadaten werden dort verwaltet (siehe Abbildung 8). Für Messdaten wurde eine InfluxDB-Datenbank eingerichtet, die sich insbesondere zur Speicherung großer Mengen zeitabhängiger Messsignale eignet. Die Kombination aus Laborbuch und Messdatenbank erlaubt eine klare Trennung und gleichzeitige Verknüpfung von experimentellem Kontext und Rohmessdaten.

Batteriezellen, Elektroden, Geräte und Messkanäle können eindeutig inventarisiert werden. QR-Codes ermöglichen den direkten Zugriff auf den digitalen Zwilling eines Objekts. Dadurch ist nachvollziehbar, welche Zelle mit welchen Materialien, in welchem Aufbau, mit welchem Protokoll und unter welchen Randbedingungen getestet wurde.

Abbildung 8: Digitales Laborbuch, Inventarverwaltung, Metadatenstruktur und Messdatenbank als Grundlage für eine nachvollziehbare Datenverarbeitung

UAP 0.5 Datenschnittstellen und automatisierter Datentransfer

Für eine möglichst automatisierte Dokumentation und Messdatenspeicherung wurden Schnittstellen entwickelt. Dazu zählen API-Schnittstellen zum digitalen Laborbuch, Schnittstellen zur Messdatenbank, GUIs für Anwenderinnen und Anwender sowie Anwendungen zur strukturierten Dokumentation von Zellassemblierung und Prüfabläufen (siehe Abbildung 9). Ein Beispiel ist eine Schnittstelle, die wesentliche Informationen zu neu

assemblierten Batteriezellen abfragt und automatisch in das Laborbuch überträgt. Dadurch erhält jede Zelle eine eindeutige ID und die Dokumentation wird standardisiert.

Die Infrastruktur wurde durch Ethernet-Netzwerkstrukturen und CAN-Bus-Kommunikation ergänzt. Physische Messgeräte, digitale Dokumentation und Datenbanken können dadurch in einem gemeinsamen Workflow genutzt werden. Diese Kopplung ist eine wesentliche Voraussetzung für die spätere automatisierte Auswertung und für die Nutzung der Messdaten in Modellen.

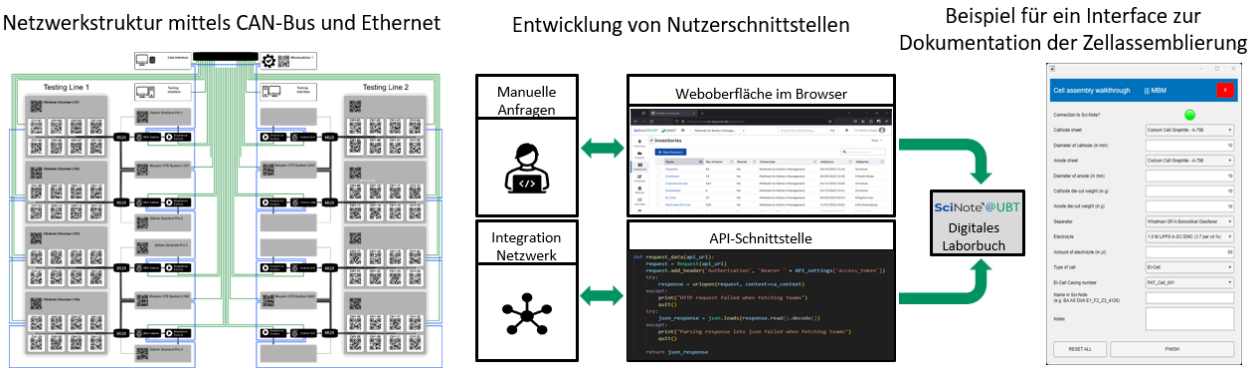


Abbildung 9: Netzwerkstruktur, Datenbankschnittstellen und Benutzeroberflächen für automatisierte Dokumentation und Datentransfer

AP1: Integration computergestützter Analysemethoden

Ziel von AP1 war die Integration bestehender und neu entwickelter computergestützter Methoden in das intelligente Batterielabor. Entsprechend der Struktur der ursprünglichen Projektbeschreibung ist AP1 in drei UAP gegliedert: Integration von Modellen, Entwicklung von Algorithmen zur automatisierten Messdatenauswertung und automatisierte Datenauswertung. Die Modelle und Algorithmen dienen dazu, Messdaten zu interpretieren, Modellparameter zu bestimmen, Simulationen durchzuführen sowie experimentelle Protokolle zu planen oder auszuwerten. AP1 verknüpft damit die physische Laborinfrastruktur aus AP0 mit der wissenschaftlichen Analyse in AP2 und AP3.

UAP 1.1 Integration von Modellen

Mehrere Modellklassen wurden in ILAB integriert. Das zentrale Modell ist das poröse Elektrodenmodell nach Doyle und Newman (P2D). Es beschreibt Transport- und Reaktionsprozesse in Elektroden und Elektrolyten und ermöglicht die Analyse interner Zellgrößen, die experimentell nicht direkt zugänglich sind. Zusätzlich wurden KMC-Modelle für Oberflächenprozesse, Transmission-Line-Modelle für Regelungs- und Stromverteilungsaufgaben, Ersatzschaltbildmodelle für kompakte Systembeschreibungen sowie thermische Modelle für die Erwärmung auf Zellebene bereitgestellt.

Die Modelle wurden in einer integrierten Softwareumgebung gebündelt, welche nachfolgend als IonLAB bezeichnet wird (siehe Abbildung 10). Sie ermöglicht den Import von Testplänen, die Verarbeitung von Versuchsergebnissen, die Simulation von Experimenten und die

Ausführung von Parametrierungs-Workflows. Dadurch können experimentelle und simulierte Daten in vergleichbarer Form verarbeitet und gegenübergestellt werden.

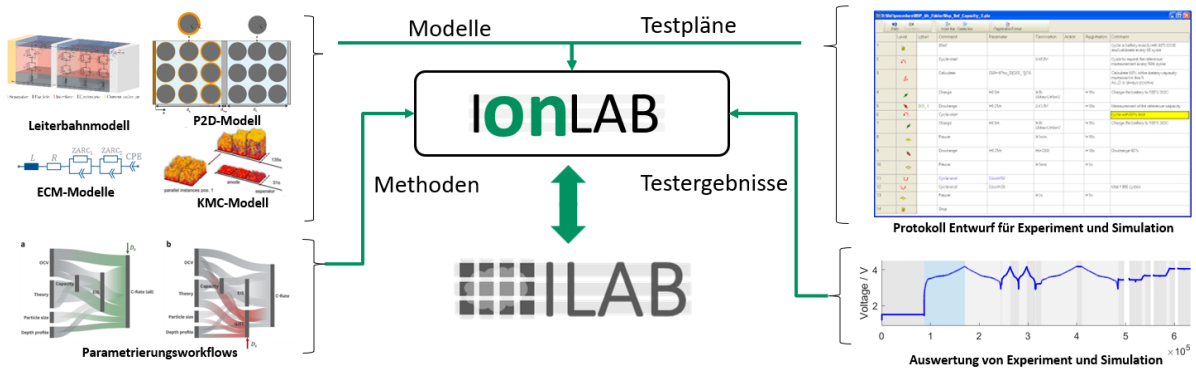


Abbildung 10: IonLAB als integrierte Simulations- und Analyseplattform mit Modellen, Methoden, Testplänen und Testergebnissen.

UAP 1.2 Entwicklung von Algorithmen zur automatisierten Messdatenauswertung

Zur Modellparametrierung wurden Workflows entwickelt, die unterschiedliche Messdaten nutzen. Dazu gehören EIS-Messungen, C-Raten-Tests, Pulstests, OCV-Bestimmungen sowie Strukturparameter aus Mikroskopbildern. Die automatisierte Auswertung extrahiert relevante Messabschnitte, führt Modellanpassungen durch und erzeugt Parameter, die anschließend für Simulationen verwendet werden können (siehe Abbildung 11).

Die Datenauswertung umfasst auch bildbasierte Methoden. Mit digitaler Mikroskopie aufgenommene Bilder wurden automatisch analysiert, um Elektrodendicken und Partikelgrößen zu bestimmen. Darüber hinaus wurden Machine-Learning-Methoden zur Identifikation von Li-Plating auf Elektrodenbildern untersucht. Das intelligente Labor ist somit nicht auf klassische Messsignale beschränkt, sondern kann auch bildbasierte strukturelle Informationen in den Analyseprozess integrieren.

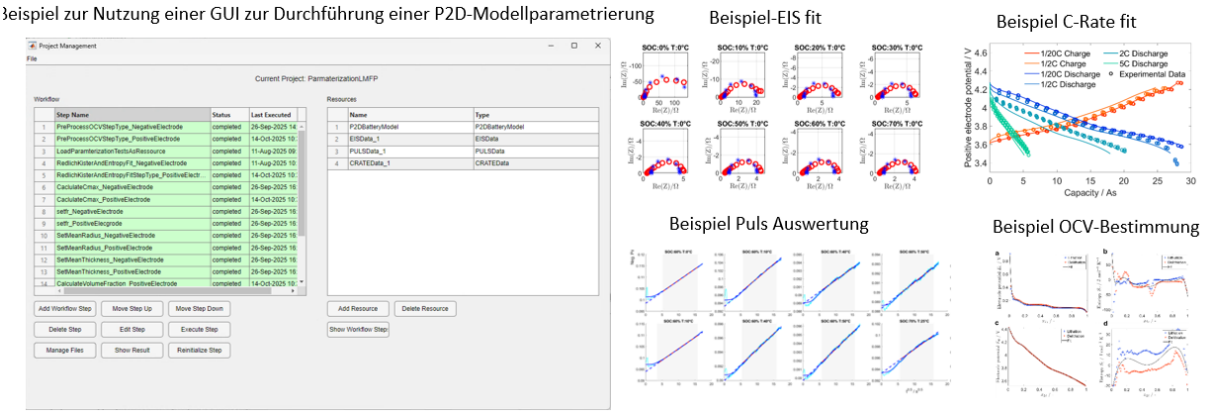


Abbildung 11: Workflow zur Parametrierung des P2D-Modells mit EIS-Fit, C-Raten-Fit, Pulsauswertung und OCV-Bestimmung

Die ersten implementierten Parameteridentifikationsroutinen konzentrierten sich auf die Extraktion P2D-relevanter Parameter aus Impedanz- und Pulsmessungen. Hierzu wurden charakteristische Abschnitte der experimentellen Rohdaten, beispielsweise Impedanzspektren, Strompulse und Relaxationsphasen, automatisch identifiziert und

ausgewertet. Geeignete Teilmodelle wurden sowohl im Zeit- als auch im Frequenzbereich verwendet, um Parameter wie Austauschstromdichte, Doppelschichtkapazität und Innenwiderstand zu bestimmen (siehe Abbildung 12). Diese Parameter wurden anschließend für modellbasierte Simulationen und zur Interpretation der Experimente in AP2 und AP3 bereitgestellt.

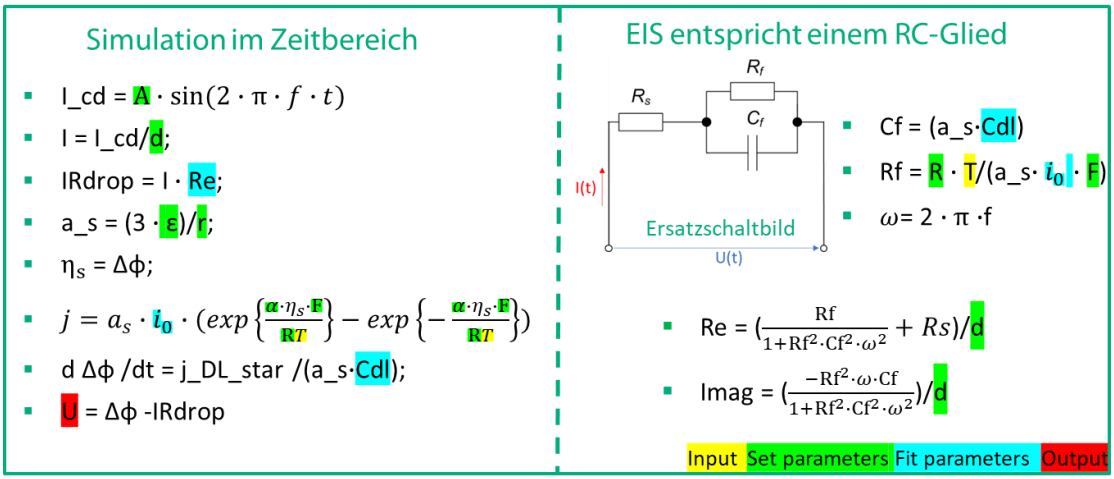


Abbildung 12: Teilmodelle und Messabschnitte zur automatisierten Identifikation ausgewählter P2D-Modellparameter aus Impedanz- und Pulsmessungen.

UAP 1.3 Automatisierte Datenauswertung

Zusätzlich zu den Parametrierungs-Workflows und bildbasierten Analysen wurden zuvor im BMBF-geförderten Projekt FormEL entwickelte Methoden zur automatisierten Auswertung von Batterieformationsdaten in ILAB integriert (siehe Abbildung 13). Diese Methoden ermöglichen beispielsweise die Analyse der Entwicklung der SEI-Schichtdicke während der Formierung. Ihre Integration zeigt, wie Ergebnisse aus früheren Forschungsprojekten nachhaltig im intelligenten Batterielabor verfügbar gemacht und für zukünftige automatisierte Auswertungen wiederverwendet werden können. Dadurch wird auch die Rolle von ILAB als Plattform zur Wissensaggregation über einzelne Messkampagnen hinaus gestärkt.

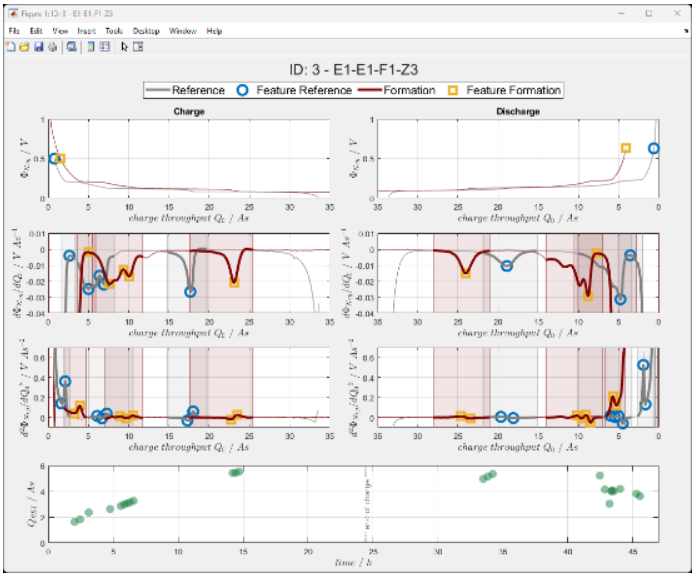


Abbildung 13: Beispiel einer automatisierten Auswertung der Formierung zur Bewertung der Entwicklung der SEI-Schichtdicke unter Verwendung von Methoden aus dem Projekt FormEL.

AP1 stellt eine Toolbox bereit, die in AP2 und AP3 genutzt wurde. Die Integration der Modelle ermöglicht es, reale Experimente durch Simulationen zu ergänzen, Messaufbauten miteinander vergleichbar zu machen und Zustandsgrößen abzuschätzen, die nicht direkt gemessen werden können. AP1 leistet damit einen wesentlichen Beitrag zur Reduktion des experimentellen Aufwands und zur Erhöhung des Informationsgehalts einzelner Messungen.

AP2: Digital vernetztes multiphysikalisches Experiment

AP2 demonstrierte die digitale Integration verschiedener physikalischer Domänen. Entsprechend der ursprünglichen Projektstruktur ist AP2 in den Aufbau und die Durchführung einzelner Experimente in unterschiedlichen physikalischen Domänen, die Entwicklung von Methoden zur Koordination dieser Experimente sowie den Test und die Validierung der resultierenden Methode unterteilt. Die zentrale Fragestellung bestand darin, wie elektrochemische, strukturelle, mechanische und thermische Messungen zu einem konsistenten Gesamtbild eines Ladevorgangs zusammengeführt werden können. In der Praxis werden diese Messungen häufig in unterschiedlichen Aufbauten durchgeführt (siehe Abbildung 14). ILAB soll diese separaten Messungen digital zusammenführen und mithilfe von Modellen interpretieren.

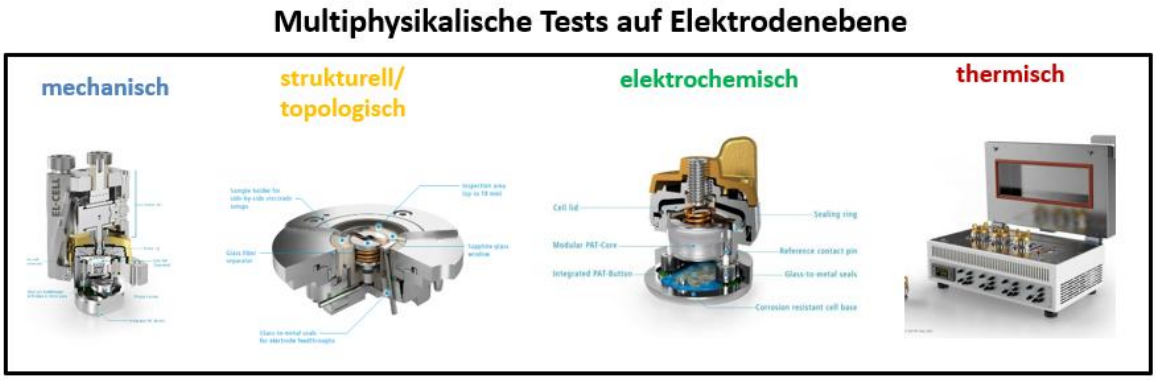


Abbildung 14: Zielsetzung von AP2: digitale Integration struktureller, mechanischer, elektrochemischer und thermischer Tests auf Elektrodenebene.

UAP 2.1 Aufbau und Durchführung einzelner Experimente in unterschiedlichen physikalischen Domänen

Elektrochemische Charakterisierung

Auf elektrochemischer Ebene wurden automatisierte Messungen sowohl im Frequenz- als auch im Zeitbereich durchgeführt (siehe Abbildung 15). Mithilfe der Steuereinheiten und Multiplexer konnten C-Raten-Tests, Pulstests, Kapazitätsmessungen und EIS-Messungen unter Variation von SOC und Temperatur durchgeführt werden. Diese Daten werden insbesondere zur Parametrierung des P2D-Modells und zur Bewertung von Ladeprotokollen verwendet.

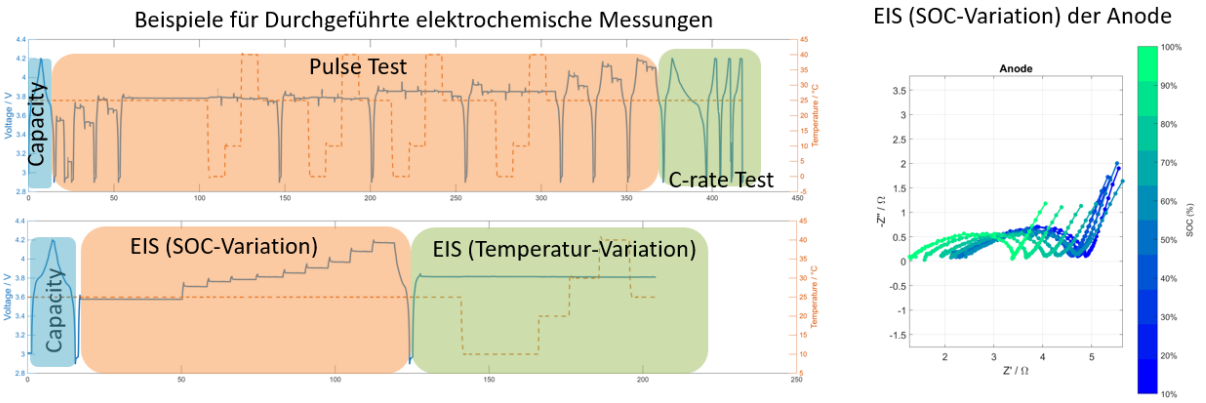


Abbildung 15: Beispiele elektrochemischer Messungen auf Elektrodenebene, einschließlich C-Raten-Tests, Pulstests, Kapazitätsmessungen und EIS-Messungen.

Strukturelle Charakterisierung

Für die strukturelle Charakterisierung wurden Elektroden aus Batteriezellen entnommen und mit optischen Methoden untersucht (siehe Abbildung 16). Ein Ziel bestand darin, Elektrodenparameter wie Partikelgröße und Elektrodendicke zu bestimmen sowie Alterungsphänomene zu bewerten. Ein wichtiges Beispiel ist die optische Identifikation von Li-Plating nach Schnellladeexperimenten. Die Kombination aus Mikroskopie und KI-gestützter Klassifikation ermöglicht eine automatisierte Bewertung der Elektrodenoberfläche.

Abbildung 16: Strukturelle Charakterisierung zur Bestimmung von Elektrodenparametern und zur automatisierten Li-Plating-Erkennung.

Mechanische und thermische Charakterisierung

Neben elektrochemischen und strukturellen Messungen wurden mechanische und thermische Größen betrachtet. Aus mechanischer Sicht wurde die Expansion von Zellen während Ladeprozessen untersucht. Aus thermischer Sicht wurde die Erwärmung während unterschiedlicher Ladephasen analysiert. Beide Domänen liefern wichtige Zusatzinformationen, da Schnellladen nicht nur durch elektrochemische Randbedingungen, sondern auch durch Temperaturentwicklung und mechanische Belastung begrenzt werden kann.

Ein Teil der Messungen wurde in separaten Aufbauten durchgeführt und anschließend digital integriert. Dieser Ansatz entspricht dem Grundprinzip von ILAB: Unterschiedliche physikalische Beobachtungen müssen nicht zwingend in einem einzigen Messaufbau erfasst werden, sofern sie über standardisierte Protokolle, Metadaten, Datenbanken und Modelle konsistent miteinander verknüpft werden können.

Im Rahmen der multiphysikalischen Untersuchung wurde das Boost-Charge-Protokoll auf Zellebene an einer Pouch-Zelle untersucht. Die Spannungs- und Stromprofile zeigten die charakteristische Abfolge des Protokolls: eine initiale Boost-Phase mit hohem Strom, eine anschließende Stromreduktion und eine abschließende Ladephase an der oberen Spannungsgrenze. Um ein detaillierteres Verständnis des Ladevorgangs zu erhalten, wurden zusätzliche thermische und mechanische Messungen in separaten Aufbauten durchgeführt. Die Temperatur stieg während der Boost-Phase stark an, nahm nach der Stromreduktion vorübergehend ab und stieg anschließend während des verbleibenden Ladevorgangs erneut an. Parallel dazu zeigte die Zellexpansion während der Boost-Phase einen starken und nahezu linearen Anstieg, gefolgt von einer reduzierten Expansionsrate nach der Stromabsenkung. Diese separat erfassten Datensätze wurden digital zusammengeführt, um Korrelationen zwischen elektrischem, thermischem und mechanischem Verhalten zu analysieren.

UAP 2.2 Methodenentwicklung zur Koordination von Experimenten für die multiphysikalische Analyse

Boost-Charge-Protokoll und unterschiedliche Messaufbauten

Als gemeinsames Ladeprotokoll wurde ein Boost-Charge-Protokoll definiert. Dieses Protokoll beginnt mit einer Phase hoher Strombelastung, gefolgt von einer Phase mit reduziertem Strom und einer abschließenden Phase an der oberen Spannungsgrenze. Das Protokoll wurde in unterschiedlichen Domänen und Aufbauten untersucht, unter anderem in optischen Zellen und PAT-Zellen. Die Aufbauten unterscheiden sich jedoch deutlich hinsichtlich Geometrie, Elektrodenabstand und thermischer Masse.

Diese Unterschiede führen dazu, dass Messdaten nicht direkt miteinander verglichen werden können. In der optischen Zelle kann die laterale Anordnung der Elektroden zu einer effektiv größeren Elektrodendicke und einem größeren Abstand führen (siehe Abbildung 17). Dadurch kann die nutzbare Kapazität falsch abgeschätzt werden, und die tatsächliche Belastungssituation unterscheidet sich von der in anderen Aufbauten. Die Modelle aus AP1 wurden daher verwendet, um diese geometrischen und physikalischen Unterschiede zu interpretieren.

Der Vergleich zwischen PAT-Zelle und optischer Zelle zeigte, dass die Geometrie des Messaufbaus einen starken Einfluss auf die Interpretation des Ladeexperiments hat (siehe Abbildung 18). In der optischen Zelle führt die laterale Anordnung der Elektroden zu einer effektiv erhöhten Elektrodendicke und einem größeren Elektrodenabstand. Die modellbasierte Analyse zeigte, dass unter diesen Bedingungen ein erheblicher Teil des Aktivmaterials elektrochemisch schwerer zugänglich ist. Folglich kann die nutzbare Elektrodenkapazität unterschätzt werden, und die resultierende Strombelastung kann von der vorgesehenen Betriebsbedingung abweichen. Der Einsatz des P2D-Modells liefert daher eine wesentliche Grundlage, um Ergebnisse aus geometrisch unterschiedlichen Aufbauten vergleichbar zu machen und zu einem konsistenten multiphysikalischen Gesamtbild zusammenzuführen.

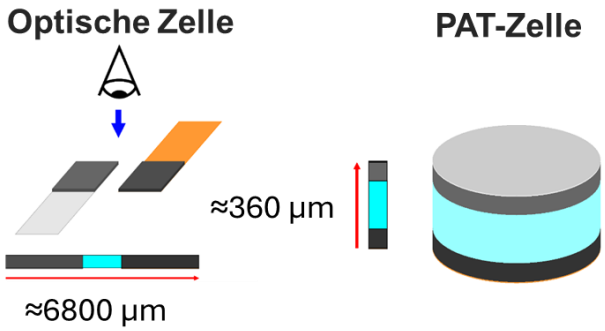


Abbildung 17: Geometrische Unterschiede zwischen der optischen Messzelle und der PAT-Zelle, die bei der modellbasierten Koordination der Experimente berücksichtigt wurden.

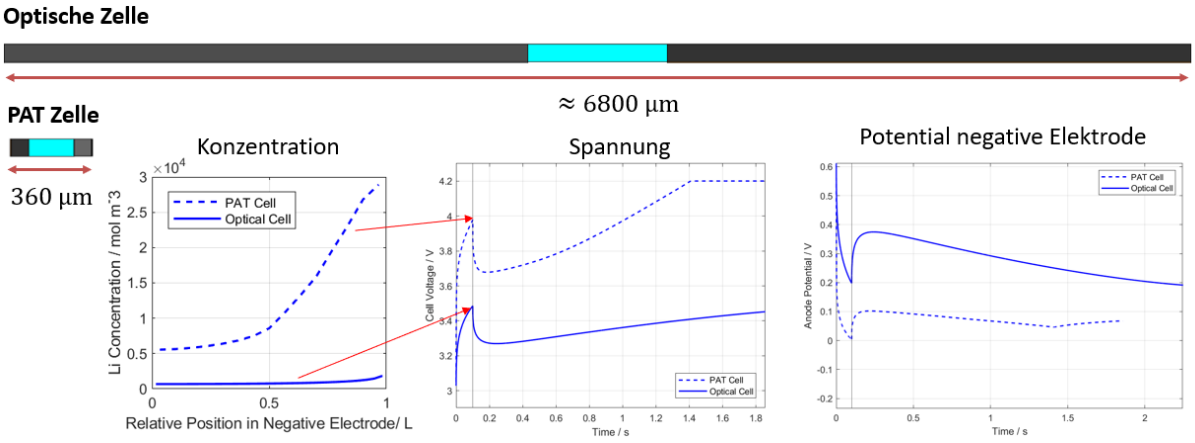


Abbildung 18: Modellbasierte Koordination von Messungen in der optischen Zelle und der PAT-Zelle auf Basis von Konzentration, Spannung und negativem Elektrodenpotential.

UAP 2.3 Test und Validierung der Methode

In-silico-Untersuchung von Ladegrenzen

Mithilfe eines parametrierten P2D-Modells wurde die Schnellladefähigkeit bei unterschiedlichen Temperaturen und mit unterschiedlichen Ladeprotokollen untersucht. Die Simulationen ermöglichen die Bewertung sicherer Betriebsbereiche, ohne jede Kombination experimentell testen zu müssen. Beispielsweise wurden CC-CP-CV- und MCC-CV-Protokolle verglichen (siehe Abbildung 19). Die Ergebnisse zeigen, dass unterschiedliche Protokolle in unterschiedlichen Temperaturbereichen Vorteile bieten können.

Die In-silico-Untersuchung ersetzt reale Messungen nicht vollständig. Sie unterstützt jedoch die Reduktion von Testmatrizen, die frühzeitige Identifikation kritischer Betriebsbereiche und eine gezieltere Versuchsplanung. AP2 erfüllt damit den zentralen Anwendungsfall des Projekts: die Reduktion des experimentellen Aufwands bei gleichzeitiger Erhöhung des physikalischen Verständnisses.

Die Validierung des multiphysikalischen Analyseansatzes erfolgte durch den Vergleich experimenteller Beobachtungen mit modellbasierten Interpretationen über unterschiedliche Aufbauten und physikalische Domänen hinweg. Das Boost-Charge-Protokoll diente dabei als gemeinsamer Referenzfall, wodurch elektrochemische, strukturelle, thermische und mechanische Ergebnisse miteinander in Beziehung gesetzt werden konnten. Die

Übereinstimmung des charakteristischen Spannungsverhaltens zwischen PAT-Zelle und optischer Zelle trotz unterschiedlicher Geometrien bestätigte, dass das modellgestützte Vorgehen geeignet ist, aufbauabhängige Effekte zu interpretieren und Informationen zwischen unterschiedlichen experimentellen Konfigurationen zu übertragen.

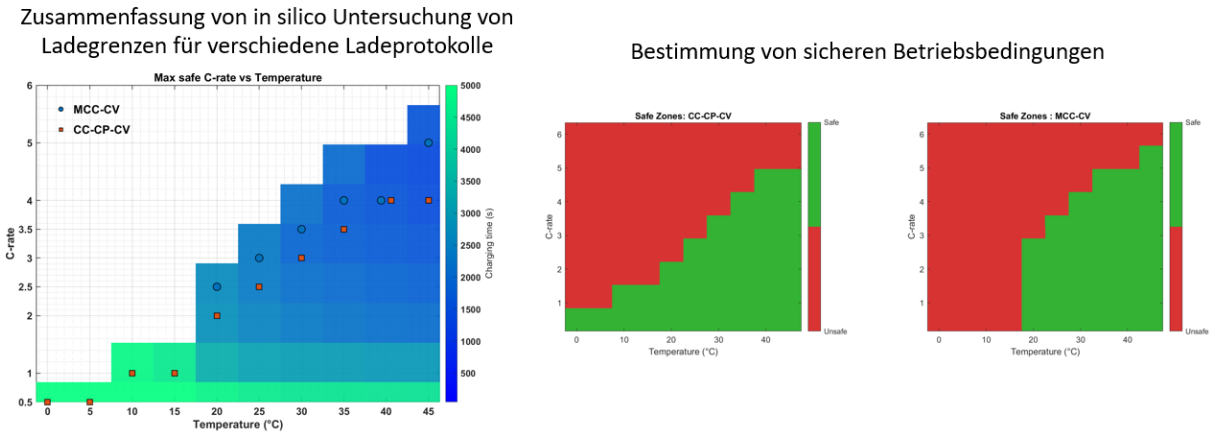


Abbildung 19: Zusammenfassung der In-silico-Untersuchung sicherer Betriebsbedingungen für unterschiedliche Ladeprotokolle und Temperaturen.

AP3: Digital vernetztes multiskaliges Experiment

AP3 erweiterte die Analyse von einzelnen physikalischen Domänen auf unterschiedliche Skalen (siehe Abbildung 20). Entsprechend der UAP-Struktur der ursprünglichen Projektbeschreibung umfasst AP3 die Erweiterung der Experimente auf größere Skalen, die Entwicklung von Upscaling-Methoden zur Reduktion des experimentellen Aufwands sowie den Test und die Validierung der Methode. Ziel war es, Erkenntnisse von der Elektrodenebene auf die Zellebene und weiter auf die Modulebene zu übertragen. Das Boost-Charge-Protokoll wurde erneut als gemeinsamer Demonstrationsfall verwendet.

Abbildung 20: Zielsetzung von AP3: digitale Integration von Batterietests auf Elektroden- und Zellebene mit Erweiterung in Richtung Modulebene

UAP 3.1 Erweiterung der Experimente auf größere Skalen

Untersuchungen auf Elektroden- und Zellebene

Auf Elektrodenebene wurden die grundlegenden elektrochemischen und strukturellen Prozesse untersucht. Auf Zellebene wurden zusätzliche Effekte betrachtet, insbesondere Temperaturentwicklung, Wärmeabfuhr und mechanische Expansion. Das Boost-Charge-Protokoll wurde auf Zellebene gemessen und mit Daten aus anderen Domänen verknüpft. Die

Spannungs- und Stromprofile zeigen die charakteristischen Phasen des Protokolls: hohe Strombelastung während der Boost-Phase, anschließende Stromreduktion und schließlich Annäherung an die Spannungsgrenze (siehe Abbildung 21).

Boost Charge Protokoll

Schritt	Abbruchkriterium
CC (2C)	t>
CC (C/2)	V>V_max
CV	I<C/10

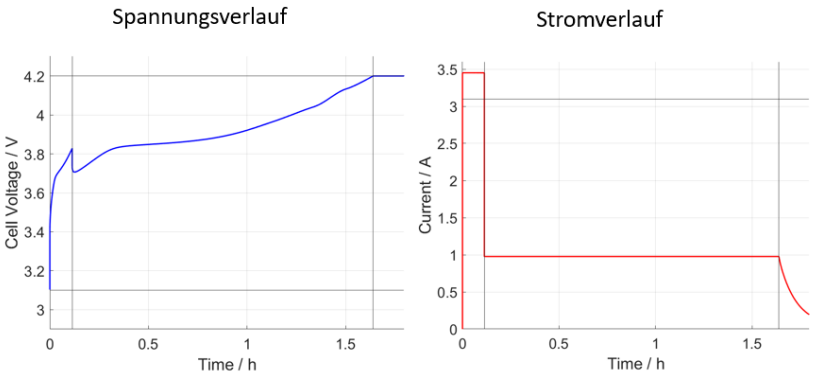


Abbildung 21: Boost-Charge-Protokoll mit Spannungs- und Stromprofil als gemeinsames Ladeprotokoll für multiskalige und multidomänenbezogene Untersuchungen.

Thermisches Verhalten

Die thermische Erwärmung spielt auf Zellebene eine besonders wichtige Rolle. Während kleine Laborzellen aufgrund ihrer großen passiven thermischen Masse nur geringe Temperaturänderungen zeigen können, erwärmen sich Pouch-Zellen während des Betriebs deutlich stärker. Im Projekt wurden Oberflächentemperaturen, Wärmeflüsse und unterschiedliche Randbedingungen untersucht. Die Messungen liefern Parameter für thermische Modelle und zeigen, wie C-Rate, Zellorientierung und Umgebungseinflüsse das Erwärmungsverhalten beeinflussen.

In der frühen Phase der multiskaligen Untersuchungen wurden erste thermische Messungen auf Zellebene mit Temperatursensoren durchgeführt, die an unterschiedlichen Positionen auf einer Pouch-Zelle angebracht waren (sieh Abbildung 22). Diese Messungen zeigten das Erwärmungsverhalten der Zelle unter verschiedenen Strompulsen und bestätigten, dass thermische Effekte beim Übergang von Experimenten auf Elektrodenebene zu größeren Zellformaten zunehmend relevant werden. Die beobachtete Temperaturverteilung und Wärmeentwicklung sind daher zentrale Faktoren für das Verständnis des Upscalings von der Elektroden- auf die Zellebene.

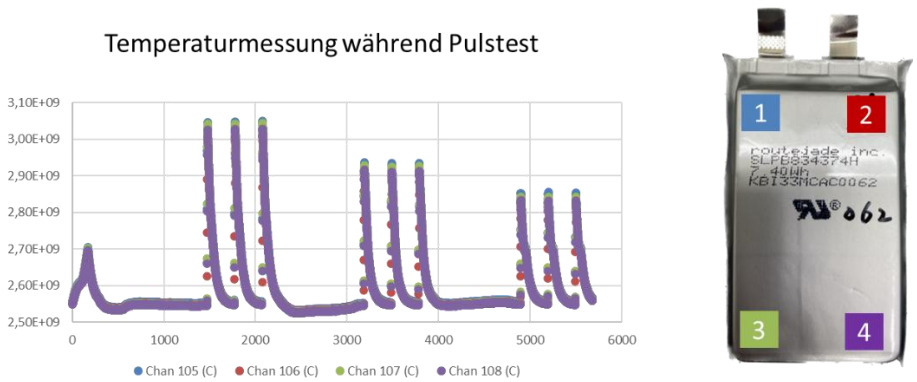
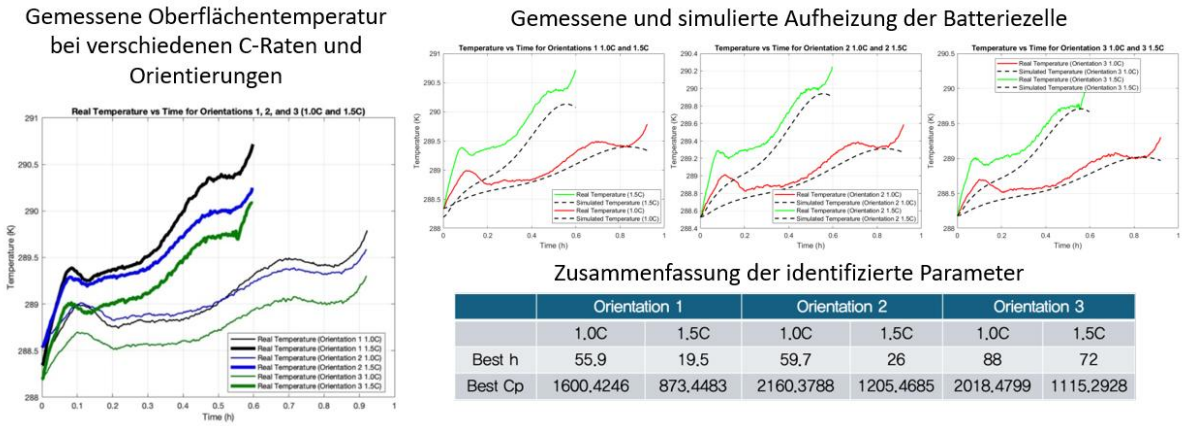


Abbildung 22: Thermische Messungen auf Zellebene mit Darstellung der Temperaturantwort einer Pouch-Zelle unter verschiedenen Strompulsen.

Anschließend wurden die thermischen Daten verwendet um thermische Modelle zu infizieren und zu parametrieren (siehe Abbildung 23). Die Kombination aus Messung und Simulation zeigte eine gute Übereinstimmung im Temperaturverlauf. Das thermische Modell konnte daher als Werkzeug zur Interpretation der Zellerwärmung genutzt und in zukünftige elektrochemisch-thermische Simulationen integriert werden.



	Orientation 1		Orientation 2		Orientation 3	
	1.0C	1.5C	1.0C	1.5C	1.0C	1.5C
Best h	55.9	19.5	59.7	26	88	72
Best Cp	1600.4246	873.4483	2160.3788	1205.4685	2018.4799	1115.2928

Abbildung 23: Gemessene Oberflächentemperaturen, simulierte Erwärmung und identifizierte thermische Parameter der Batteriezelle.

Für die modellbasierte Analyse des thermischen Verhaltens wurde ein optimierungsbasiertes Verfahren zur Parameteridentifikation implementiert. Der Optimierer wurde verwendet, um thermische Modellparameter aus gemessenen Oberflächentemperaturdaten einer großformatigen Zelle zu bestimmen (siehe Abbildung 24). Die Ergebnisse zeigten, dass das in AP1 integrierte eindimensionale thermische Modell das gemessene Temperaturverhalten gut beschreiben kann. Gleichzeitig zeigte die Analyse, dass nicht alle thermischen Parameter aus den verfügbaren Daten eindeutig identifiziert werden konnten. Diese Erkenntnis ist wichtig für zukünftige Verbesserungen des Parametrierungs-Workflows und für die geplante Kopplung des thermischen Modells mit dem P2D-Modell, um elektrochemisches und thermisches Zellverhalten integriert zu simulieren.

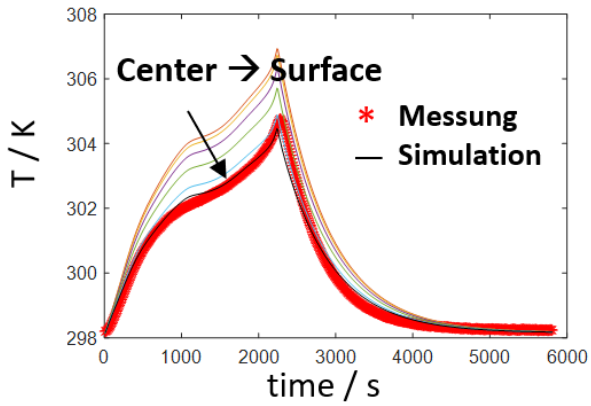


Abbildung 24: Vergleich des gemessenen und simulierten Temperaturverhaltens unter Verwendung des eindimensionalen thermischen Modells und des Workflows zur Parameteridentifikation.

UAP 3.2 Methodenentwicklung zur Reduktion des experimentellen Aufwands durch Upscaling

Vergleich von PAT-Zelle und Pouch-Zelle

Im Kontext des Upscalings ist der Vergleich zwischen PAT-Zelle und Pouch-Zelle von Bedeutung. In der PAT-Zelle wird ein deutlich dickerer Separator eingesetzt; aufgrund der großen thermischen Masse ist dort nur eine geringe Zellerwärmung zu erwarten. Die Pouch-Zelle besitzt dagegen einen dünneren Separator und kann während des Ladezyklus eine thermische Aufheizung und Expansion zeigen. Diese Unterschiede beeinflussen nachweislich Spannung, Kinetik und das Risiko von Li-Plating. Simulationen zeigten, dass die Pouch-Zelle aufgrund des dünneren Separators geringere Spannungsverluste aufweist. Gleichzeitig verändert der Temperaturanstieg die Reaktionskinetik. Für die PAT-Zelle wurde vorhergesagt, dass der Betrieb näher an der Li-Plating-Grenze liegt (siehe Abbildung 25). Durch die modellgestützte Analyse können diese Unterschiede erklärt und Messbedingungen auf unterschiedlichen Skalen besser aufeinander abgestimmt werden.

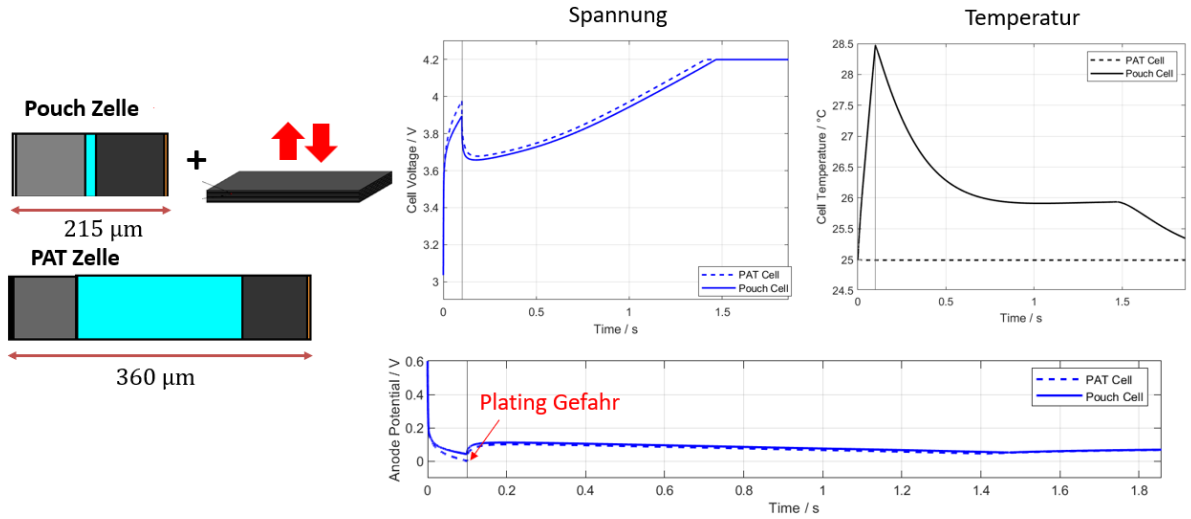


Abbildung 25: Modellbasierte Untersuchung des Einflusses unterschiedlicher Zellformate: PAT-Zelle und Pouch-Zelle mit Spannung, Temperatur und negativem Elektrodenpotential.

UAP 3.3 Test und Validierung der Methode

Untersuchungen auf Modulebene und Zellverschaltung

Auf Modulebene wurden Zellen in realen Verschaltungen untersucht. Zunächst wurde eine einzelne Batteriezelle hinsichtlich Strom, Spannung, Temperatur und Expansion charakterisiert (siehe Abbildung 26). Anschließend wurden zwei Zellen in Reihen- und Parallelschaltung untersucht. Diese Experimente zeigen, wie sich Zellverhalten, Temperaturentwicklung und mechanische Expansion unter Verschaltung verändern und wie die Messgrößen auf Modulebene integriert werden können.

Ein wichtiges Ergebnis ist, dass die in ILAB entwickelten Mess- und Analyseprinzipien nicht auf Einzelzellen beschränkt sind. Die Infrastruktur kann auch für Module und zur Untersuchung verschalteter Zellen eingesetzt werden (sieh Abbildung 27 und 28). Dies ist insbesondere für

zukünftige Arbeiten zu Betriebsstrategien, modellbasierten Reglern und Batteriemanagementsystemen relevant.

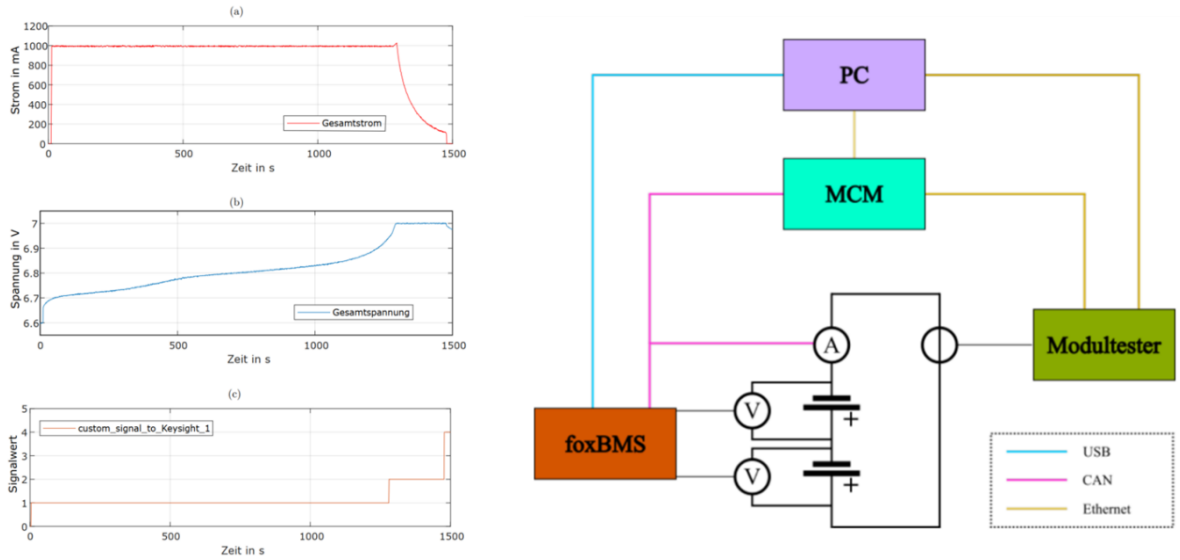


Abbildung 26: Test auf Modulebene mit zwei in Reihe geschalteten Zellen unter BMS-Überwachung und -Steuerung.

Untersuchungen auf Modulebene umfassten auch die Integration eines Batteriemanagementsystems (siehe Abbildung 26). Ein Modul aus zwei in Reihe geschalteten Zellen wurde unter BMS-Überwachung und -Steuerung geladen. Diese ersten Tests zeigten, dass die ILAB-Infrastruktur nicht nur zur Charakterisierung einzelner Zellen, sondern auch zur Untersuchung des Betriebs auf Modulebene unter realitätsnäheren Regelungsbedingungen genutzt werden kann. Dies bildet eine wichtige Grundlage für zukünftige Arbeiten zu Betriebsstrategien, modellbasierter Regelung und Batteriemanagementsystemen.

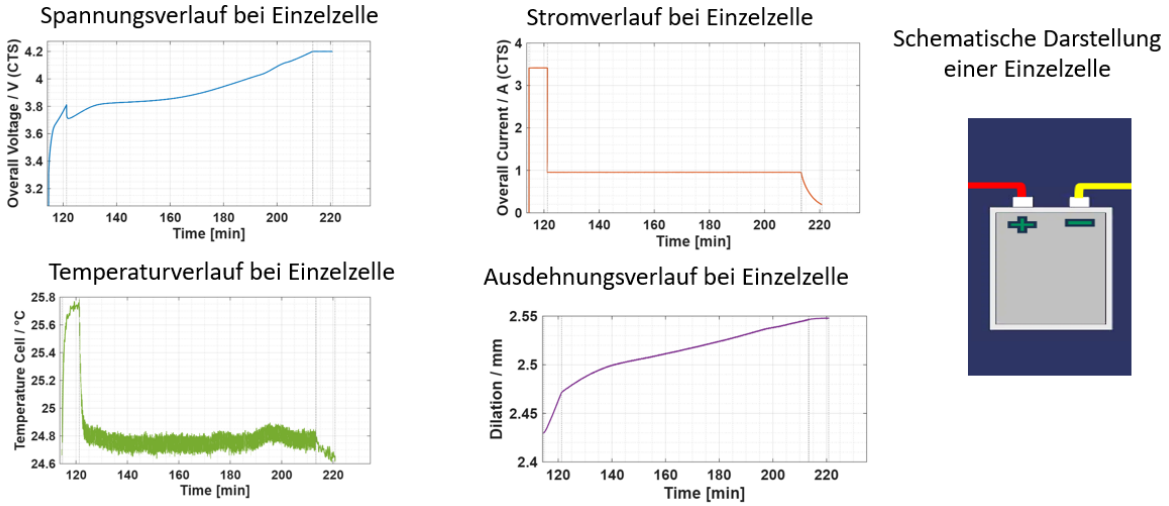


Abbildung 27: Charakterisierung einer Einzelzelle anhand von Strom, Spannung, Temperatur und Expansion.

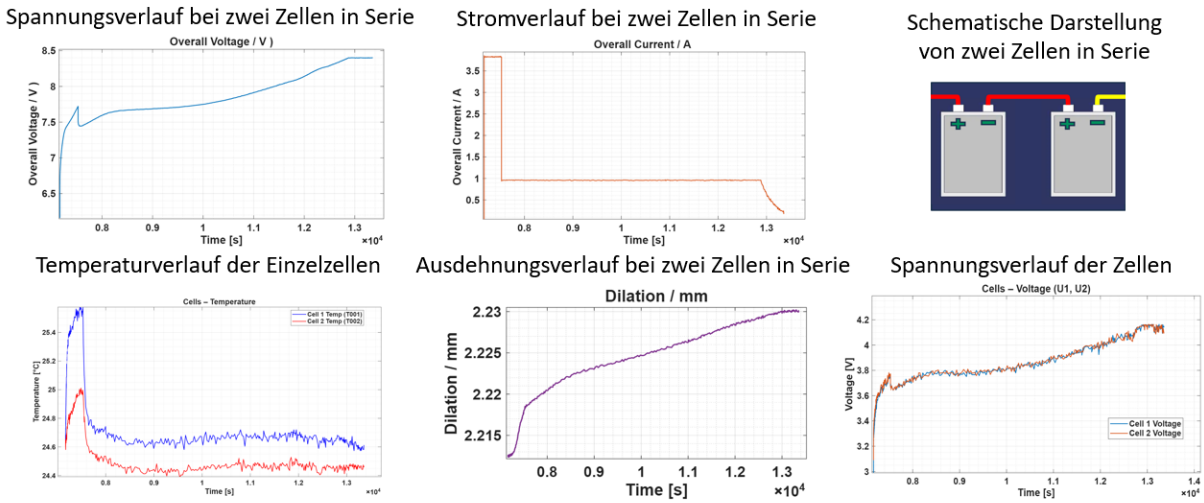


Abbildung 28: Charakterisierung zweier in Reihe geschalteter Zellen mit Spannungs-, Temperatur- und Expansionsprofilen.

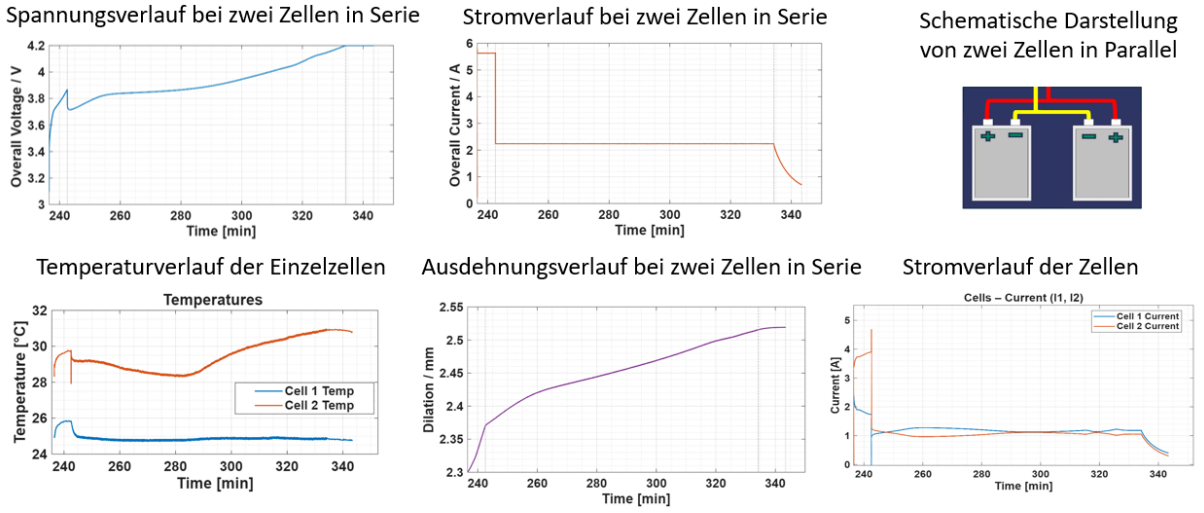


Abbildung 29: Charakterisierung zweier parallel geschalteter Zellen mit Strom-, Spannungs-, Temperatur- und Expansionsprofilen.

Die multiskalige Validierung konnte somit erfolgreich die Anwendung des ILAB-Ansatzes zeigen, sodass MS3 erreicht wurde.

Integration der Ergebnisse

Die Ergebnisse zeigen, dass die unterschiedlichen Elemente von ILAB zu einer gemeinsamen Infrastruktur zusammengeführt werden konnten. Physikalische Experimente liefern Messdaten über mehrere Skalen und in unterschiedlichen Domänen (siehe Abbildung 30). Das digitale Laborbuch dokumentiert Prüflinge, Protokolle, Metadaten und experimentelle Abläufe. Die Messdatenbank speichert zeitabhängige Signale. Die CAN-Bus-Infrastruktur ermöglicht automatisierte Steuerungs- und Mess-Workflows. Computergestützte Modelle interpretieren die Daten, simulieren Zustandsgrößen, die nicht direkt gemessen werden können, und unterstützen die Planung weiterer Experimente.

Die Verknüpfung dieser Elemente stellt den eigentlichen Mehrwert des Projekts dar. Ein einzelnes Messgerät oder ein einzelnes Modell würde nur einen begrenzten Beitrag leisten. Erst die Kombination aus vernetzter Messinfrastruktur, digitaler Nachverfolgbarkeit, automatisiertem Datentransfer und modellbasierter Analyse ermöglicht intelligentes Batterietesten. Dadurch können Experimente effizienter geplant, Ergebnisse klarer erklärt und Erkenntnisse für zukünftige Forschungsfragen wiederverwendet werden.

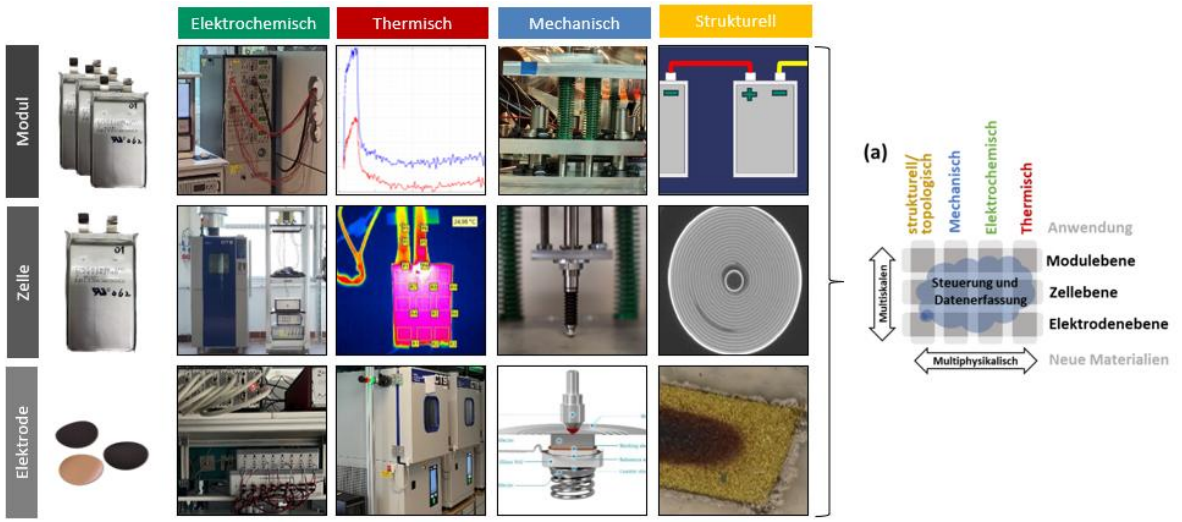


Abbildung 30: Zusammenfassung des Batterietestens im intelligenten Batterietestlabor

Wichtigste Positionen des Zahlenmäßigen Nachweises

[redacted]

Tabelle 1: [redacted]

[redacted]	[redacted]
[redacted]	[redacted]
[redacted]	[redacted]
[redacted]	[redacted]
[redacted]	[redacted]
[redacted]	[redacted]
[redacted]	[redacted]
[redacted]	[redacted]
[redacted]	[redacted]

[redacted]

Das wissenschaftliche Personal war im Rahmen des Vorhabens primär mit der Entwicklung der Methoden befasst. Darüber hinaus wurden diese Methoden anhand eines geeigneten Anwendungsbeispiels implementiert und validiert, um ihren praktischen Nutzen nachzuweisen. Zur Realisierung der technischen Infrastruktur war der Einsatz eines technischen Mitarbeiters erforderlich, der den Aufbau sowie die Inbetriebnahme der Geräte und der IT-Infrastruktur verantwortete. In diesem Zusammenhang wurden auch spezifische elektronische Komponenten konzipiert und umgesetzt. Wissenschaftliche Hilfskräfte unterstützten sowohl die methodische Entwicklung als auch die technischen Aufbauarbeiten.

Für die Durchführung der Proben- und Messkampagnen sowie für den Nachweis des Nutzens der Infrastruktur und deren Aufbau wurden entsprechende Verbrauchsmaterialien benötigt.

Da es sich bei dem Vorhaben im Kern um ein Investitionsprojekt handelt, entfiel der überwiegende Anteil der Ausgaben auf die Beschaffung von Geräten und die damit verbundenen Investitionen. Ergänzend wurden Mittel für Schulungsmaßnahmen in Bezug auf dem im Projekt beschafften Computertomographen.

Notwendigkeit und Angemessenheit der Zuwendung

Die Gewährung der Zuwendung war für die Durchführung des Vorhabens zwingend erforderlich. Der im Projekt verfolgte Ansatz des Aufbaus einer integrierten, digital vernetzten Forschungsinfrastruktur mit multiphysikalischer und multiskaliger Ausrichtung ist mit erheblichen technischen und finanziellen Risiken verbunden und wäre ohne öffentliche Förderung nicht realisierbar gewesen. Insbesondere die erforderlichen Investitionen in spezialisierte Mess- und Prüftechnik, IT-Infrastruktur sowie die Entwicklung projektspezifischer Hard- und Softwarelösungen gehen deutlich über die Möglichkeiten einer grundfinanzierten Ausstattung hinaus. Vergleichbare Gesamtsysteme sind am Markt nicht verfügbar, sodass wesentliche Komponenten eigens entwickelt, angepasst und integriert werden mussten.

Darüber hinaus erforderte das Vorhaben eine interdisziplinäre personelle Ausstattung mit wissenschaftlichem und technischem Personal, um die enge Verzahnung von Experiment, Datenmanagement und modellbasierter Analyse umzusetzen. Die damit verbundenen Aufwände sind dem Bereich der risikobehafteten Vorlaufforschung zuzuordnen, deren wirtschaftliche Verwertungsperspektiven zum Zeitpunkt der Antragstellung noch nicht hinreichend konkretisierbar waren. Eine Finanzierung durch Eigenmittel oder durch private Dritte war daher nicht darstellbar.

Die Zuwendung ermöglichte es, die notwendigen infrastrukturellen und methodischen Voraussetzungen zu schaffen und gleichzeitig innovative, über den Stand der Technik hinausgehende Ansätze zu verfolgen. Sie stellte damit die Grundlage für die erfolgreiche Umsetzung des Vorhabens sowie für die Erschließung langfristiger wissenschaftlicher und wirtschaftlicher Potenziale im Bereich der Batterietechnologien dar.

Nutzen und Verwertbarkeit der Ergebnisse

Die im Vorhaben erzielten Ergebnisse sind nachhaltig nutzbar und sowohl wissenschaftlich als auch wirtschaftlich verwertbar. Die aufgebaute Infrastruktur des intelligenten Batterietestlabors steht über die Projektlaufzeit hinaus für weitere Forschungs- und Entwicklungsarbeiten zur Verfügung und ermöglicht eine effiziente, reproduzierbare Durchführung komplexer Batterietests.

Kurz- bis mittelfristig ist eine Nutzung in weiteren Forschungsprojekten sowie in Kooperationen mit Industriepartnern vorgesehen. Die standardisierte Datenerfassung und automatisierte Auswertung führen zu einer erhöhten Effizienz und besseren Vergleichbarkeit der Ergebnisse.

Darüber hinaus bieten die entwickelten methodischen Ansätze zur Digitalisierung, Datenverarbeitung und modellbasierten Analyse Potenziale für weiterführende Anwendungen, etwa in Form von standardisierten Verfahren oder datenbasierten Dienstleistungen. Langfristig schafft die Infrastruktur eine Grundlage für den Einsatz datengetriebener Methoden, einschließlich Künstlicher Intelligenz, und trägt damit zur Beschleunigung von Innovationsprozessen in der Batterietechnologie bei. Zukünftig können insbesondere generative KI-Ansätze in die Laborinfrastruktur integriert werden, um Wissen automatisiert zu aggregieren sowie die Planung und Auslegung von Testprozeduren aktiv zu unterstützen.

Insgesamt stellen die Projektergebnisse eine tragfähige Basis für zukünftige Forschungs-, Transfer- und Verwertungsaktivitäten dar.

[redacted]

Während der Durchführung des Vorhabens bekannt gewordene Fortschritte auf dem Gebiet

Erfolgte oder geplante Veröffentlichungen der Ergbnisse

Im Laufe des Projekts sind einige Publikation entstanden, welche mit Unterstützung der ILAB-Infrastruktur realisiert wurden. Die Publikationen sind nachfolgen aufgeführt.

Lfd. Nr.	Autoren	Titel	Journal, Volume, Issue, Page	Jahr
1	F. Röder, H. Harimi, F. Schomburg, M. Han, J.C. Wurzenberger, C. Lechner, S. Kutschi	Uncertainty in solid phase diffusivity determination: Comparing electrode parameterization workflows for P2D modeling of commercial battery cells	Journal of Power Sources, 671, 239594	2026
2	F. Schomburg, T- Rüther, A. W. Schmidt, M. A. Danzer, F. Röder	Interaction between formation protocol and electrolyte composition during solid-electrolyte interphase formation: A model-supported investigation	Journal of Energy Storage, 143, 119275	2026
3	S. Ramasubramanian, C. Plank, M.A. Danzer, F. Röder	Degradation path indicators for lithium-ion batteries	Journal of Energy Storage, 140, 119113	2025

Außerdem wurde das Projekt auf einschlägigen Konferenzen einem Fachpublikum vorgestellt:

- **F. Röder**, F. Schomburg, S. Zappe, S. Ramasubramanian, Computational methods for a knowledge-driven design of the formation process, *75th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry*, Montreal, Canada, August 18-23, 202
- **F. Röder**, Identification and parameterization of battery models for cross-scale predictions*, AVL Workshop on Generation and Application of Digital Twins,* Graz, Austria, September 28, 2023, *invited talk*
- **F. Röder**, M.A. Danzer, Modellgestützte Analyse von Batterien im intelligenten Batterietestlabor, *VDI-Fachtagung Testen und Validieren elektrischer Antriebsträngе*, Nörtingen, Germany, May 9-10, 2023, *invited talk*